



METODOLOGIA DE MICROTOMOGRAFIA COMPUTADORIZADA COM
DUPLA ENERGIA PARA CARACTERIZAÇÃO MINERALÓGICA DE ROCHAS

Haimon Diniz Lopes Alves

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências em Engenharia Nuclear.

Orientador: Ricardo Tadeu Lopes

Rio de Janeiro
Janeiro de 2015

METODOLOGIA DE MICROTOMOGRÁFIA COMPUTADORIZADA COM
DUPLA ENERGIA PARA CARACTERIZAÇÃO MINERALÓGICA DE ROCHAS

Haimon Diniz Lopes Alves

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Ricardo Tadeu Lopes, D.Sc.

Prof^a. Inaya Correa Barbosa Lima, D.Sc.

Prof. Joaquim Teixeira de Assis, D.Sc.

Prof^a. Aline de Almeida Neves, PhD

Prof. Gustavo André de Deus Carneiro Vianna, PhD

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JANEIRO DE 2015

Alves, Haimon Diniz Lopes

Metodologia de microtomografia computadorizada com dupla energia para caracterização mineralógica de rochas/ Haimon Diniz Lopes Alves. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XIV, 93p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Ricardo Tadeu Lopes

Tese (Doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2015.

Referências Bibliográficas: p.73-77

1. Microtomografia. 2. Dupla energia. 3. Mineralogia.
I. Lopes, Ricardo Tadeu. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

“Teria sido melhor ir ver o filme do Pelé.”

Roberto Gómez Bolaños

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais por todo o apoio nestes 27 anos de minha existência.

Agradeço a mulher da minha vida por sempre me apoiar, aturar minhas maluquices, me fazer muito feliz e sempre ser a minha lindureza mais linda de todas as lindas e lindurezas do mundo.

Agradeço ao meu orientador por me dar a oportunidade de realizar este trabalho e pelas idéias e sugestões no decorrer do mesmo.

Agradeço a todos os amigos que sempre estiveram por perto, me apoiando nos momentos mais difíceis. Vocês sabem quem são vocês!

Agradeço ao CNPq e ao CENPES/Petrobras pelos auxílios, financeiros e materiais, para pesquisa e desenvolvimento da tese.

Agradeço, principalmente, a Deus por sempre me deixar saber que ele está presente e me ajudando a nunca desistir dos meus sonhos e objetivos.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

METODOLOGIA DE MICROTOMOGRÁFIA COMPUTADORIZADA COM DUPLA ENERGIA PARA CARACTERIZAÇÃO MINERALÓGICA DE ROCHAS

Haimon Diniz Lopes Alves

Janeiro/2015

Orientador: Ricardo Tadeu Lopes

Programa: Engenharia Nuclear

A combinação entre a composição elementar e a densidade de um volume determinado de uma amostra fornece seu coeficiente de atenuação. Este fato complica a interpretação de imagens microtomográficas para amostras com composição heterogênea porque não determina, a priori, se as diferenças observadas em tons de cinza são devidas às diferenças na densidade, na composição elementar, ou alguma combinação destas. Se as contribuições da densidade e composição elementar podem ser obtidas, tem-se uma poderosa ferramenta para caracterização não destrutiva da distribuição interna da densidade e composição elementar de um objeto. Com isso, desenvolveu-se um estudo sobre uma metodologia de aplicação da dupla energia em análises de imagens microtomográficas na identificação de minerais dividido na simulação do coeficiente de atenuação para duas energias diferentes e validação da metodologia, na obtenção da energia efetiva do microtomógrafo usado no estudo e na calibração do sistema por dupla energia através de materiais de referência. Os resultados da simulação mostram que a metodologia aplicada a microtomografia é válida e os resultados da calibração mostram a capacidade da técnica em identificar a densidade e o número atômico efetivo através das imagens microtomográficas. A técnica de dupla energia para microtomografia computadorizada mostra-se promissora para identificação de minerais de diversas composições e estruturas, inclusive diferenciando aqueles que possuem coeficientes de atenuação muito próximos entre si, os quais normalmente não são diferenciáveis na análise e processamento de imagens microtomográficas adquiridas de forma convencional.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

METHODOLOGY OF COMPUTED MICROTOMOGRAPHY FOR
MINERALOGICAL CHARACTERIZATION OF ROCKS

Haimon Diniz Lopes Alves

January/2015

Advisor: Ricardo Tadeu Lopes

Department: Nuclear Engineering

The combination of density and elemental composition of a given volume of a sample provides its attenuation coefficient. This fact complicates the interpretation of microtomographic images for samples with heterogeneous composition because it does not determine whether the observed differences in shades of gray are due to differences in density, the elemental composition, or some combination of the two. If the contributions of density and elemental composition can be obtained, we have a powerful tool for nondestructive characterization of internal distribution of density and elemental composition of an object. As a result, a study was developed on a methodology for application of dual energy in microtomographic image analysis to identify mineral which was divided in the simulation of the attenuation coefficient for two different energies and validation of the methodology, the obtainment of the effective energy of the microtomograph used in this study and the calibration of the system by dual energy through reference materials. Simulation results show that the methodology applied to microtomography is valid and calibration results show the ability of the technique to identify the density and effective atomic number with the microtomographic images. The dual-energy computed microtomography technique shows promise for the identification of different mineral compositions and structures, differentiating those which have very close attenuation coefficients to each other, which are usually not distinguishable in the microtomographic image analysis and processing acquired through conventional methods.

Sumário

I. INTRODUÇÃO	1
II. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1. Microtomografia computadorizada	4
2.1.1. Histórico.....	4
2.1.2. Aplicações na Construção Civil.....	5
2.1.3. Aplicações odontológicas e médicas	5
2.1.4. Aplicações na Geologia	6
2.2. Metodologia de dupla energia	8
2.2.1. Histórico.....	8
2.2.2. Aplicações na geologia	9
2.2.3. Fontes monoenergéticas.....	10
2.2.4. Materiais diversos	11
III. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	13
3.1. Histórico	13
3.2. Princípios básicos.....	14
3.3. Fonte de radiação	16
3.4. Colimação	17
3.5. Detector.....	18
3.6. Evolução e desenvolvimento	20
3.7. Qualidade da imagem.....	23
3.7.1. Ruído de pixel	23
3.7.2. Resolução espacial	24
3.7.3. Relação Sinal Ruído.....	25
3.7.4. Resolução em contraste	26

3.7.5. Artefatos da imagem	26
3.8. Reconstrução	28
3.8.1. Projeção	29
3.8.2. Transformada de Radon	30
3.8.3. Transformada de Fourier	31
3.8.4. Teorema da fatia de Fourier	32
3.8.5. Teorema da convolução	33
3.8.6. Retroprojeção Filtrada com feixe paralelo.....	34
3.8.7. Retroprojeção Filtrada com feixe leque	35
3.8.8. Algoritmo de Feldkamp	37
3.9. Dupla Energia associada a microtomografia	39
3.10. Minerais e rochas.....	41
IV. METODOLOGIA	43
4.1. Sistema tomográfico	43
4.2. Software de reconstrução NRecon	45
4.3. Software de Quantificação CTan	47
4.4. Simulação	48
4.5. Energia efetiva	50
4.6. Calibração	52
4.7. Processamento de imagem e dados	56
V. RESULTADOS	58
5.1. Simulação	58
5.2. Energia efetiva	61
5.3. Calibração	62

5.4. Processamento de imagem e dados	65
5.4.1. Imagens em densidade e número atômico	65
5.4.2. Segmentação mineralógica	66
5.4.3. Aplicações.....	67
VI. CONCLUSÕES	72
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	73
ANEXO A.....	78
Código Matlab	78
ANEXO B	81
Artigos Publicados.....	81

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: (a) J.H. Radon; (b) representação da função do objeto e transformada de Radon (Radon, 1917).	13
Figura 2: (a) A.M.Cormack e aparato de tomografia; (Cormack, 1963) (b) G.N.Hounsfield; (c) protótipo de tomógrafo; (d) primeira tomografia (Hounsfield, 1973).	14
Figura 3: Esquema simplificado do processo de aquisição e reconstrução da tomografia de um objeto (adaptado de Kalender, 2011).	15
Figura 4: (a) tubo de raios X convencional; (b) tubo de raios X microfocos (adaptado de Buzug, 2008)	17
Figura 5: (a) detector câmara de ionização; (b) detector cintilador (adaptado de Knoll, 2010).	18
Figura 6: (a) Conversão indireta em um elemento do detector flat-panel; (b) conversão direta em um elemento do detector flat-panel (adaptado de Knoll, 2010).	19
Figura 7: (a) 1ª geração feixe paralelo; (b) 2ª geração feixe parcial leque; (c) 3ª geração feixe leque com rotação do detector; (d) 4ª geração feixe leque com detector estacionário (adaptado de Kalender, 2011).	21
Figura 8: Esquema da aquisição tomográfica em um microtomógrafo, com tubo de raios X microfocos de feixe cônico e detector flat-panel fixos, e suporte de amostra girando sobre o próprio eixo (adaptado de Kalender, 2011).	22
Figura 9: (a) Imagem original; (b) Imagem com influência de ruído (Kalender, 2011).	23
Figura 10: Métodos diretos usando (a) Buracos e (b) fios para cálculo da MTF; (c) imagem tomográfica de um objeto pontual, mostrando a função dispersão de ponto e respectiva MTF, para cálculos indiretos da resolução espacial (adaptado de Kalender, 2011).	25
Figura 11: Diferentes objetos para observação da resolução em contraste (Kalender, 2011).	26
Figura 12: Artefatos da tomografia (a) Imagem ideal; (b) Imagem com ruído e sem filtro de suavização; (c) Desalinhamento; (d) Artefato de anel; (e) Artefato de endurecimento de feixe.	28
Figura 13: Identificação de parâmetros para diferentes geometrias de feixe (Kalender, 2011).	30
Figura 14: (a) objeto original; (b) sinograma. (Buzug 2008)	31

Figura 15: Representação de um sinal no (a) domínio temporal; (b) domínio da frequência. (Buzug 2008)	32
Figura 16: Teorema da fatia de Fourier (a) transformada das projeções; (b) transformada bidimensional. (Buzug 2008)	33
Figura 17: Efeito de diversos filtros sobre o sinal original (Kalender, 2011).	34
Figura 18: Comparação da reconstrução através do método de retroprojeção com ou sem filtro (Kalender, 2011).	35
Figura 19: (a) Microtomógrafo modelo 1173; (b) Tubo de raios X microfocos (c) Detector flat-panel.	43
Figura 20: (a) Projeção; (b) Parâmetros de reconstrução.	46
Figura 21: (a) reconstrução de uma fatia transversal da amostra; (b) histograma para coeficiente de atenuação; (c) valores de coeficiente de atenuação mínimo e máximo. .	47
Figura 22: (a) seção transversal; (b) região de interesse (ROI); (c) imagem binarizada e histograma de binarização; (d) quantificação e distribuição por tamanho de poros.	48
Figura 23: Exemplo de espectros do tubo de raios X em diferentes energias.	50
Figura 24: (a) esfera de alumínio; (b) seção transversal da reconstrução da esfera; (c) escolha do ROI; (d) histograma do coeficiente de atenuação; (e) imagem binarizada; (f) quantificação do coeficiente de atenuação (valor médio circulado em vermelho).....	52
Figura 25: (a) cilindro com bastões dos elementos analisados; (b) imagem reconstruída de aquisição a 80 kV; (c) imagem reconstruída de aquisição a 130 kV.	53
Figura 26: (a) amostra de dolomito; (b) imagem microtomográfica, com identificação de poros e materiais densos pelas setas vermelhas.....	54
Figura 27: Amostras de minerais usadas na calibração mineralógica.	54
Figura 28: Minerais padrões	55
Figura 29: Amostras F1, F3 e F7 de rochas para análise qualitativa.....	57
Figura 30: Gráfico de calibração para simulação por elementos homogêneos (puros)..	59
Figura 31: Gráfico para simulação por elementos heterogêneos (minerais).	59
Figura 32: Gráfico comparando valores experimentais e teóricos para o coeficiente de atenuação referente a esfera de alumínio.....	62
Figura 33: Gráfico de calibração para as barras.	63
Figura 34: Gráfico para calibração pelas amostras de minerais.	64
Figura 35: Gráfico para calibração pelas amostras de minerais padrões.....	65
Figura 36: Imagem de densidade (a) 2D; (b) 3D.....	66
Figura 37: Imagem de número atômico efetivo (a) 2D; (b) 3D.....	66

Figura 38: Segmentação mineralógica de uma imagem microtomográfica em uma imagem em escala de minerais.	67
Figura 39: (a) seção transversal; imagens em (b) densidade, (c) número atômico e (d) mineralogia; histograma de (e) densidade e (f) número atômico; (g) imagem 3D de mineralogia da amostra F1.	68
Figura 40: (a) seção transversal; imagens em (b) densidade, (c) número atômico e (d) mineralogia; histograma de (e) densidade e (f) número atômico; (g) imagem 3D de mineralogia da amostra F3.	69
Figura 41: (a) seção transversal; imagens em (b) densidade, (c) número atômico e (d) mineralogia; histograma de (e) densidade e (f) número atômico; (g) imagem 3D de mineralogia da amostra F7.	70

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Parâmetros de aquisição utilizados no presente estudo.	44
Tabela 2: Elementos homogêneos (puros) e parâmetros de simulação.	49
Tabela 3: Elementos heterogêneos (minerais) e parâmetros de simulação.	49
Tabela 4: Minerais e suas composições químicas moleculares.	55
Tabela 5: Minerais padrões utilizados na calibração.....	56
Tabela 6: Coeficientes de calibração de elementos homogêneos para μ CT-DE.....	60
Tabela 7: Coeficientes de calibração de elementos heterogêneos para μ CT-DE.....	60
Tabela 8: Comparação de dados experimentais (ρ_{exp} , $Z_{\text{ef,exp}}$) e dados teóricos (ρ , Z_{ef}) para densidade e número atômico efetivo de V, K e Na.	60
Tabela 9: Comparação de dados experimentais (ρ_{exp} , $Z_{\text{ef,exp}}$) e dados teóricos (ρ , Z_{ef}) para densidade e número atômico efetivo dos minerais rutilo, diopsita e cuprita.....	60
Tabela 10: Comparação de dados experimentais e teóricos para energia máxima e correspondente energia efetiva usadas.	61
Tabela 11: Valores experimentais para uma amostra de dolomite, obtidos através da μ CT-DE, comparados aos valores teóricos.	63
Tabela 12: Valores experimentais para uma amostra de albita, obtidos através da μ CT-DE, comparados aos valores teóricos.	64

I. Introdução

A tomografia computadorizada por raios X é uma técnica que permite a avaliação não destrutiva das estruturas internas de amostras analisadas. De fato, análises com tomografia produzem imagens de uma secção transversal de uma amostra pela reconstrução de uma matriz dos seus respectivos coeficientes de atenuação de raios X (Kalender, 2011).

A composição química e densidade de um elemento de volume determina seu coeficiente de atenuação. Sendo assim, em amostras de composição heterogênea, isto complica a interpretação da imagem porque não determina, a priori, se as diferenças observadas nos tons de cinza da imagem são devido a diferenças na densidade, composição, ou alguma combinação destas. Por outro lado, se as contribuições da densidade e composição na atenuação podem ser resolvidas, então tem-se uma poderosa ferramenta para caracterização não destrutiva da distribuição interna da densidade e composição de um objeto. Fica então evidente que a capacidade de diferenciar variações na composição pode ser extremamente importante em análises de compostos (Van Geet *et al.*, 2000).

A técnica de dupla energia aplicada a microtomografia de raios X pode fornecer suficientes informações para resolver as contribuições da densidade e da distribuição elementar na imagem. Esta técnica tem a vantagem de obter um único espectro de absorção para cada elemento em função da energia e é usualmente baseada na determinação das contribuições relativas da absorção fotoelétrica e do espalhamento Compton no coeficiente de atenuação total. A contribuição fotoelétrica é uma função que decresce rapidamente com a energia dos raios X e é muito intensa para materiais com alto número atômico (Z). O espalhamento Compton é uma função que aumenta com a energia utilizada e é aproximadamente independente de Z , dependendo primariamente da densidade eletrônica do material. É possível separar os efeitos destas duas interações e usar esta informação para determinar precisamente a densidade e número atômico efetivo para cada pixel, ou voxel, da imagem da amostra inspecionada. Enquanto o coeficiente de atenuação de massa depende apenas do número atômico do material, o coeficiente de atenuação linear é uma função que depende do número atômico e da densidade do material e varia com a energia, podendo ser usado para diferenciação por energias diferentes de aquisição tomográfica (Cnudde e Boone, 2013).

Para tomografia em dupla energia com fontes de raios X monoenergéticos, a separação pode ser obtida através de modelos físicos ou métodos de calibração. Métodos de calibração, onde a atenuação detalhada para materiais de interesse é medida como uma função da espessura para espécimes de teste bem caracterizados, também têm sido aplicados com sucesso, para inspeções, usando fontes de raios X polienergéticos. Neste caso, as diferentes energias dos raios X podem ser obtidas por mudanças na voltagem do tubo de raios X, por filtragem seletiva em energia do espectro do feixe, ou ambos.

Entretanto fontes de feixes polienergéticos, ou policromáticos, são uma dificuldade adicional, considerando a associação da densidade e do número atômico efetivo na composição do valor final do coeficiente de atenuação, o qual depende da energia utilizada. Como são dispositivos mais comumente utilizados, há interesse na aplicação da dupla energia através de tomografias obtidas por feixes policromáticos para identificar a real composição e distribuição da densidade e número atômico efetivo dentro da amostra.

Isto não pode ser conseguido por um sistema tomográfico convencional porque não existe uma única combinação destes parâmetros para uma energia específica ou espectro de energia. Este problema pode ser superado obtendo-se dados com dois diferentes espectros de raios X, caracterizando a técnica de dupla energia para aplicação na tomografia computadorizada por raios X.

O objetivo deste trabalho foi o desenvolvimento e aplicação de uma metodologia para determinação do número atômico efetivo e da densidade de amostras mineralógicas em um sistema de microtomografia de feixe de raios X policromático através da técnica de dupla energia.

A metodologia deste estudo foi dividida em três etapas principais: a validação da metodologia proposta pela técnica de μ CT-DE através da simulação da mesma usando valores teóricos tabelados de densidade, número atômico e coeficiente de atenuação para elementos químicos homogêneos e heterogêneos da tabela periódica; a avaliação do espectro do tubo de raios X com relação a energia efetiva pela interação com uma esfera de alumínio certificada; e a aplicação da metodologia para calibração do sistema tomográfico utilizando amostras geológicas e minerais de densidade e número atômico efetivo conhecidos.

Após validação e calibração, a metodologia foi aplicada em um algoritmo desenvolvido para processamento de dados das imagens tomográficas, de forma a obter

imagens em escala de densidade e número atômico efetivo e, com a combinação destes parâmetros, a segmentação mineralógica.

II. Revisão bibliográfica

2.1. Microtomografia computadorizada

2.1.1. Histórico

Para entendimento do processo de microtomografia computadorizada (μ CT), é necessário primeiro entender os princípios da radiação utilizada, no caso, os raios X. A descoberta dos raios X deu-se por Wilhelm Conrad Röntgen ao trabalhar intensamente com tubos de raios catódicos (Röntgen, 1895). Seu artigo clássico descreve todos os trabalhos feitos previamente a descoberta dos raios X, a identificação de uma nova radiação proveniente dos tubos de raios catódicos e a intensa investigação realizada para entender as propriedades físicas referentes a estes raios invisíveis.

Sem ligação com o uso de radiação, Johann Radon descobrira a solução matemática do que viria a ser a reconstrução de projeções obtidas através de tomografia, por métodos algébricos, sem ter noção que seu resultado teria aplicações, futuramente, na técnica da tomografia computadorizada (Radon, 1917). Apesar de ter sido um trabalho pioneiro, com uma extensa e trabalhosa matemática, seu trabalho praticamente não teve reconhecimento e ficou, por muitos anos, sem qualquer menção científica.

Allan Cormack desenvolveu um algoritmo que permitiu a reconstrução computacional de uma tomografia, e testou os resultados em aplicações radiológicas (Cormack, 1963; Cormack, 1964). Somente alguns anos depois, entretanto, Godfrey Hounsfield conseguiria construir um aparato experimental comercial onde obteria a primeira imagem tomográfica de um cérebro humano e, dessa forma, disseminaria o uso da tomografia computadorizada (Hounsfield, 1973; Ambrose, 1973).

Inicialmente, a tomografia computadorizada apenas satisfazia um esquema de medição bidimensional, mas com a inserção do algoritmo tridimensional de Feldkamp pode-se finalmente obter reconstruções das imagens tomográficas de forma mais rápida e com melhor resolução utilizando a geometria de feixe cônico (Feldkamp *et al.*, 1984).

A partir daí, com a sofisticação dos tubos de raios X sofisticados e a partir do rápido crescimento da arquitetura computacional, novos tomógrafos foram construídos, obtendo-se resultados mais rápidos, com melhor resolução e menor dose de radiação em seres vivos (Buzug, 2008).

A microtomografia computadorizada (μ CT) veio por satisfazer a necessidade de aparelhos não só para uso em laboratórios de pesquisa de médio e pequeno porte, como também para aplicações comerciais em diversas áreas do conhecimento, como a construção civil, petróleo e gás, biologia, médica, geologia, entre outros.

2.1.2. Aplicações na Construção Civil

Estudos recentes na área de construção civil utilizando a μ CT são empregados para avaliar parâmetros como a porosidade em amostras de concreto, que podem ter bastante influência nas propriedades mecânicas do material. Estes estudos vêm sendo desenvolvidos para auxiliar a engenharia de construção, de forma a se determinar o material considerado com melhor custo/benefício para uso. Em geral, métodos para comparação são utilizados para se tentar avaliar a eficácia da tomografia em relação a técnicas mais conhecidas e consagradas na literatura ou, de forma inversa, utilizando a μ CT como técnica de referência para identificar novos métodos para obtenção do mesmo resultado.

Há comparações feitas entre resultados de técnicas como μ CT de raios X, absorção de água sob vácuo e porosimetria por intrusão de mercúrio, onde verifica-se a compatibilidade entre as técnicas, respeitando-se as limitações de resolução de cada uma (Cnudde *et al.*, 2008).

Outros estudos de comparação de dados de porosidade obtidos utilizando a μ CT de raios X e scanners comerciais, associados a técnicas de processamento digital de imagem e morfologia matemática, identificam a porosidade de amostras de interesse para comparação com os mesmos dados encontrados na literatura (Carvalho *et al.*, 2010).

2.1.3. Aplicações odontológicas e médicas

Na odontologia, o advento da μ CT permitiu um avanço em estudos no uso de implantes, cimentos e materiais restauradores, efeito de diferentes técnicas de tratamento de lesões de cárie, entre outros exemplos.

A importância da μ CT na odontologia pode ser vista na calibração de um sistema microtomográfico para estudo de técnicas de remoção de cárie em materiais dentários bioativos, de forma quantitativa, utilizando técnicas de processamento de imagens, calibração para densidade mineral e correção de artefatos (Neves *et al.*, 2010).

Outras aplicações incluem a avaliação da distribuição e acumulação de debris (restos de dentina) após o tratamento de canais radiculares com diferentes técnicas e

soluções, através de μ CT e processamento de imagens utilizando softwares livres (Marins *et al.*, 2013).

Na área médica, a μ CT tem grandes aplicações no estudo de patologias de tecidos duros. Trabalhos de pesquisa vêm sendo desenvolvidos de forma a estudar e quantificar parâmetros histomorfométricos, bem como desenvolver novas metodologias mais adequadas à análise das imagens obtidas pela μ CT.

O desenvolvimento da análise tridimensional por microtomografia em conjunto com análises bidimensionais, além da caracterização de filtros cerâmicos quanto a porosidade, a relação entre material ósseo e a área total relativa a ossos porosos, entre outros parâmetros, são alguns dos interesses de estudo ainda atuais na Medicina (Oliveira, 2002).

2.1.4. Aplicações na Geologia

Na área de geologia, extração de petróleo e gás, há bastante interesse no estudo não destrutivo de rochas reservatório para identificar e separar os diferentes tipos de rochas e sedimentos e o seu potencial petrolífero. A μ CT é uma alternativa viável, visto que apresenta sólida base teórica reconhecida, resultados confiáveis, resolução de micrômetros para identificação microscópica e não necessita de destruição das amostras.

A variedade de amostras sugere identificar os diferentes tipos e detalhes da técnica de μ CT, em relação a escolha de tubos de raios X, detectores, artefatos que surgem dependendo do sistema ou da amostra escolhida e algumas aplicações nas geociências como, por exemplo, o uso da μ CT para análise quantitativa de texturas metamórficas, obtenção da porosidade de amostras de calcário, entre outras (Ketcham e Carlson, 2001).

Estudo sobre capacidade de deformação de materiais geológicos, sob influência de compressão, para visualização de trincas são importantes pois podem auxiliar o entendimento da ocorrência de fraturas. Interessa-se comparar a amostra antes e após a sua deformação devido à aplicação de uma força ou tensão (Zabler *et al.*, 2008).

O minério de ferro, encontrado na natureza, é um precursor de produtos siderúrgicos e sofre diversas interferências de redução, refinamento e queima antes do produto final. A qualidade deste material, associada a sua resistência mecânica e capacidade de transferência de calor, é imprescindível ao seu uso. Como são objetos de porosidade microscópica, a comparação de técnicas de microtomografia com microscopia eletrônica de varredura permitem o controle da distribuição de tamanho de objetos

esféricos dispersos pelo volume das amostras, além da sua porosidade (Bhuiyan *et al.*, 2013).

Há grande interesse no estudo de propriedades físicas geológicas de amostras de rochas porosas e a combinação de diversas técnicas auxilia na obtenção de um resultado mais completo sobre os diferentes parâmetros ligados a estrutura rochosa, bem como a associação dos mesmos. A tomografia computadorizada em laboratório e obtida por radiação sincrotron, associada a métodos computacionais e emissão de raios X por indução de prótons, permite combinar e relacionar a conectividade, difusão e permeabilidade da rede de poros, simular o fluxo de fluidos através dessa rede, entre outras possibilidades (Bielecki *et al.*, 2013).

A resolução de um sistema tomográfico é um fator limitante para a quantificação correta da informação contida em imagens de amostras geológicas e o conhecimento da resolução de um sistema microtomográfico associado ao estudo de parâmetros geológicos, como a porosidade, de grande importância para extração de recursos naturais, torna-se essencial para uma correta análise da estrutura de amostras de rochas (Machado *et al.*, 2014).

A microtomografia está também associada ao estudo do processamento de imagens de rochas e um dos fatores mais importantes deste processo é a segmentação, ou seja, a separação e identificação de estruturas para análise. A influência de diversos métodos, entre eles o manual, para segmentação de imagem pode causar grande variação do resultado final, dependendo da escolha feita por operadores diferentes, sobre parâmetros de interesse como porosidade e sua distribuição. Em muitos casos uma comparação com métodos de segmentação automáticos é desejável. Há uma grande dificuldade de segmentação padrão manual ainda hoje, e percebe-se que os resultados dependem, também, da resolução espacial da microtomografia e a região de interesse escolhida para análise por cada operador, não sendo uma escolha trivial (Anderson *et al.*, 2012).

A tomografia possui artefatos associados ao tipo da radiação que, em geral, é polienergética. Muitas metodologias podem ser encontradas para correção do efeito de endurecimento de feixe (beam hardening) após a reconstrução tomográfica, sem necessitar de conhecimento prévio tanto do espectro de raios X como dos coeficientes de atenuação em amostras geológicas compostas de diversos minerais (Zoran *et al.*, 2013). É possível relacionar fases encontradas nas amostras, o artefato e a distância até o centro de um cilindro, para possibilitar a inferência das fases em todas as posições. São métodos

que permitem uma segmentação simplificada e rigorosa das fases, mas limitados para amostras com forma cilíndrica, pois o beam hardening deixa de ser uma função radial para amostras não cilíndricas.

O grande interesse no estudo de estruturas de rochas e solos vem estimulando o surgimento de métodos de segmentação de imagens microtomográficas específicos para esses tipos de amostras. A associação e subsequente comparação com métodos clássicos, como Otsu, e métodos locais desenvolvidos para análises de solo, em relação a medidas de parâmetros de solo, servem como referência e identificam a porosidade visível como fator suficiente para validação e aprimoramento de métodos locais. Métodos dedicados são, em geral, de melhor desempenho, mas é possível obter, mais eficientemente, resultados semelhantes (Beckers *et al.*, 2014).

2.2. Metodologia de dupla energia

2.2.1. Histórico

Na tomografia convencional, materiais de pequeno e de elevado número atômico, se presentes em determinadas concentrações, podem causar atenuações muito semelhantes, não sendo possível a sua diferenciação. A técnica de dupla energia permite esta diferenciação, usando informação obtida por tomografias geradas através de dois feixes de energias diferentes. A tomografia por dupla energia permite caracterização de tecidos, além das tradicionais análises morfológicas de volumes tomografados. Suas primeiras menções originam-se de aplicações médicas, mas o mesmo problema de diferenciação de estruturas é evidente em diversas áreas de aplicação como geologia, biologia, materiais, entre outros.

A comparação entre a tomografia, microtomografia e aplicação da dupla energia é inevitável. Um apanhado dos princípios físicos da tomografia computadorizada, utilizada na Medicina, e sua evolução com o surgimento de tubos microfocados mostra as mudanças significativas em relação a parâmetros, como resolução, e as diferentes aplicações possíveis. O uso da técnica de dupla energia na microtomografia computadorizada se destaca, pois com o uso de materiais de calibração torna possível identificar a densidade e número atômico de qualquer amostra sob as mesmas condições experimentais, em duas energias de aquisição diferentes, análogo ao processo tomográfico em Medicina (Van Geet *et al.*, 2000).

Há trabalhos que apresentam uma extensa revisão da tecnologia acerca da microtomografia e suas aplicações na área de geociências. Houve uma grande evolução nos últimos anos no uso da microtomografia, com o desenvolvimento de tomógrafos de menor dimensão comparados aqueles utilizados em aplicações médicas. Fica evidente a grande vantagem da técnica, por ser não destrutiva, mas existem diversas limitações físicas importantes para análises geológicas. Aplicações diversas incluem: caracterização da estrutura porosa em 3D como porosidade, distribuição por tamanho de poros e geometria dos poros – com ênfase em estudos de fenômenos de desgaste e conservação; avaliação e diferenciação mineralógica comparando a microtomografia com técnicas complementares como a microscopia petrográfica, microscopia eletrônica por varredura, entre outras. Na área de caracterização de reservatórios, há um interesse não apenas na quantificação dos parâmetros 3D, mas também de fases diagenéticas e sedimentares; diferenciação química e propriedades de silicatos e metais fundidos a alta pressão. Avaliação e caracterização morfológica de peças raras e fósseis permitem, sendo a microtomografia uma técnica não destrutiva, a catalogação e identificação da estrutura interna tridimensional destes objetos, limitada originalmente por uma análise externa superficial (Cnudde e Boone, 2013).

2.2.2. Aplicações na geologia

Atualmente, há diversos sistemas microtomográficos disponíveis no mercado, cada um especializado para alguns tipos de amostras. Há diversas comparações entre sistemas microtomográficos com diferentes ampliações e resoluções, de acordo com o tamanho da amostra analisada. Acrescido a isso, a possibilidade do uso da técnica de dupla energia feito para quantificação e extração de informações sobre densidade e porosidade, referente à mineralogia, da amostra, com o objetivo de uma análise petrográfica tridimensional, em oposição as análises bidimensionais geológicas em lâminas petrográficas classicamente feitas (Van Geet *et al.*, 2001).

A técnica de dupla energia permite uma descrição petrográfica, com o uso da tomografia computadorizada, para identificação de porosidade, densidade, número atômico e fases mineralógicas, e comparações de quantificações obtidas pela análise de lâminas finas de amostras. Associado a técnica, algoritmos de segmentação mineralógica podem ser implementados para automatizar a diferenciação de fases correspondentes a diversos minerais de coeficiente de atenuação semelhantes como calcita, dolomita e quartzo. As vantagens relativas as imagens que fornecem informação tridimensional são

inúmeras, desde o tempo menor de processamento e análise até a escolha do nível de segmentação das imagens, em comparação com as mesmas tarefas em análise bidimensional. A técnica de dupla energia mostra ser possível obter análises rápidas e objetivas no potencial de amostras reservatório e quantificação mineralógica tridimensional, pontos principais em comparação a técnica de análise bidimensional por lâminas finas (Reymesen e Swennen, 2008).

A tomografia computadorizada por dupla energia para identificação da densidade e número atômico efetivo de amostras de rochas e sedimentos associada outras técnicas como a radiografia digital, para amostras de sedimentos, de forma a comparar parâmetros como tamanho de grão, bioturbação, espessura, orientação e presença de fragmentos de outros materiais mostram a possibilidade de identificar a estrutura interna, homogeneidade da composição e litologia de sedimentos não consolidados (Iovea *et al.*, 2009). Além disso ela fornece informação tridimensional na mineralogia e distribuição da porosidade de amostras, podendo ser comparada a técnicas clássicas de identificação mineralógica e porosidade como a contagem de pontos em lâminas finas, permitindo qualificar a sensibilidade da técnica de tomografia. Nota-se ser possível diferenciar estruturas, como minerais, principalmente para situações em que os coeficientes de atenuação mostram-se razoavelmente diferentes. O uso da tomografia computadorizada ainda é limitado a análise de fases de amostras geológicas, mas possui resultados compatíveis quando comparada a outras técnicas como contagem de pontos em lâminas finas e, em alguns casos, consegue distinguir e quantificar fases minerais e porosidade (Haili *et al.*, 2009).

2.2.3. Fontes monoenergéticas

O uso da técnica de dupla energia não se restringe a fontes polienergéticas. O uso da mesma inclusive torna-se mais simplificado ao usar a dependência do coeficiente de atenuação para a energia do feixe de radiação.

Há metodologias desenvolvidas para a técnica de dupla energia utilizando radioisótopos. A maior vantagem do uso de uma fonte monoenergética é a eliminação de artefato de endurecimento de feixe o que, em contrapartida, leva a tempos de aquisição muito maiores que o convencional (Rizescu *et al.*, 2001).

Além disso, a técnica de dupla energia aplicada a tomografia computadorizada por raios X para medidas do parâmetro de densidade, pode ter foco no planejamento de tratamentos por radiações mais acurados, utilizando fontes monoenergéticas oriundas de

instalações de radiação síncrotron. A densidade de amostras pode ser medida e comparada com dados tabelados. Em adição, os dados da composição, no caso, do número atômico das amostras também são obtidos, com acurácia experimental da ordem de 1%. O uso da radiação síncrotron é um método capaz de identificar corretamente a densidade de órgãos e as imagens referentes aos parâmetros de densidade e número atômico possuem potencial para diagnóstico médico (Torikoshi *et al.*, 2005).

A dupla energia através de um sistema de microtomografia por radiação síncrotron permite obter informação mineralógica tridimensional a partir do coeficiente de atenuação linear em duas energias diferentes, logo acima e abaixo da borda de absorção de um elemento abundante encontrado nas amostras estudadas. O sistema microtomográfico usa um microscópio de raios X para obter resolução menor que microns, para amostras de dimensões de poucos micrômetros, sendo adequada para identificação mineralógica de materiais de dimensões menores do que aquelas alcançadas pela microtomografia convencional, mas com limitações com relação ao tipo de amostra, principalmente em casos em que esta é extremamente heterogênea (Tsuchiyama *et al.*, 2013).

Em alguns casos, a definição do número atômico para amostras heterogêneas não é clara. Há trabalhos que propõem identificar um termo efetivo, nestes casos, de acordo com o comportamento do material estudado relativo a radiação incidente. Há uma revisão extensa da definição do número atômico efetivo que mostra a variação da relação para este termo em materiais de composição heterogênea, mas mostra a variabilidade do fator dependendo da aplicação e faixa de energia. Desta forma a proposta ocorreria em cima da dependência não só do material, mas das condições experimentais. Da mesma forma, o conceito de densidade efetiva pode ser introduzido, devido à composição de uma amostra analisada ser influenciada pela mistura de materiais presentes na mesma (Bonnin *et al.*, 2014).

2.2.4. Materiais diversos

A tomografia por dupla energia é uma técnica complexa que, em geral, necessita de algoritmos de reconstrução complicados e um conhecimento matemático razoável. Assim, há demanda para desenvolvimento de uma solução prática para o uso da técnica por pesquisadores não especialistas. Simulações usando diferentes parâmetros, como voltagem e filtros, podem ser utilizadas para obter informação da influência no resultado final (Nachtrab *et al.*, 2011).

A tomografia por dupla energia é uma técnica sensível a pequenas variações e distorções na qualidade da imagem, movimento da amostra, artefatos e mudança no coeficiente de atenuação da amostra avaliada. O estudo de métodos de otimização da tomografia, para obter melhores imagens da distribuição de densidade e número atômico efetivo para a técnica de dupla energia associada a tomografia computadorizada, torna-se essencial. É possível utilizar as imagens em diferentes energias, associadas a métodos de avaliação dos pixels da imagem, para encontrar e eliminar distorções na variação do coeficiente de atenuação (Hao *et al.*, 2013).

III. Fundamentos teóricos

3.1. Histórico

A tomografia computadorizada é uma técnica que, apesar de ter tido seus fundamentos teóricos lançados no início do século XX, tornou-se somente praticável com o desenvolvimento da tecnologia dos computadores modernos, na década de 60.

Em 1917, o matemático Johann Radon (fig.1a) mostrou que a distribuição interna das propriedades de um material em uma camada de um objeto pode ser calculada desde que conhecidos os valores integrais ao longo de um número de linhas passando pela mesma camada (fig.1b), ou seja, a obtenção da função referente ao objeto através de um conjunto infinito de projeções do mesmo objeto (Radon, 1917). Matematicamente seu trabalho remete a transformada de Radon, utilizada em algoritmos de reconstrução de imagens. Inicialmente o trabalho de Radon não obteve reconhecimento para usos médicos, apenas astronômicos, sendo reconhecido apenas meio século depois como o primeiro passo para o desenvolvimento da teoria fundamental da tomografia computadorizada.

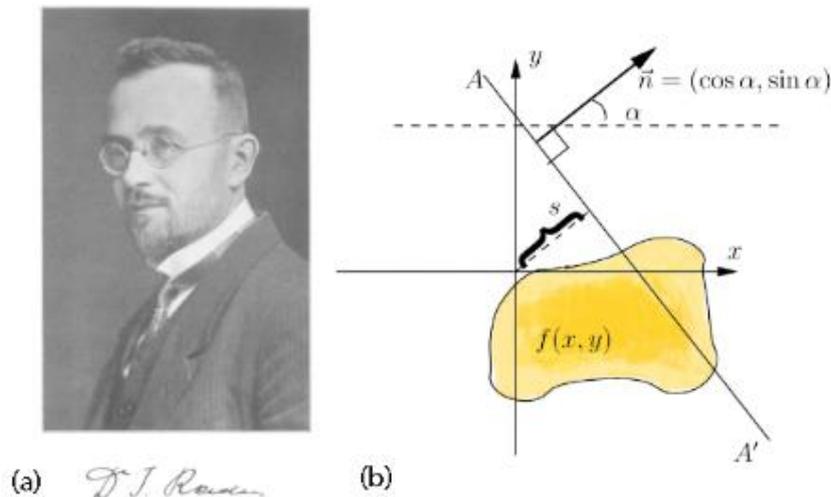


Figura 1: (a) J.H. Radon; (b) representação da função do objeto e transformada de Radon (Radon, 1917).

Os primeiros experimentos com aplicações médicas usando tomografia reconstrutiva foram feitos pelo físico Allan Cormack (Fig.2a), com o objetivo de melhorar os resultados em radioterapia. Cormack desenvolveu um método para o cálculo da distribuição da absorção da radiação no corpo humano baseado em medidas de transmissão da radiação, imaginando ser possível identificar pequenas diferenças entre

estruturas de tecido humano, e confirmando sua hipótese usando carne de cavalo e porco através de um aparato que ele mesmo tinha desenvolvido (Cormack, 1963).

Por ser um físico teórico, Cormack pouco se interessou pelas aplicações práticas de sua pesquisa. Assim, a aplicação da teoria da tomografia computadorizada, que levou a disseminação da técnica e construção do primeiro tomógrafo comercial, foi alcançada em 1972, pelo engenheiro Godfrey Hounsfield (Fig.2b). Hounsfield desenvolveu um protótipo com uma fonte de raios gama (Fig.2c). O primeiro experimento realizado utilizou um pedaço preservado de cérebro humano (Fig.2d) (Hounsfield, 1973). Em seguida, após desenvolver um aparato de tomografia mais robusto, foi realizada a primeira tomografia da cabeça de um paciente, utilizando raios X, o que permitiu a identificação de um cisto cerebral, mostrando a capacidade e eficiência do método para detecção de tumores, entre outras anomalias não associadas a ossos. Assim como seus antecessores, Hounsfield fez suas descobertas sem conhecimento prévio dos trabalhos de Radon e Cormack. Pelos seus esforços independentes, Hounsfield e Cormack receberam o prêmio Nobel em Medicina, em 1979.

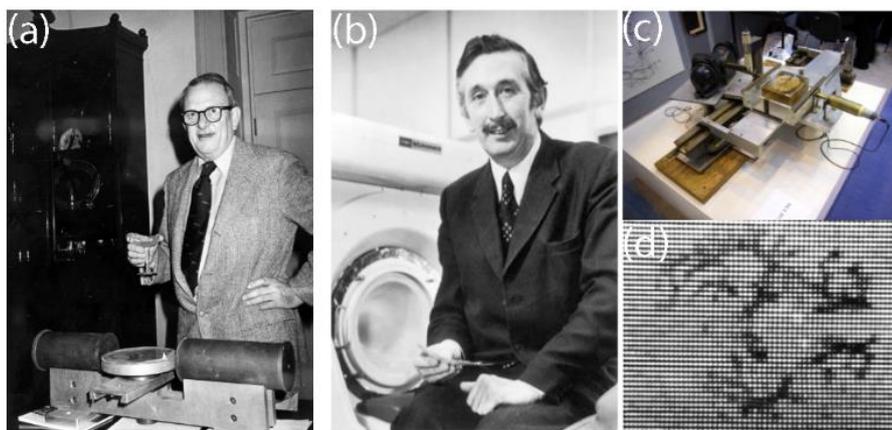


Figura 2: (a) A.M.Cormack e aparato de tomografia; (Cormack, 1963) (b) G.N.Hounsfield; (c) protótipo de tomógrafo; (d) primeira tomografia (Hounsfield, 1973).

3.2. Princípios básicos

A tomografia computadorizada é uma técnica que consiste da medição da distribuição espacial de uma quantidade física conhecida como coeficiente de atenuação, permitindo o mapeamento da constituição interna de um objeto, o que fornece imagens digitais de seções transversais do mesmo. A figura 3 mostra um esquema simplificado de obtenção de cortes tomográficos de um objeto.

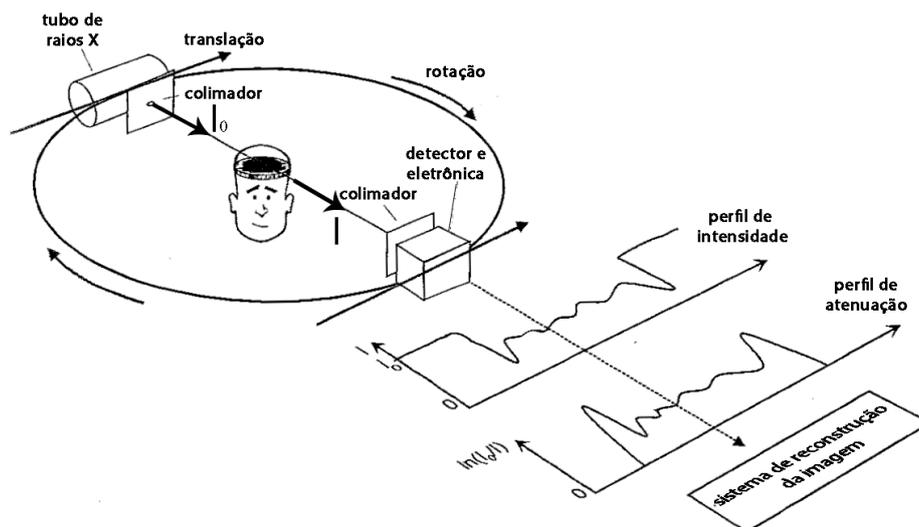


Figura 3: Esquema simplificado do processo de aquisição e reconstrução da tomografia de um objeto (adaptado de Kalender, 2011).

Na tomografia computadorizada, a intensidade da radiação I atenuada por um objeto é comparada com a intensidade original da radiação I_0 proveniente da fonte de radiação. Desta forma, é possível calcular a atenuação da radiação no caminho da fonte até o detector, passando pelo objeto.

Considerando o caso de um objeto homogêneo e fonte monocromática, ou seja, de uma única energia da radiação, sabe-se que, experimentalmente, a intensidade da radiação varia da forma:

$$I = I_0 e^{-\mu d} \quad (\text{eq.1})$$

Onde:

I é a intensidade da radiação medida ao chegar no detector;

I_0 é a intensidade original da radiação ao sair da fonte;

μ é o coeficiente de atenuação linear;

d é a espessura do objeto;

Entretanto, na maioria das aplicações da tomografia computadorizada, sejam elas na área de medicina, indústria ou pesquisa, as fontes são policromáticas, ou seja, de energias que variam de 0 até um valor de energia máxima ($E_{\text{máx}}$), e os objetos não são homogêneos, ou seja, possuem o coeficiente de atenuação μ variável. A contribuição para a atenuação total resultante depende do valor local do coeficiente de atenuação. A soma dos trajetos percorridos é feita para cada pequeno incremento da espessura do material que compõem o objeto. Desta forma, o coeficiente de atenuação linear, por estar relacionado a atenuação da intensidade da radiação, depende da energia e do percurso

percorrido pela radiação. O caminho está relacionado as regiões de diferentes composições estruturais do objeto. É necessário, então, resolver a relação dada por:

$$I = \int_0^{E_{\text{máx}}} I_0(E) e^{-\int_0^d \mu(E) ds} dE \quad (\text{eq.2})$$

De acordo com o trabalho de Radon, é possível determinar, em uma distribuição bidimensional, as características internas de um objeto se um número infinito de integrais de linha é conhecido. Na prática, existe um número finito de medidas que permite obter a distribuição do coeficiente de atenuação linear μ reconstituindo, através de uma imagem, a composição interna das estruturas do objeto.

3.3. Fonte de radiação

A fonte de radiação mais usada em uma tomografia é a fonte de raios X. Os raios X são um tipo de radiação eletromagnética, no espectro invisível, com energias que variam de poucos eV até centenas de keV. Possuem energia para ionizar átomos e romper ligações moleculares.

Os raios X foram descobertos em 1895 por Wilhelm Röntgen, durante seus experimentos com o uso de um tubo de Crookes. Röntgen percebeu que um tipo desconhecido de radiação era produzido dentro do tubo de Crookes, aparentemente invisível, capaz de atravessar materiais opacos que impediam que a luz se propagasse e interagisse com materiais cintilantes (Röntgen, 1917).

Os raios X interagem com a matéria principalmente por: absorção fotoelétrica (efeito fotoelétrico) e espalhamento Compton. A interação dominante depende da energia dos raios X e da composição elementar do objeto avaliado (Cesareo, 2000).

A absorção fotoelétrica ocorre por transferência de energia de um fóton para um elétron, com o qual interage. Este elétron ionizado, ao ser removido, deixa um espaço vazio, que é rapidamente substituído por um elétron de uma camada mais afastada do núcleo e, portanto, de maior energia. O excesso de energia gerado pelo salto quântico do elétron de um nível para outro é liberado, produzindo um fóton característico, ou raios X, do elemento no qual o elétron se encontra.

O espalhamento Compton é um espalhamento inelástico por um fóton que interage com um elétron em uma camada mais afastada do núcleo. Parte da energia do fóton é transferida para o elétron com o qual interage, o que muda a energia final do fóton de raios X.

As fontes de raios X mais utilizadas são os tubos de raios X (Fig. 4a). Os raios X são obtidos pela desaceleração de elétrons, gerados por um catodo e acelerados por um

forte campo elétrico dentro de um tubo a vácuo, quando estes colidem com um alvo, o anodo. A desaceleração dos elétrons com alta energia gera a radiação de frenamento (Bremsstrahlung). Há também a presença de raios X característicos, devido a interação fotoelétrica dos elétrons incidentes com os elétrons presentes no alvo. A energia máxima dos fótons de raios X produzidos é limitada pela energia do elétron incidente.

O uso de tubos de raios X em aplicações não destrutivas nas áreas de pesquisa e indústria tem criado uma demanda cada vez maior por imagens tomográficas de alta resolução. Para isto, o tubo de raios X deve possuir tamanho focal menor que convencionalmente utilizado em tomografia médica. A forma do tamanho focal depende do filamento, do alvo, da direção de deslocamento dos elétrons e do ângulo do alvo com a janela do tubo de raios X. Estes tubos são denominados tubos de raios X microfocos (Fig. 4b).

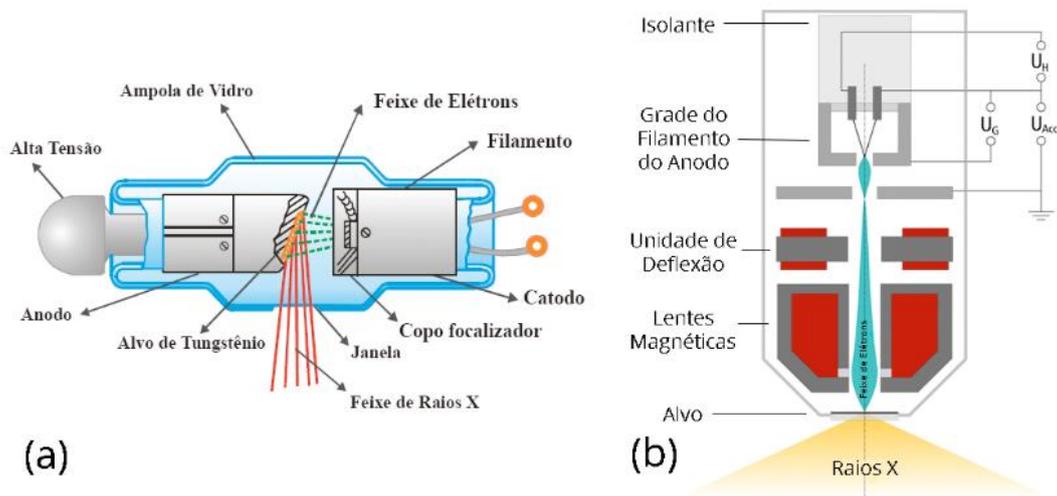


Figura 4: (a) tubo de raios X convencional; (b) tubo de raios X microfocos (adaptado de Buzug, 2008)

3.4. Colimação

Colimadores são dispositivos que permitem filtrar os feixes de radiação provenientes de uma fonte. O uso de filtros metálicos para colimar o feixe de radiação proveniente da fonte é importante para a qualidade da imagem e eliminação de artefatos. A filtragem inicial é fornecida pela proteção que envolve a fonte, de forma a reduzir a radiação para a direção de saída do feixe, de acordo com o detector e a geometria do sistema. Em seguida, é escolhido um filtro para atenuar o feixe de radiação proveniente da fonte, de forma a reduzir a intensidade de fótons de baixa energia, e aproximar o feixe policromático para um feixe monocromático. A colimação do feixe de radiação é importante para redução de artefatos na imagem e espalhamento do feixe.

3.5. Detector

O detector é o sistema que permite o registro da radiação incidente, que atravessa um objeto, proveniente da fonte de radiação. Ele possui a capacidade de transformar a intensidade da radiação incidente em um sinal elétrico, que pode ser amplificado, e, finalmente, convertido da forma analógica para uma informação digital. Ao mesmo tempo, o ruído gerado pela eletrônica do sistema deve ser consideravelmente menor do que o ruído gerado pelas flutuações estatísticas na intensidade dos raios X.

Para aplicações médicas são utilizados, principalmente, detectores do tipo câmara de ionização e detectores cintiladores (Knoll, 2010).

Câmaras de ionização são detectores de radiação ionizante que utilizam um gás que pode ser ionizado pela radiação incidente. Quando a radiação penetra a câmara de ionização, há formação de pares iônicos. Dentro da câmara, há presença de um campo elétrico, que acelera estas cargas para o anodo, de acordo com o sinal da carga. Isto gera uma corrente proporcional a carga depositada que, por sua vez, é proporcional à radiação incidente (Fig.5a).

Detectores cintiladores são compostos de materiais que possuem capacidade de cintilação, ou seja, emitem luminescência quando excitados por radiação ionizante. Geralmente são acoplados a um sensor eletrônico de luz como, por exemplo, uma fotomultiplicadora. Este absorve a luz emitida pelo material cintilador e reemite a informação na forma de elétrons. Estes elétrons são, então, multiplicados, gerando um pulso elétrico amplificado, proporcional à radiação detectada (Fig. 5b).

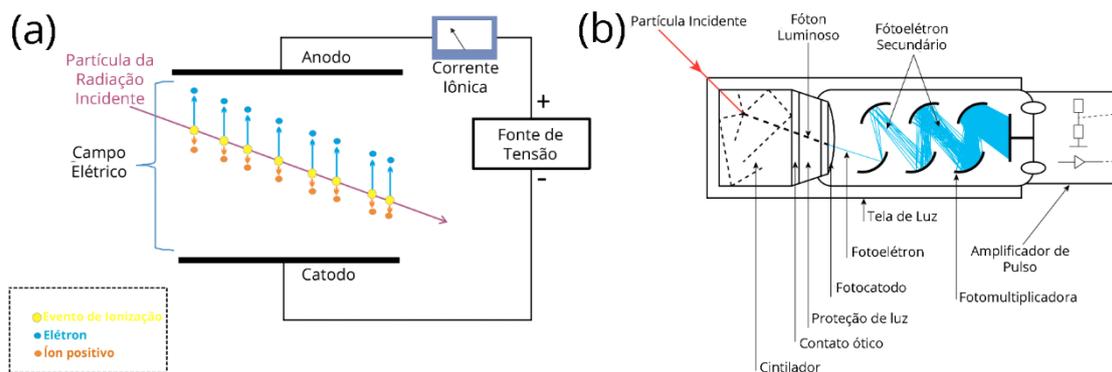


Figura 5: (a) detector câmara de ionização; (b) detector cintilador (adaptado de Knoll, 2010).

Para aplicações na indústria e pesquisa, onde não há preocupação com dose da radiação, mas sim de alta resolução da imagem, há maior demanda para detectores flat-panel.

Detectores flat-panel (“tela plana”) são divididos em dois tipos: conversão indireta e direta (Knoll, 2010).

Detectores de conversão indireta transformam a radiação em luz e a luz em carga. Consistem de um cintilador frontal como sensor da radiação. Há uma matriz de fotodiodos acoplada no fundo, os quais, após incidência da radiação sobre o cintilador que é convertida em luz, convertem luz em cargas. Estas são amplificadas e transformadas em sinal elétrico em cada pixel, contendo transistores de filme fino que, finalmente, fornecem a imagem digital (Fig.6a).

Detectores de conversão direta transformam diretamente a radiação em carga, sem necessidade da camada intermediária de cintilador, com o uso de fotocondutores como, por exemplo, selênio amorfo (a-Se). Os fótons de raios X incidentes sobre a camada de selênio amorfo geram pares elétron-buraco. Uma voltagem aplicada ao fundo da camada de selênio extrai os elétrons e os buracos para seus respectivos eletrodos, gerando uma corrente proporcional a intensidade da radiação (Fig.6b).

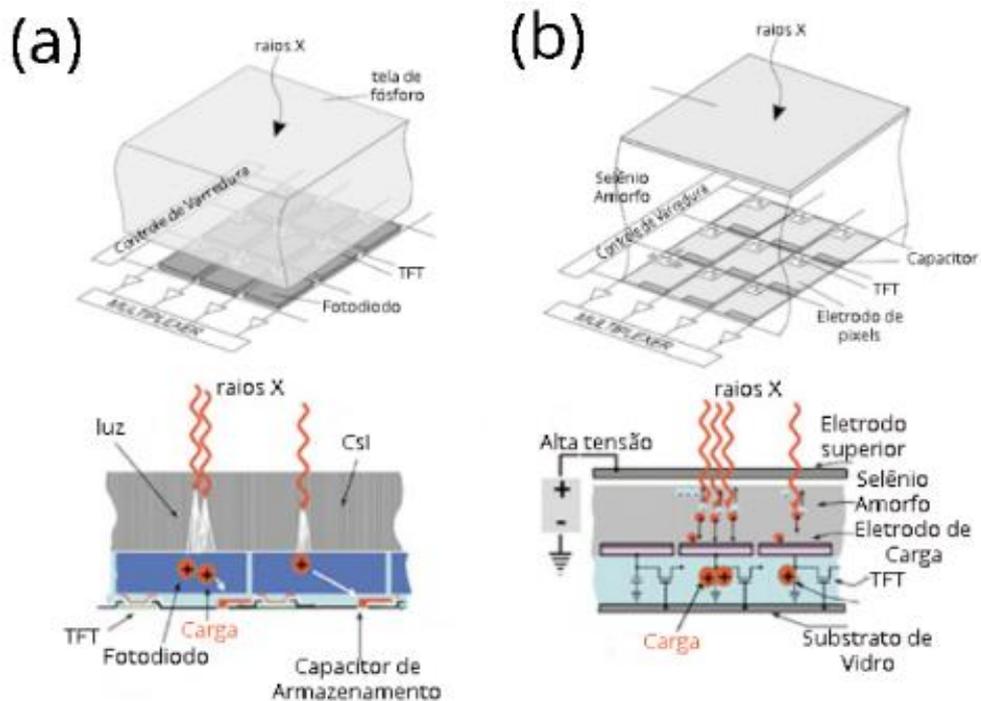


Figura 6: (a) Conversão indireta em um elemento do detector flat-panel; (b) conversão direta em um elemento do detector flat-panel (adaptado de Knoll, 2010).

Os detectores flat-panel são mais rápidos e sensíveis, necessitando de uma exposição menor a radiação para uma mesma qualidade de imagem. Fornecem menor distorção de imagem, são mais resistentes e menores em tamanho comparados a detectores convencionais.

3.6. Evolução e desenvolvimento

A tomografia computadorizada possui usos em diversas áreas. Aplicações na área médica datam das mais antigas, da criação ao desenvolvimento da técnica. A aplicação da tomografia nas áreas de indústria e pesquisa tem ganhado força na última década, com o desenvolvimento de tubos de raios X microfocos e o uso de detectores flat-panel (Kalender, 2011).

As primeiras aplicações da tomografia computadorizada limitavam-se a pequenas regiões a serem analisadas. Isto devia-se a feixes provenientes da fonte de radiação que eram colimados o suficiente para formar os feixes de 1ª geração, feixes paralelos ou lápis e, portanto, tomavam muito tempo para circundar o objeto em análise. Os detectores eram limitados e pequenos, de tal forma que era necessário o sistema fonte-detector transladar em relação ao objeto, rotacionar e repetir o passo translação-rotação. Apesar de uma técnica revolucionária, cada aquisição tomográfica poderia levar horas e, devido a limitações de hardware e software da época, as reconstruções poderiam levar dias (Fig.7a).

Na 2ª geração, o feixe passa a tomar a forma de um feixe em forma de leque, onde a potência do tubo de raios X é mais eficientemente aproveitada. A mudança de detectores pontuais para uma linha de detectores permite a aquisição de um número maior de dados em um tempo reduzido por imagem. O movimento do sistema fonte-detector permanece equivalente a 1ª geração (Fig.7b).

Na 3ª geração, a introdução do feixe leque tornou possível a execução prática de aquisições tomográficas de todo o corpo de um paciente, diminuindo a influência de problemas devido a respiração e movimento do mesmo. Isto porque o feixe em leque não apenas permite o uso eficiente da fonte de raios X, mas a associação a um arco de detector maior, bem como a eliminação da translação, e o uso apenas da rotação do sistema fonte-detector em relação ao objeto, diminuiram, consideravelmente, o tempo de aquisição por imagem tomográfica (Fig.7c).

A 4ª geração de tomógrafos é semelhante a 3ª geração. A maior diferença é no sistema de detecção. Foi inserido um anel de detectores estacionário em volta do paciente, de forma que apenas o tubo de raios X rotacionava em torno do paciente.

A rotação do sistema fonte-detector inseria ainda alguns problemas com relação a aquisição tomográfica. A conexão elétrica ao tubo de raios X era feita por cabos. Isto limitava a rotação do sistema, impedindo rotações rápidas e contínuas. Era necessário, então, acelerar o sistema em um sentido e, logo em seguida, inverter este sentido. Este problema foi resolvido com a introdução da tecnologia de anéis deslizantes (“slip ring”). A energia elétrica passou a ser fornecida para o tubo de raios X através de anéis, ao invés de cabos. Conseqüentemente, pode-se adotar um modelo de aquisição contínua, sem necessidade de reversão da fonte (Fig.7d).

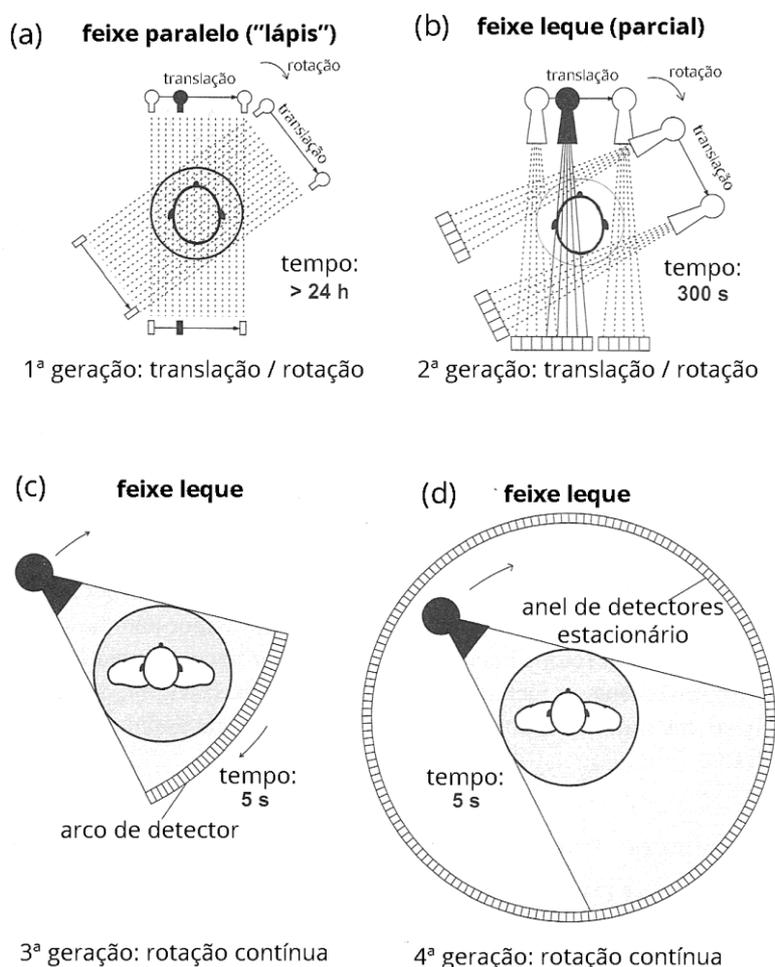


Figura 7: (a) 1ª geração feixe paralelo; (b) 2ª geração feixe parcial leque; (c) 3ª geração feixe leque com rotação do detector; (d) 4ª geração feixe leque com detector estacionário (adaptado de Kalender, 2011).

Novas técnicas que fazem uso dos princípios da tomografia computadorizada foram introduzidas nas últimas décadas: tomografia por emissão de pósitrons, tomografia em espiral, tomografia por dupla energia, microtomografia, etc.

A microtomografia computadorizada é equivalente a aquisição tomográfica utilizada em Medicina. Uma fonte de raios X microfocos interage com o objeto e um detector plano coleta imagens de projeção magnificadas. A inovação parte da possibilidade de tomografar objetos com uma resolução muito maior, na escala de micrômetros, do que as obtidas em tomógrafos médicos convencionais, na escala de milímetros. Pequenos detalhes da estrutura interna bidimensional e tridimensional dos objetos podem ser estudados, da mesma forma não destrutiva encontrada na tomografia convencional.

A microtomografia computadorizada tornou-se possível com o advento de tubos de raios X microfocos e detectores flat-panel. Em um microtomógrafo, o sistema tubo-detector é, geralmente, estacionário e o objeto rotaciona em torno do seu próprio eixo. Importante notar que, relativamente, o movimento de rotação é o mesmo e, por isso, não há mudanças, nesse quesito, para os algoritmos de aquisição e reconstrução. A microtomografia, no que diz respeito ao sistema, na ausência do movimento circular da fonte e do detector, possui maior estabilidade e permite a possibilidade de tomógrafos em menor escala (Fig.8).

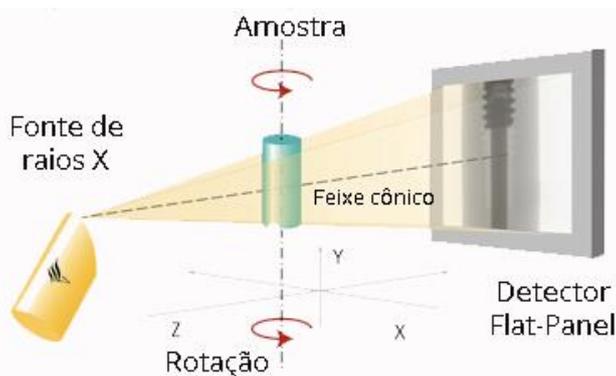


Figura 8: Esquema da aquisição tomográfica em um microtomógrafo, com tubo de raios X microfocos de feixe cônico e detector flat-panel fixos, e suporte de amostra girando sobre o próprio eixo (adaptado de Kalender, 2011).

Tubos de raios X microfocos, em geral, permitem apenas baixos níveis de potência. A aquisição costuma ser feita em modo de magnificação, o que reduz o número de raios X que o detector adquire. Devido a esta restrição, os tempos de aquisição costumam ser maiores, o que limita a microtomografia para áreas de pesquisa e indústria,

onde as amostras não se movem e não estão vivas e não há preocupação com dose da radiação sobre os objetos analisados.

3.7. Qualidade da imagem

Uma imagem tomográfica representa, indiretamente, o coeficiente de atenuação do material que compõe o objeto avaliado. Mas há uma questão central que gira em torno da qualidade da imagem, ou seja, o quão fiel é a imagem ao reproduzir o objeto tomografado. Isso remete ao conhecimento de ruídos e artefatos devido à radiação, detector, eletrônica, etc.

3.7.1. Ruído de pixel

Todo valor medido está sujeito a uma incerteza. Para um sistema ideal, este erro deve ser puramente estatístico devido, principalmente, as flutuações no número de raios X detectados, ou ruído quântico.

Os erros relacionados aos ruídos devido a medida da intensidade da radiação incidente no detector influenciam no cálculo dos valores do coeficiente de atenuação, propagando-se na reconstrução da imagem, e surgindo, eventualmente, na mesma (Fig.9a). O ruído de pixel, σ , pode ser determinado pelo desvio padrão dos valores P_i de N pixels em uma região de interesse (ROI) (Kalender, 2011) em uma seção homogênea da imagem relativo ao valor médio P :

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (P_i - P)^2 \quad (\text{eq.3})$$

O ruído aumenta quando menos quanta de raios X é detectado, para objetos de maior capacidade de atenuação, para baixa corrente e menor espessura da seção (Fig.9b).

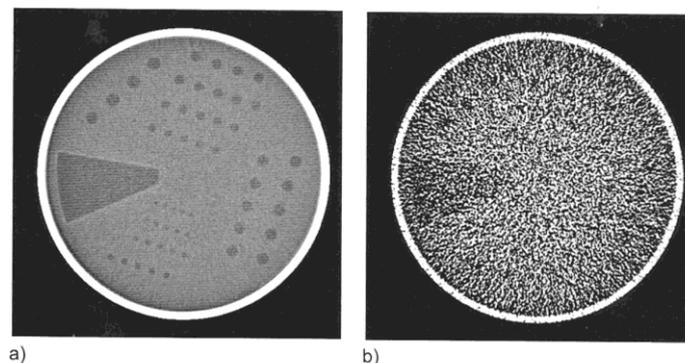


Figura 9: (a) Imagem original; (b) Imagem com influência de ruído (Kalender, 2011).

3.7.2. Resolução espacial

A resolução espacial descreve a capacidade do sistema de identificar pequenos detalhes de estrutura separadamente. É equivalente a distância mínima que o sistema é capaz de distinguir entre estruturas muito próximas em uma imagem. Geralmente é determinada utilizando materiais de alto contraste, para eliminar a influência do ruído na medida.

Os parâmetros que mais influenciam a resolução espacial são: o tamanho do foco; a geometria do sistema; o espaçamento dos elementos do detector; o algoritmo de reconstrução; e o movimento do foco durante a medida.

É possível calcular a resolução espacial utilizando métodos diretos, como padrões de furos (Fig.10a) e barra (Fig.10b), e indiretos, como a propagação do ponto (PSF) (Fig.10c) e função de transferência modular (MTF) (Fig.10d) (Kalender, 2011). Os métodos diretos são simples, mas subjetivos. Dependem da decisão pessoal e, por conta disto, barras de diferentes dimensões podem ser consideradas como separadas, ou não. A MTF que, em geral, usa fios finos, fornece a função de propagação do ponto, a qual é submetida a uma transformação de Fourier para obter a MTF. A MTF é uma medida objetiva do contraste na qual as frequências individuais (modulações do objeto, medidas em pares de linha por centímetro) são reproduzidas para um sistema específico. É definida como sendo a transformada de Fourier da resposta ao impulso do sistema, também conhecida como função propagação de ponto ($f(x)$):

$$MTF = \int f(x)e^{-i2\pi xs} dx \quad (\text{eq.4})$$

A função propagação de ponto descreve a resposta de um sistema a uma fonte ou objeto pontual. Pode ser entendida como um borrão na imagem que representa um objeto não resolvido. Em termos funcionais, é o domínio espacial da MTF.

A resolução espacial é especificada em termos de um valor percentual da MTF. A resolução espacial possível para um dado sistema é geralmente especificada como 10% do valor da MTF, ou seja, a frequência na qual o contraste foi reduzido a 10% do valor máximo obtido.

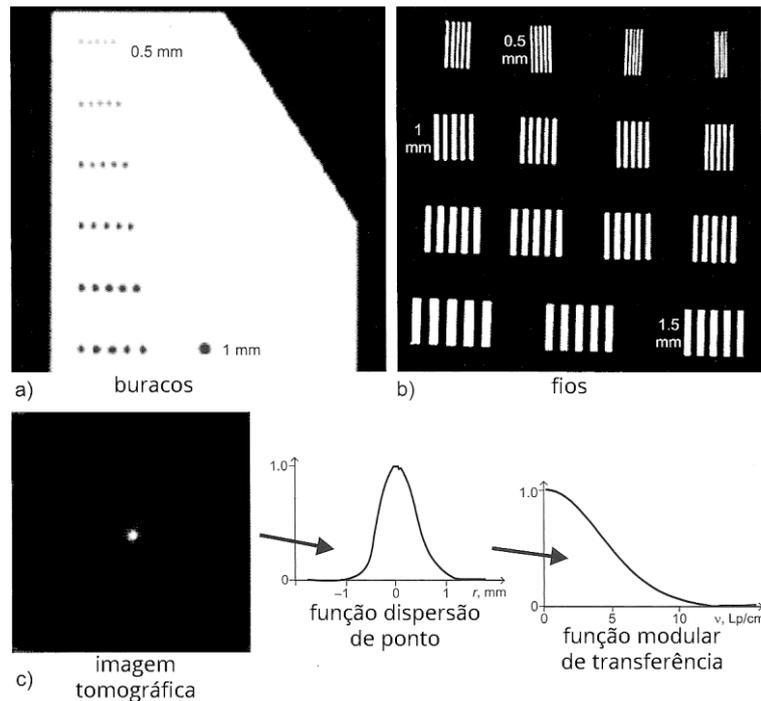


Figura 10: Métodos diretos usando (a) Buracos e (b) fios para cálculo da MTF; (c) imagem tomográfica de um objeto pontual, mostrando a função dispersão de ponto e respectiva MTF, para cálculos indiretos da resolução espacial (adaptado de Kalender, 2011).

3.7.3. Relação Sinal Ruído

A relação sinal ruído (Signal to Noise Ratio - SNR) é uma medida que compara o nível de um sinal desejado com relação ao ruído de fundo, sendo definida pela razão entre o sinal e o ruído de fundo. Qualquer medida é perturbada por ruídos, seja ruído eletrônico ou ruído externo inerente a influências naturais durante a medida, dependendo do que é medido e da sensibilidade do instrumento. É possível controlar o ruído proveniente do ambiente de medida e, em casos em que o ruído associado à medida é conhecido, é possível filtrar ou processar o sinal para eliminar os ruídos. É possível melhorar a SNR aumentando o número de medidas, de forma a diminuir a influência do ruído na média do resultado final (Kalender, 2011).

Para medidas digitais, o número de bits que representa a medida determina o valor máximo da SNR. Isto porque o menor valor possível do ruído é o erro causado pela quantização do sinal.

3.7.4. Resolução em contraste

A resolução em contraste, em geral, determina a capacidade de distinguir diferenças em intensidade na imagem. É uma abordagem para descrever a qualidade da imagem em termos do contraste da imagem e a resolução espacial da mesma. A detecção do contraste é determinada, principalmente, pelo nível de ruído na imagem. Ela é determinada pela relação sinal ruído (SNR) e pela resolução espacial, visto que estruturas de baixo contraste de diferentes tamanhos podem existir (Kalender, 2011). Não existe, entretanto, um consenso sobre um método objetivo para o cálculo da resolução em contraste (Fig.11).

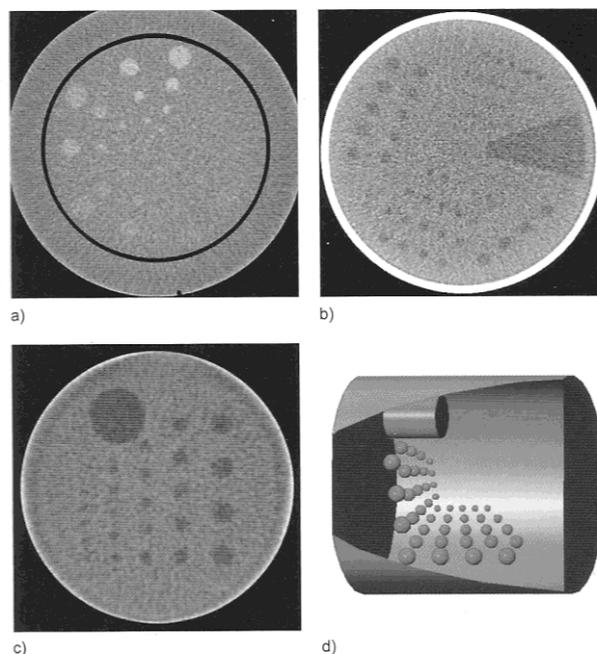


Figura 11: Diferentes objetos para observação da resolução em contraste (Kalender, 2011).

3.7.5. Artefatos da imagem

Ao avaliar a fidelidade da imagem a estrutura que esta representa (fig.12a), é necessário considerar que o sistema pode gerar estruturas artificiais, ou artefatos, que não se encontram presentes no objeto (fig.12b).

Há diversos fatores que influenciam no surgimento de artefatos na imagem, onde os principais são: o movimento do objeto; feixe policromático; objetos de alta densidade (metais); e variações na sensibilidade do detector.

O movimento do objeto (fig.12c) durante o processo de obtenção de imagens tomográficas gera perturbações por toda a imagem, em geral na forma de borrões ou

manchas (blurring). Durante o processo de reconstrução, cada detalhe contribui alguma informação para o pixel da imagem. Entretanto, em virtude do algoritmo escolhido, há correções que só podem ser feitas corretamente quando o objeto não se move e os dados das diferentes projeções são consistentes com a descrição da função do objeto associada ao coeficiente de atenuação. Desta forma, as perturbações na imagem podem não ser resolvidas e novas inconsistências no processo de aquisição podem surgir na imagem final (“misalignment”). A melhor forma de evitar este artefato é garantindo um suporte fixo para a amostra e o alinhamento do sistema com uma vareta que possui pontos de referência, de forma que oscilações devido ao movimento do sistema tenham pouca, ou nenhuma, influência no objeto.

O detector é composto de diversos elementos que possuem sensibilidade à radiação incidente. Entretanto, na prática, estes elementos possuem sensibilidade variável entre si. Ainda, estes mesmos elementos de detecção podem apresentar avarias ou incapacidade de obter a informação da radiação incidente, o que é conhecido como pixel morto (“dead pixel”). Neste caso, a influência destes elementos será sobre cada projeção do objeto avaliado durante o processo tomográfico. Isto resulta em artefatos em forma de anel na imagem final (fig.12d), concêntricos entre si (“ring artifacts”). Alguns algoritmos computacionais reduzem consideravelmente a influência destes artefatos em forma de anel da imagem. Existem, porém, alguns métodos que podem ser utilizados na aquisição para diminuir a existência destes artefatos. Um dos métodos é realizar uma aquisição tomográfica do objeto com posição no eixo z aleatória. Desta forma, o objeto muda de posição relativa ao detector e, por consequência, o pixel avariado nunca estará na mesma posição em projeções consecutivas, não formando anéis na imagem final. Outro método, utilizando um detector flat-panel, é realizar uma calibração (flat-field) utilizando como referência o feixe de radiação. Desta forma, os pixels são calibrados de acordo com a radiação incidente, mantendo valores semelhantes para os pixels avariados, o que ajuda a corrigir a grande variação da sensibilidade e resultante oscilação de artefatos na imagem final.

O espectro policromático gera o efeito de endurecimento de feixe (“beam hardening artifact”) (fig.12e). Este surge devido a atenuação da radiação incidente, com várias energias, ser diferente, dependendo da energia da radiação e do tipo do objeto. Conseqüentemente, há variações na energia média do feixe de acordo com a espessura do objeto. As baixas energias do espectro da radiação são facilmente atenuadas, mesmo em regiões de menor espessura, como as bordas do objeto (efeito fotoelétrico). O resultado

na imagem final são regiões escuras, de menor atenuação, no centro do objeto, e regiões mais claras, de alta atenuação, nas bordas do objeto. Existem algoritmos computacionais para diminuir o efeito do endurecimento de feixe, mas, em geral, o método mais eficiente é o uso de filtros metálicos na saída do feixe da fonte de radiação. Os filtros conseguem eliminar as baixas energias do espectro policromático. Isto resulta em uma energia média maior do feixe de saída da fonte, o que diminui as variações no coeficiente de atenuação do objeto.

Objetos de alta densidade, como a presença de metais, geram artefatos estrela (“streaking artifacts”). Estes artefatos são linhas finas que possuem origem nos objetos de alta densidade e, em geral, perturbam grande parte da imagem. Um maior número de projeções, que reduz a espessura de cada seção do volume do objeto em forma de imagem tomográfica, e um aumento na tensão do sistema ajuda a diminuir o efeito estrela. Na maior parte dos casos, o ideal é obter a tomografia do objeto, removendo, ao máximo possível, a região onde o material encontra-se.

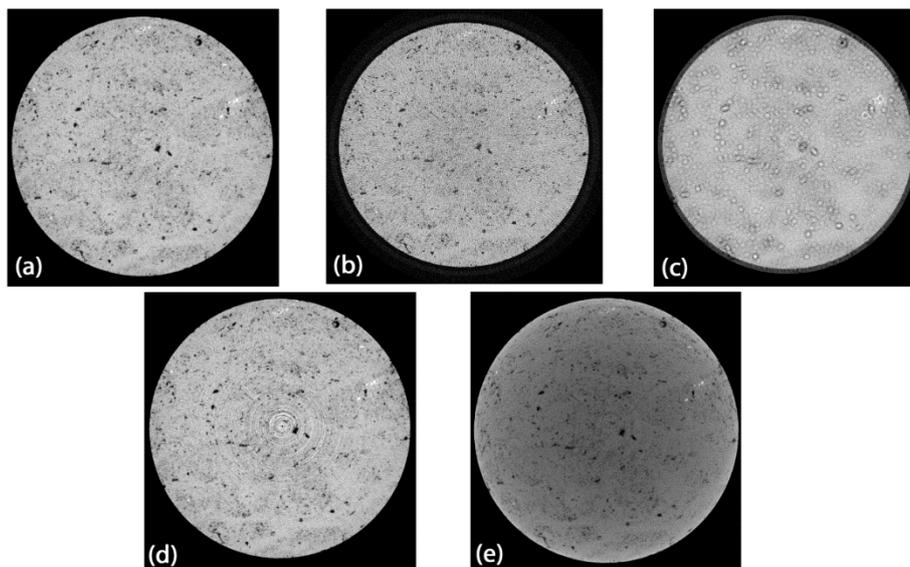


Figura 12: Artefatos da tomografia (a) Imagem ideal; (b) Imagem com ruído e sem filtro de suavização; (c) Desalinhamento; (d) Artefato de anel; (e) Artefato de endurecimento de feixe.

3.8. Reconstrução

Há diversas formas de efetuar a reconstrução de uma imagem tomográfica. Os métodos mais comuns são:

- Algoritmos de reconstrução analíticos
- Métodos de expansão por séries (reconstrução algébrica)

➤ Técnicas de reconstrução estatísticas

Reconstruções analíticas consideram o objeto como uma função $f_{(x,y)}$ contínua, e os dados mensurados $p_{(\vartheta, \xi)}$. Isto significa que o problema da reconstrução pode ser formulado em termos de uma equação integral contínua. Técnicas analíticas obtêm soluções exatas ou aproximadas desta equação integral. As vantagens de algoritmos de reconstrução de imagem analíticos são sua eficiência e execução computacional comparada a outros tipos de algoritmos.

Métodos de expansão de séries realizam uma discretização na primeira etapa da reconstrução. Basicamente estes métodos necessitam resolver equações lineares, de forma iterativa, para determinar os valores referentes a imagem reconstruída. Portanto são extremamente demorados em comparação com as demais técnicas.

Técnicas de reconstrução estatísticas são do tipo iterativo também. Diferentemente de métodos de expansão em séries, as medidas são modeladas estatisticamente. Estes algoritmos são menos susceptíveis a ruídos, entretanto, por serem iterativos, são extremamente demorados em comparação com algoritmos analíticos.

Nesta seção será descrito o método analítico para feixe cônico, partindo de definições da transformada de Radon e Fourier, a análise da reconstrução com o uso de feixes paralelos e leque para, enfim, a generalização utilizando o algoritmo de Feldkamp para reconstrução com feixe cônico (Natterer 2001).

3.8.1. Projeção

A função do objeto que no caso da tomografia é o coeficiente de atenuação e o representa e deve ser reconstruída é tida como $f_{(x,y)}$. Consideramos que a função $f_{(x,y)}$ é nula para qualquer ponto fora do campo de medida.

Um raio, na geometria paralela, pode ser parametrizado por um ângulo ϑ com relação aos eixos das coordenadas e definindo a distância da origem como sendo ξ . Matematicamente, o raio é descrito por uma linha reta:

$$\xi = x\cos\vartheta + y\sin\vartheta \quad (\text{eq.5})$$

A medida característica da tomografia corresponde a integração da função do objeto $f_{(x,y)}$ ao longo do raio (fig.13). A informação da projeção resultante $p_{(\vartheta, \xi)}$ é dada por:

$$p(\vartheta, \xi) = \int f(x,y)\delta(x\cos\vartheta + y\sin\vartheta - \xi)dx dy \quad (\text{eq.6})$$

Onde:

δ é a função delta de Dirac;

p é a projeção de $f_{(x,y)}$;
 ϑ é o ângulo de projeção;

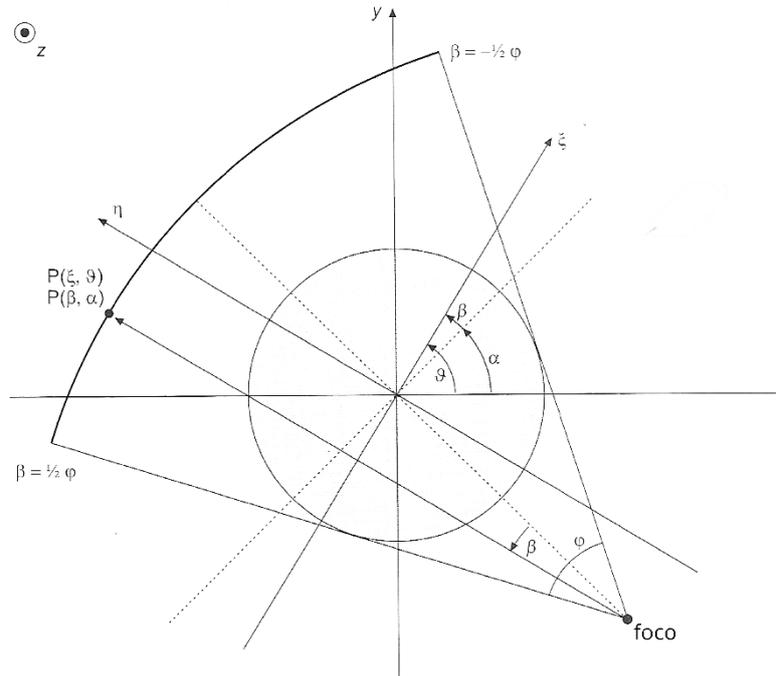


Figura 13: Identificação de parâmetros para diferentes geometrias de feixe (Kalender, 2011).

A transformada que converte $f_{(x,y)}$ em $p_{(\vartheta,\xi)}$ é conhecida como a transformada de Radon em duas dimensões. A equação 6 pode ser reformulada com o operador da transformada de Radon, R , como:

$$p = Rf \tag{eq.7}$$

3.8.2. Transformada de Radon

A transformada de Radon é a transformada integral que consiste da integral de linha de uma função sobre o espaço definido para esta função. Se uma função f representa o coeficiente de atenuação de um objeto, a transformada de Radon desta função representa a dispersão de dados obtida na saída de uma aquisição tomográfica. Os dados da transformada de Radon são conhecidos como um sinograma, pois a transformada de Radon de uma função delta de Dirac é a representação da distribuição em um gráfico de uma onda senoidal (fig.14b). A transformada inversa de Radon, por sua vez, permite reconstruir a informação original da função f utilizando a dispersão de dados obtida da transformada de Radon, ou seja, o coeficiente de atenuação do objeto (Radon, 1895).

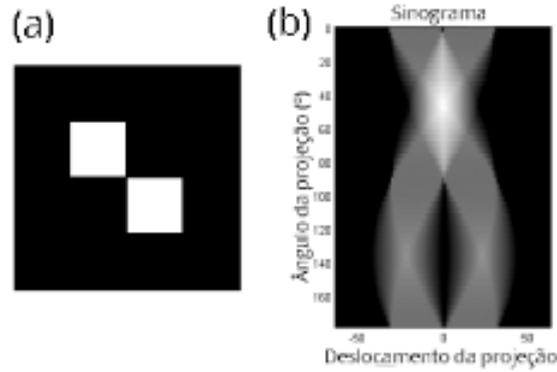


Figura 14: (a) objeto original; (b) sinograma. (Buzug 2008)

Seja uma função contínua $f_{(x,y)}$, que é nula fora de um grande disco no plano euclidiano R^2 . A transformada de Radon, Rf , é uma função definida no espaço de linhas retas L em R^2 pela integral de linha ao longo de cada uma das linhas:

$$Rf(L) = \int_L f(x)|dx| \quad (\text{eq.8})$$

A parametrização de qualquer linha reta L com relação ao comprimento de arco t pode ser escrita como:

$$(x(t), y(t)) = ((t \sin \alpha + s \cos \alpha), (-t \cos \alpha + s \sin \alpha)) \quad (\text{eq.9})$$

Onde:

S é a distância de L da origem;

α é o ângulo que o vetor normal a L faz com o eixo x ;

Considerando que as quantidades (α, s) são coordenadas no espaço de todas as linhas no R^2 , a transformada de Radon pode ser representada nestas coordenadas como:

$$Rf(\alpha, s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x(t), y(t)) dt = \int_{-\infty}^{\infty} f((t \sin \alpha + s \cos \alpha), (-t \cos \alpha + s \sin \alpha)) dt \quad (\text{eq.10})$$

3.8.3. Transformada de Fourier

A transformada de Fourier é usada para transformar sinais entre o domínio espacial, ou temporal, (fig.15a) e o domínio de frequência (fig.15b). A transformada de Fourier G de uma função g é definida como:

$$G(u) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) e^{-2\pi i x u} dx \quad (\text{eq.11})$$

A transformada inversa de Fourier, por sua vez, é definida como:

$$g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(u) e^{2\pi i u x} du \quad (\text{eq.12})$$

Quando a variável x representa o tempo, a variável u representa a frequência.

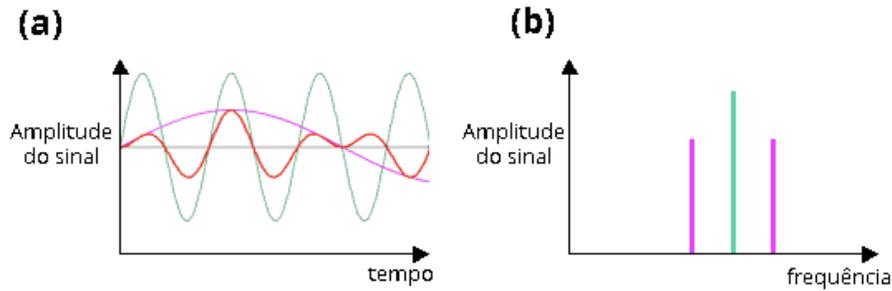


Figura 15: Representação de um sinal no (a) domínio temporal; (b) domínio da frequência. (Buzug 2008)

A base da reconstrução tomográfica parte das definições da transformada de Fourier e sua inversa, bem como o teorema da inversão de Fourier. Este teorema afirma que é possível recuperar uma função g partindo da sua transformada de Fourier G . É equivalente a dizer que, se conhecidas todas as informações sobre a frequência e fase do sinal, é possível reconstruir o sinal original.

3.8.4. Teorema da fatia de Fourier

O teorema da fatia de Fourier relaciona a transformada de Fourier com a transformada de Radon e sua inversa. O teorema afirma que o resultado dos seguintes cálculos é igual:

- A transformada de Fourier da projeção de uma função $f_{(x,y)}$ sobre uma linha unidimensional;
- O corte sobre a origem, que é paralela a linha de projeção, da transformada bidimensional de uma função $f_{(x,y)}$;

A transformada de Fourier P da projeção p com relação a ξ é:

$$P(\vartheta, u) = \int p(\vartheta, \xi) e^{-2\pi i u \xi} d\xi = \int f(x, y) e^{-2\pi i u (x \cos \vartheta + y \sin \vartheta)} dx dy \quad (\text{eq.13})$$

Comparando a equação 13 com a transformada de Fourier bidimensional F de f :

$$F(u_x, u_y) = \int f(x, y) e^{-2\pi i (u_x x + u_y y)} dx dy \quad (\text{eq.14})$$

Chega-se a identidade:

$$F(u \cos \vartheta, u \sin \vartheta) = P(\vartheta, u) \quad (\text{eq.15})$$

Este é o teorema da fatia de Fourier. Como dito anteriormente, o teorema da Fatia de Fourier afirma que a transformada de Fourier das projeções (fig16a) com relação ao parâmetro ξ é equivalente a transformada de Fourier bidimensional do objeto representado pelas coordenadas radiais $(u_x, u_y) = (u \cos \vartheta, u \sin \vartheta)$ (fig16b).

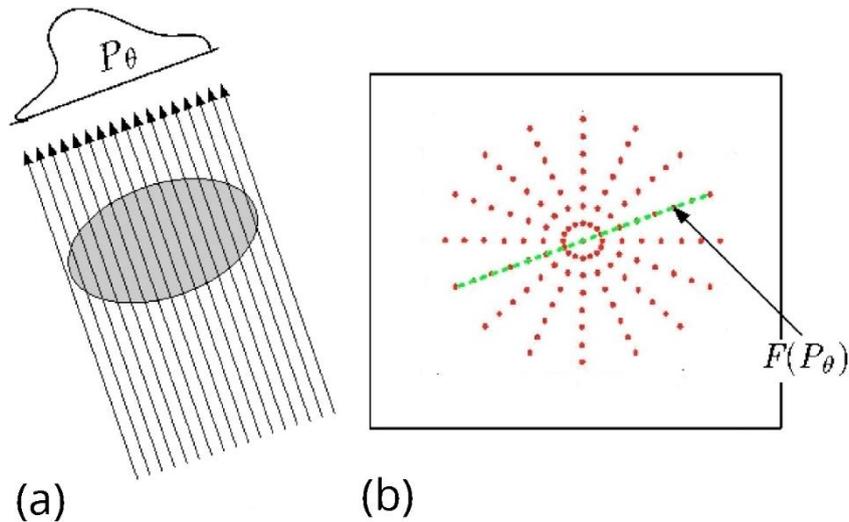


Figura 16: Teorema da fatia de Fourier (a) transformada das projeções; (b) transformada bidimensional. (Buzug 2008)

Apesar da possibilidade de efetuar a transformada inversa de Fourier bidimensional sobre F para obter diretamente a imagem de reconstrução tomográfica, este método de reconstrução por Fourier possui diversos problemas de implementação relacionados a discretização dos dados e erros em pequena escala no domínio de Fourier que propagam-se no domínio espacial, transformando-os em erros em grande escala, relativos a artefatos de imagem. A opção mais comumente utilizada, então, é o algoritmo de retroprojeção filtrada.

3.8.5. Teorema da convolução

Convolução é uma operação matemática entre duas funções f e g , resultando em uma terceira função. A convolução de f e g é definida como a integral do produto das funções após uma das funções ter sido invertida e deslocada, ou seja:

$$(f * g)(t) = f(t) * g(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau)g(t - \tau)d\tau \quad (\text{eq.16})$$

A convolução de duas funções pode ser feita pela multiplicação das transformadas de Fourier destas funções, seguida da transformada inversa de Fourier. Sendo \mathcal{F} o operador transformada de Fourier, $\mathcal{F}\{f\}$ e $\mathcal{F}\{g\}$ as transformadas de Fourier de f e g , respectivamente, temos:

$$\mathcal{F}\{f * g\} = \mathcal{F}\{f\} * \mathcal{F}\{g\} \quad (\text{eq.17})$$

Ao aplicar a transformada inversa de Fourier \mathcal{F}^{-1} :

$$f * g = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{f\} * \mathcal{F}\{g\}\} \quad (\text{eq.18})$$

O que representa o teorema da convolução. Em processamento e reconstrução de imagens, a convolução permite a filtragem do sinal original, influenciando as características da imagem como, por exemplo, suavização ou realce de bordas (fig.17).



Figura 17: Efeito de diversos filtros sobre o sinal original (Kalender, 2011).

3.8.6. Retroprojeção Filtrada com feixe paralelo

A transformada de Fourier bidimensional sobre a equação 15 com relação a $u_x = u \cos \vartheta$ e $u_y = u \sin \vartheta$ pode ser feita mudando as variáveis de integração de u e ϑ com $du_x du_y = u du d\vartheta$. A equação 15 fica então:

$$f(x, y) = \int_0^\pi d\vartheta \int_{-\infty}^{\infty} P(\vartheta, u) e^{2\pi i u \xi} |u| du \quad (\text{eq.19})$$

É possível identificar na equação 19 dois dos fatores referentes ao teorema da convolução no domínio de Fourier, no caso, o kernel (filtro) rampa $|u|$ e as projeções transformadas de Fourier $P(\vartheta, u)$. No domínio espacial, o kernel rampa fornece:

$$k(\xi) = \int e^{2\pi i u \xi} |u| du = -\frac{1}{2\pi^2 \xi^2} \quad (\text{eq.20})$$

A reconstrução da imagem final é dada, finalmente, por:

$$f(x, y) = \int_0^\pi P(\vartheta, \xi) * k(\xi) d\vartheta \quad (\text{eq.21})$$

A equação 21 mostra que a projeção p deve ser primeiramente filtrada (convoluída) com o kernel de reconstrução $k(\xi)$. Em seguida, deve ser feita a integração do resultado da convolução para todos os valores de ϑ . Este passo geralmente é implementado de forma diferente. Ao invés de selecionar um ponto (x, y) e integrar todo ϑ para este ponto, é fixado uma projeção neste ângulo ϑ , realizando um loop para todos os pixels (x, y) e, para cada trio (x, y, ϑ) o correspondente ξ é avaliado como sendo a posição do detector para procurar o valor da projeção convoluída desejada. Desta forma o valor

da convolução é adicionado ao pixel. Este processo é conhecido como retroprojeção. A equação 21 consiste da filtragem, seguida de retroprojeção, o que nos fornece a base para um algoritmo para reconstrução pelo método de retroprojeção filtrada (fig.18).

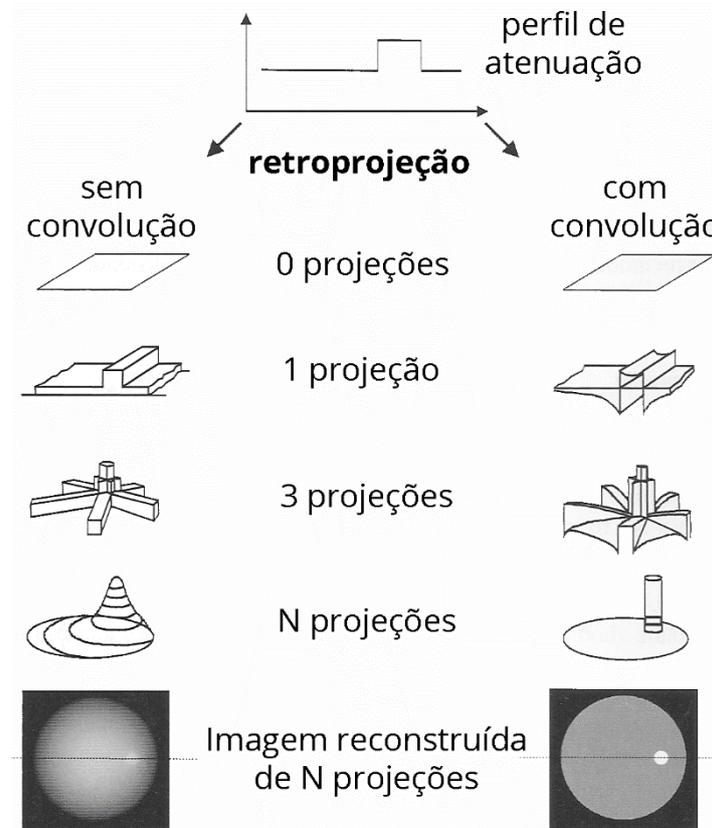


Figura 18: Comparação da reconstrução através do método de retroprojeção com ou sem filtro (Kalender, 2011).

3.8.7. Retroprojeção Filtrada com feixe leque

Atualmente não são mais utilizados, comercialmente, tomógrafos de feixes paralelos. Tomógrafos médicos utilizam, em sua maioria, feixes em forma de leque e, em alguns casos, feixes cônicos. O desenvolvimento da matemática para reconstrução de feixes mais complexos torna-se mais fácil a medida que conhece-se a forma básica de reconstrução por feixes mais simples. Da mesma forma, pode-se facilmente mostrar que feixes paralelos são o caso limite para feixes leque com pequena abertura, assim como feixes leque são o caso limite para feixes cônicos sem a variável z .

Considere inúmeros fótons emergindo da fonte em uma posição s com vetores direção Θ propagando em direção ao detector. A integral de linha medida por um raio que inicia a partir da posição s com direção Θ é dada por:

$$q(s, \theta) = \int_0^{\infty} f(s + \lambda\theta) d\lambda \quad (\text{eq.22})$$

Onde:

q são os dados do feixe em leque;

As aquisições tomográficas necessitam que a fonte mova-se ao redor do objeto por uma trajetória $s(\alpha)$. Em sua grande maioria, esta trajetória é circular e o parâmetro α coincide com o ângulo de rotação da fonte. Como o caso é bidimensional, um parâmetro é suficiente para descrever a direção Θ , no caso:

$$\Theta = \begin{pmatrix} -\text{sen}\Theta \\ \text{cos}\Theta \end{pmatrix}$$

Como os vetores s e Θ são funções de um único parâmetro, pode-se escrever $q(\alpha, \Theta)$ no lugar de $q(s, \Theta)$.

Partindo do algoritmo de feixes paralelos, decompõe-se o filtro de reconstrução como $k(\xi) = \partial_\xi K(\xi)$, onde ∂_ξ é a derivada parcial com relação a ξ . Substituindo no integrando de 21 e substituindo as variáveis por vetores em duas dimensões:

$$\begin{aligned} (p * k)(\vartheta, \xi) &= \partial_\xi p(\vartheta, \xi) * K(\xi) = \\ &\partial_\xi \int d^2r f(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} \cdot \vartheta - \xi) K(\xi) = \\ &\partial_\xi \int d^2r f(\mathbf{r}) K(\xi - \mathbf{r} \cdot \vartheta) \end{aligned} \quad (\text{eq.23})$$

O objetivo é processar todas as integrais de linha na ordem de aquisição. A posição s é fixada e $\xi = s \cdot \vartheta$ é usado, que é o valor correspondente de ξ para um raio emergindo de s com direção ϑ . Como α é um parâmetro livre em $s \cdot \vartheta$, a derivada com relação a ξ pode ser manipulada. É possível então derivar com relação a α , acrescentando um fator $s \cdot \vartheta$ resultante da regra da cadeia:

$$\begin{aligned} (p \cdot k)(\vartheta, \mathbf{s} \cdot \vartheta) &= \frac{1}{\mathbf{s}' \cdot \vartheta} \partial_\alpha \int d^2r f(\mathbf{r}) K(\mathbf{s} \cdot \vartheta - \mathbf{r} \cdot \vartheta) \\ &= \frac{1}{\mathbf{s}' \cdot \vartheta} \partial_\alpha \int d\theta d\lambda f(\mathbf{s} + \lambda\Theta) \lambda K(-\lambda\Theta \cdot \vartheta) \\ &= \frac{1}{\mathbf{s}' \cdot \vartheta} \partial_\alpha \int d\theta q(\mathbf{s}, \Theta) K(-\Theta \cdot \vartheta) \end{aligned} \quad (\text{eq.24})$$

Onde, na segunda passagem, as variáveis de integração foram mudadas de d^2r para $\lambda d\lambda d\Theta$, substituindo $\mathbf{r} = \mathbf{s} + \lambda\Theta$. Na terceira passagem, a propriedade $\lambda K(\lambda\xi) = K(\xi)$ e a definição da equação 22 foram usadas para retirar a integral sobre λ .

A integral externa da equação 21 representa o processo de retroprojeção. Para um feixe leque, é necessária a mudança de ϑ para α . Para um pixel fixo \mathbf{r} é possível verificar que o ângulo ϑ do raio é uma função da posição $s(\alpha)$ e de \mathbf{r} . Sendo esta dependência representada como $\vartheta(\mathbf{r}, \alpha)$, é necessário calcular o Jacobiano $\vartheta' = \partial_\alpha \vartheta(\mathbf{r}, \alpha)$ para mudar as

variáveis de integração de $d\vartheta$ para $d\alpha$. Usando a relação $(\mathbf{r}-\mathbf{s}(\alpha))\cdot\boldsymbol{\vartheta}=0$, derivando em relação a α e obtendo a solução para ϑ' :

$$\partial_{\alpha}\vartheta(\mathbf{r},\alpha)=\frac{\mathbf{s}'\cdot\boldsymbol{\vartheta}}{|\mathbf{r}-\mathbf{s}|} \quad (\text{eq.25})$$

Para o caso de soluções múltiplas, é necessário atribuir um peso $w(\mathbf{r},\vartheta,\alpha)$ para cada solução, de forma que a soma total seja 1. Dessa forma $d\vartheta$ fica:

$$d\vartheta = w(\mathbf{r},\vartheta,\alpha) \left| \frac{\mathbf{s}'\cdot\boldsymbol{\vartheta}}{|\mathbf{r}-\mathbf{s}|} \right| d\alpha \quad (\text{eq.26})$$

Substituindo a eq.24 e 26 na eq. 21, finalmente obtêm-se a integral de retroprojeção filtrada para reconstrução por feixe leque:

$$f(\mathbf{r}) = \int_{\pi(\mathbf{r})} d\alpha \frac{w(\mathbf{r},\vartheta,\alpha)\text{sgn}(\mathbf{s}'\cdot\boldsymbol{\vartheta})}{|\mathbf{r}-\mathbf{s}|} \int d\Theta q'(\alpha,\Theta)K(-\Theta\cdot\boldsymbol{\vartheta}) \quad (\text{eq.27})$$

3.8.8. Algoritmo de Feldkamp

O algoritmo de Feldkamp usa a geometria de feixe cônico da radiação para a reconstrução de imagens a partir de dados tomográficos tridimensionais. Este algoritmo é uma aproximação da reconstrução em feixe cônico, através da retroprojeção filtrada, de forma análoga ao caso do feixe bidimensional. Ainda assim, é um dos mais utilizados. A formulação matemática limita-se a trajetórias presas ao plano x-y, no caso, a trajetória circular (Xiao, Bresler e David 2003).

Convertendo a transformada de Radon para três dimensões:

$$p(\vartheta,\xi) = \int f(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\vartheta} - \xi)d^3r \quad (\text{eq.28})$$

Onde:

$\mathbf{r} = (x,y)$ é o vetor de coordenadas;

$\boldsymbol{\vartheta} = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}$ é o vetor unitário normal ao plano;

Neste caso passamos a lidar com integrais sobre planos ao invés de linhas. Todos os vetores são tridimensionais. A transformada tridimensional de Radon é invertida de forma análoga ao caso mostrado para feixes leque. Assim sendo:

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int d^2\vartheta (p * k)(\vartheta,\hat{\xi}) = \frac{1}{2} \int d^2\vartheta \int d\xi p(\vartheta,\xi)k(\hat{\xi} - \xi) \quad (\text{eq.29})$$

Onde $\hat{\xi} = \mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\vartheta}$ e :

$$k(\xi) = \int u^2 e^{2\pi i u \xi} du = -\frac{1}{4\pi^2} \delta''(\xi) \quad (\text{eq.30})$$

A projeção de feixe cônico é definida como:

$$q(\mathbf{s},\Theta) = \int_0^{\infty} f(\mathbf{s} + \lambda\Theta) d\lambda \quad (\text{eq.31})$$

Onde todos os vetores são tridimensionais. A aquisição tomográfica necessita que a fonte, ou o objeto, percorra uma trajetória $\mathbf{s}(\alpha)$ em torno de um eixo de rotação. Com

exceção da tomografia em espiral, as trajetórias são, em geral, circulares e o parâmetro α é escolhido de forma a coincidir com o ângulo de rotação. Podemos, então, usar $q(\alpha, \Theta)$.

A idéia básica de Feldkamp foi de decompor o vetor Θ em uma componente perpendicular ao plano de rotação e uma componente paralela. Isto leva ao abandono da componente do feixe no eixo z durante a etapa de filtragem. Apenas na etapa de retroprojeção é retomada a influência desta coordenada (Feldkamp, Davis, & Kress, 1984). Basicamente, o algoritmo de Feldkamp consiste de uma filtragem unidimensional, linha por linha dos dados provenientes do detector seguida por uma retroprojeção tridimensional de feixe cônico.

A decomposição do vetor tridimensional Θ pode ser representada por:

$$\Theta = \cos\gamma\Theta^\perp + \sin\gamma\Theta^\parallel \quad (\text{eq.32})$$

Onde:

γ é o ângulo entre o raio e o plano x-y;

$\Theta^\perp = \begin{pmatrix} -\sin\Theta \\ \cos\Theta \\ 0 \end{pmatrix}$ é a decomposição paralela ao plano de rotação;

$\Theta^\parallel = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ é a decomposição perpendicular ao plano de rotação;

Desta forma, a projeção pode ser escrita como:

$$q(\mathbf{s}, \Theta) = \int_0^\infty f(\mathbf{s} + \lambda\Theta) d\lambda = \int_0^\infty \frac{d\lambda}{\cos\gamma} f(\mathbf{s} + \lambda\Theta^\perp + \lambda\tan\gamma\Theta^\parallel) \quad (\text{eq.33})$$

Semelhante a projeção bidimensional, ao desconsiderar o terceiro termo no argumento de f . O fator de correção $\cos\gamma$ está relacionado ao aumento da distância de interseção do raio com o objeto quando $\gamma \neq 0$. Este fator é característico de algoritmos de Feldkamp, sendo aplicado aos dados na fase de pré-processamento. Ao definir:

$$q_\gamma^\perp(\mathbf{s}, \Theta^\perp) = q(\mathbf{s}, \Theta)\cos\gamma \quad (\text{eq.34})$$

É possível perceber que q^\perp comporta-se como a projeção bidimensional, visto que as componentes de \mathbf{s} e Θ^\perp são constantes. A reconstrução pelo algoritmo de Feldkamp, nesta etapa, consiste então da filtragem de q^\perp equivalente ao caso bidimensional. Em seguida, a retroprojeção é feita em três dimensões.

A generalização do algoritmo de reconstrução de Feldkamp, a partir do caso bidimensional, é dada por (Kalender, 2011):

$$f(\mathbf{r}) = \int_{\pi(\mathbf{r})} d\alpha \frac{w(\mathbf{r}, \vartheta^\perp, \alpha) \text{sgn}(s' \cdot \vartheta^\perp)}{|\mathbf{r} - \mathbf{s}|} \int d\Theta (q_\gamma^\perp)'(\alpha, \Theta^\perp) K(-\Theta^\perp \cdot \vartheta^\perp) \quad (\text{eq.35})$$

Onde:

sgn é a função sinal, que extrai o sinal de um número real;

$$\vartheta^\perp = \begin{pmatrix} \cos\vartheta \\ \text{sen}\vartheta \\ 0 \end{pmatrix};$$

E ϑ é escolhido de tal forma que $(\mathbf{r}-\mathbf{s}(\alpha)) \cdot \vartheta^\perp = 0$ e γ tal que Θ é paralelo a $\mathbf{r}-\mathbf{s}$, ou seja, $\text{sen}\gamma = (z-s_z)/(|\mathbf{r}-\mathbf{s}|)$. Um ponto importante sobre o algoritmo de Feldkamp é o fato, já mencionado, que este ignora o eixo z na fase de filtragem. Isto acarreta no surgimento de artefatos, que aumentam quanto maior o ângulo do feixe cônico e, portanto, maior torna-se a contribuição do eixo z.

3.9. Dupla Energia associada a microtomografia

As mudanças nos valores obtidos na tomografia computadorizada convencional podem ser associadas a uma mudança na densidade ρ e no número atômico efetivo Z_{ef} do objeto. Isto corresponde a definição física do coeficiente de atenuação linear (Cesareo, 2000):

$$\mu = \frac{\mu}{\rho}(E, Z) * \rho = \mu_m * \rho \quad (\text{eq.36})$$

Onde:

ρ é a densidade do objeto;

Z é o número atômico do objeto;

μ_m é o coeficiente de atenuação de massa;

O coeficiente de atenuação de massa é dependente da energia da radiação e do número atômico do objeto em questão. Há possibilidade que a combinação dos parâmetros de densidade, número atômico e coeficiente de atenuação de massa forneçam valores semelhantes para o coeficiente de atenuação linear, o que resultaria em imagens em coeficiente de atenuação semelhantes, não permitindo a diferenciação de estruturas diferentes.

A técnica de dupla energia associada a tomografia computadorizada ($\mu\text{CT-DE}$) utiliza a dependência em energia de μ devido ao número atômico dos materiais que compõem o objeto. De uma forma geral, duas tomografias adquiridas com diferentes espectros de energia da fonte de radiação permitem relacionar as diferenças no coeficiente de atenuação da imagem tomográfica. A $\mu\text{CT-DE}$ permite, então, a reconstituição da tomografia de um objeto, onde o resultado final fornece a distribuição da densidade e do número atômico efetivo no volume do objeto.

A atenuação de raios X na faixa de energias utilizadas na tomografia computadorizada é dependente, predominantemente, de dois efeitos: espalhamento

Compton e absorção fotoelétrica. Isto significa que a curva do coeficiente de atenuação μ_i de um material arbitrário i , como função da energia, pode ser descrita como a combinação destes dois efeitos:

$$\mu_i = a_1\sigma(E) + a_2\tau(E) \quad (\text{eq.37})$$

Onde:

σ representa o espalhamento Compton;

τ representa a absorção fotoelétrica;

a_1 e a_2 são pesos, de acordo com a composição do objeto;

Os valores de tons de cinza obtidos nas imagens tomográficas são proporcionais a atenuação da radiação que é dependente da densidade, do número atômico efetivo e da energia da radiação. Um aumento no número atômico gera uma predominância do efeito de absorção fotoelétrica. Se os efeitos de espalhamento Compton e absorção fotoelétrica podem ser diferenciados, uma melhor correlação pode ser obtida. É necessário, porém, materiais que possuam características conhecidas.

A aquisição de materiais homogêneos de calibração em duas energias diferentes permite a reconstrução de duas novas imagens, porém o método da dupla energia é um método extremamente sensível a pequenas variações na imagem, ou artefatos de aquisição. Desta maneira, aquisições tomográficas com boa qualidade de imagem são necessárias eliminando, preferencialmente, distorções devido a artefatos de anel, artefatos estrela ou endurecimento de feixe. É visto, experimentalmente, que (Van Geet, Swennen e Wevers, 2000):

$$\mu_m = \frac{\mu(E)}{\rho} = \alpha(E) + \beta(E)Z_{\text{ef}}^{3.8} \quad (\text{eq.38})$$

Onde:

α e β são coeficientes dependentes da energia da radiação;

Z_{ef} é o número atômico efetivo, definido por;

$$Z_{\text{ef}} = \sum_{i=1}^N (f_i Z_i^{3.8})^{1/3.8}$$

Onde:

f_i é a fração molecular do elemento i presente no objeto;

Z_i é o número atômico do elemento i presente no objeto;

Para raios X monocromáticos, os coeficientes α e β são imediatamente calculados. Para um espectro policromático, entretanto, é necessário o conhecimento de todo o espectro do feixe de radiação proveniente da fonte, para que se conheça a energia média,

ou efetiva, gerado pelo feixe que interage com o objeto em análise. O conhecimento do espectro da radiação permite, então, o cálculo dos coeficientes α e β . Notavelmente a escolha de materiais homogêneos de referência diminui os erros inerentes às aquisições tomográficas devido a interação do feixe policromático com o objeto. O conhecimento das variáveis α e β permite, através de métodos matemáticos como, por exemplo, o da regressão linear, a obtenção dos parâmetros de densidade, ρ , e número atômico efetivo, Z_{ef} através de:

$$\rho = \frac{\beta_h \mu_l - \beta_l \mu_h}{\beta_h \alpha_l - \beta_l \alpha_h} \quad (\text{eq.39})$$

$$Z = \sqrt[3.8]{\frac{\alpha_l \mu_h - \alpha_h \mu_l}{\beta_h \mu_l - \beta_l \mu_h}} \quad (\text{eq.40})$$

Onde:

μ_l e μ_h são os coeficiente de atenuação linear para a aquisição em baixa e em alta energia, respectivamente;

α_l e α_h é o coeficiente linear obtido da eq. 38 em baixa e em alta energia, respectivamente;

β_l e β_h é o coeficiente angular obtido da eq. 38 em baixa e em alta energia, respectivamente;

A calibração do sistema tomográfico pela técnica de dupla energia com os materiais de referência permite a obtenção dos parâmetros de densidade e número atômico efetivo sem necessidade de conhecimento prévio da amostra analisada.

Os pontos mais importantes a serem avaliados para um melhor resultado pela técnica de dupla energia são: aumentar a SNR, diminuindo a presença de ruídos na imagem e o uso de filtros, sejam eles físicos ou computacionais, para diminuição do efeito de endurecimento de feixe na imagem tomográfica reconstruída, principalmente para materiais mais atenuantes.

A decomposição dos materiais interpreta diferenças entre os dois valores medidos de atenuação. As diferenças podem ser muito pequenas, particularmente se as energias efetivas utilizadas nas duas medições não forem consideravelmente distintas. As imagens com o uso de μ CT-DE também apresentam maior ruído, visto que qualquer pequena variação como, por exemplo, no movimento do objeto pode ser interpretada como uma variação na composição interna do objeto.

3.10. Minerais e rochas

Minerais são substâncias que surgem naturalmente como um resultado de processos geológicos. São sólidos, estáveis a temperatura ambiente, representados por

uma fórmula química, possuem estrutura atômica ordenada e são encontrados, geralmente, na forma cristalina. São diferentes de uma rocha, a qual pode ser um agregado de minerais e não possui uma composição química específica. A maior parte da crosta terrestre é constituída de silício e oxigênio, o que leva a predominância de minerais de silicato encontrados na crosta. Outros elementos frequentemente encontrados na composição química de minerais são: alumínio, ferro, magnésio, cálcio, sódio e potássio (Sherley, 1985).

Rochas podem, ou não, ser agregados de um ou mais minerais. Rochas como calcário são compostas, principalmente, do mineral calcita ou aragonita, por exemplo. O carvão, considerado um tipo de rocha, é composto de material sedimentar, devido a derivados orgânicos.

Um motivo referente a importância do conhecimento da mineralogia de rochas vem do fato que, por exemplo, há grandes quantidades de recursos, como petróleo, óleo e gás, em reservatórios de rochas carbonáticas, inclusive as camadas do pré-sal descobertas recentemente. Rochas carbonáticas são um tipo de rocha sedimentar, que por sua vez é um material que ocorre naturalmente devido a processos de erosão e intemperismo. Rochas carbonáticas possuem composição primária de minerais carbonáticos. Destacam-se a rocha calcário, composta do mineral calcita e/ou aragonita, e a rocha dolomito, composta do mineral dolomita. O estudo de minerais permite averiguar propriedades, fora a densidade e número atômico, de um objeto pela mineralogia do mesmo. A composição mineralógica heterogênea de uma rocha pode levar a influência dos minerais para características da rocha como, por exemplo, porosidade e permeabilidade. O conhecimento da mineralogia também permite a escolha, na área petrolífera, de métodos mais adequados de perfuração e extração de recursos combustíveis, além da possibilidade de antecipar efeitos indesejáveis de técnicas já utilizadas comumente. Associado a tomografia computadorizada, uma técnica não destrutiva, é possível analisar minerais e rochas sem perda da amostra original o que, em muitos casos, são materiais de difícil obtenção e custo.

IV. Metodologia

A metodologia deste estudo foi dividida em três etapas principais: a validação da metodologia proposta pela técnica de μ CT-DE através da simulação da mesma usando valores teóricos tabelados de densidade, número atômico e coeficiente de atenuação para elementos químicos homogêneos e heterogêneos da tabela periódica (Cesareo, 2000); a avaliação do espectro do tubo de raios X com relação a energia efetiva pela interação com uma esfera de alumínio certificada; e a aplicação da metodologia para calibração do sistema tomográfico utilizando amostras geológicas e minerais de densidade e número atômico efetivo conhecidos.

Após validação e calibração, a metodologia foi aplicada em um algoritmo desenvolvido para processamento de dados das imagens tomográficas, de forma a obter imagens em escala de densidade e número atômico efetivo e, com a combinação destes parâmetros, a segmentação mineralógica.

4.1. Sistema tomográfico

O sistema microtomográfico utilizado neste trabalho foi o microtomógrafo, modelo 1173, da Skyscan-Bruker[®] (fig.19a). Este sistema consiste de: um tubo de raios X microfocos, da Hamamatsu[®] (fig.19b), com anodo de tungstênio (W), e capacidade máxima de operação a 130 kV de tensão e 8 W de potência; um detector flat-panel, da Hamamatsu[®], de matriz de 2240 x 2240 pixels (fig.19c); tamanho focal mínimo de 5 μ m; resolução máxima de 10 μ m; e microposicionador de amostra, nas direções XYZ (Skyscan, 2014).

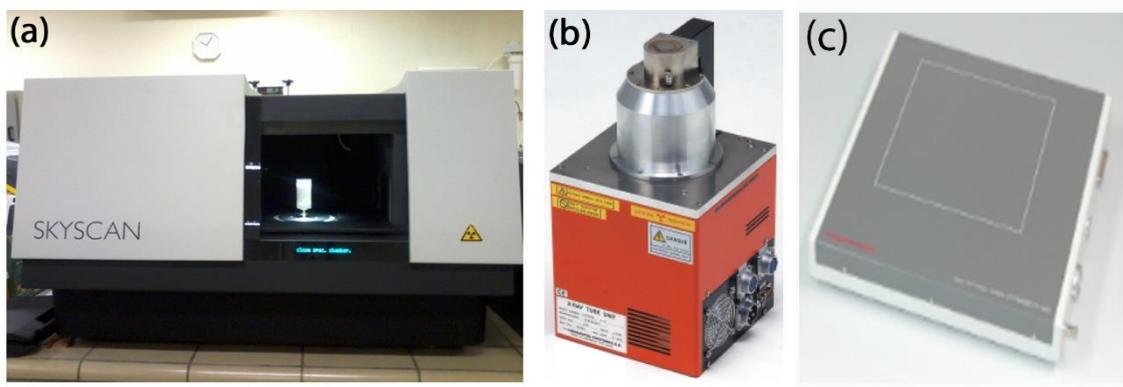


Figura 19: (a) Microtomógrafo modelo 1173; (b) Tubo de raios X microfocos (c) Detector flat-panel.

A tabela 1 mostra os parâmetros de aquisição utilizados no estudo e implementação da metodologia de μ CT-DE.

Tabela 1: Parâmetros de aquisição utilizados no presente estudo.

Parâmetros	Valores	
Tensão (kV)	80	130
Corrente (μ A)	100	61
Matriz (pixels)	2240 x 2240	
Tamanho de pixel (μ m)	10	
Passo angular ($^{\circ}$)	0.5	
Número de quadros	5	
Movimento aleatório	50	
Filtro (mm)	0.15 Cu	0.50 Cu

A energia do sistema (kV) está relacionada a capacidade da radiação proveniente do tubo de raios X atravessar uma amostra. Altas energias são capazes de atravessar objetos mais densos, enquanto baixas energias passam por objetos menos densos. É fundamental a escolha adequada da energia da radiação para cada amostra estudada, visto que isto influencia, diretamente, o contraste e qualidade da imagem final.

A corrente (μ A) é proporcional ao número de fótons de raios X que saem da fonte em direção a amostra e o detector. Uma corrente maior ajuda na obtenção de um número maior de dados estatísticos, mas também pode influenciar no aumento de ruído na imagem final devido ao efeito de espalhamento.

A matriz do detector está relacionada a qualidade da imagem e sua resolução. Uma matriz maior, com um número maior de pixels, permite a obtenção de informações mais detalhadas, ou seja, uma maior resolução da imagem final da amostra.

O tamanho do pixel está diretamente conectado a resolução espacial do sistema. Ele representa a capacidade de diferenciar todos os objetos em uma imagem, ou seja, as menores estruturas, ou a menor separação entre os objetos, por exemplo na identificação de um poro.

O passo angular é o ângulo entre cada projeção adquirida. Um número maior de projeções fornece um número maior de dados para reconstrução, o que aumenta a fidelidade da imagem final em comparação ao objeto analisado e diminui a intensidade de artefatos como, por exemplo, o artefato em estrela.

O número de quadros (frames) remete ao número de imagens que compõem cada projeção obtida, de forma a aumentar a relação sinal ruído e, portanto, melhorar a qualidade da imagem.

O movimento aleatório efetua mudanças na posição vertical do suporte da amostra para cada projeção, mudando a localização relativa ao detector e, por consequência, a dos pixels com sensibilidade alterada, com o objetivo de diminuir a intensidade dos artefatos em forma de anel.

Os filtros metálicos são usados para absorver e atenuar os fótons de baixa energia, aumentando a energia efetiva do espectro do feixe de raios X, e reduzindo a intensidade de artefatos na imagem final reconstruída como, por exemplo, o endurecimento de feixe (Jovanović, 2013).

4.2. Software de reconstrução NRecon

O software utilizado para reconstrução das seções transversais das amostras estudadas a partir das projeções (fig. 20a) obtidas no tomógrafo foi o NRecon[®] (v. 1.6.9.3). Este software é gratuito e foi desenvolvido pela fabricante do sistema tomográfico (Skyscan, 2014). Ele utiliza um algoritmo de reconstrução baseado no algoritmo original de Feldkamp. O software permite fazer algumas correções em relação a possíveis artefatos não eliminados completamente durante a fase de aquisição antes da reconstrução efetiva das fatias tomográficas. Os principais parâmetros (fig. 20b) em que este software permite correção são, basicamente:

- Suavização (smoothing): efetua uma operação de filtragem calculando, por exemplo, a média dos pixels vizinhos, de forma a suavizar a imagem que, muitas vezes, aparenta estar granulada. Tem por objetivo diminuir o ruído e melhorar a qualidade da imagem final. Três kernels de suavização são disponibilizados: Box (assimétrico e simétrico) e Gaussiano;
- Desalinhamento (misalignment compensation): efetua uma correção entre uma projeção e sua correspondente a 180° de deslocamento angular, que podem se desalinhar durante o processo de aquisição. Melhora a identificação de estruturas, e evita a duplicação do objeto na imagem;
- Correção de artefatos de anel (ring artifacts correction): diminui, ou elimina, a intensidade dos artefatos em forma de anéis concêntricos que surgem devido as diferenças de sensibilidade dos pixels do detector flat-panel;

- Correção de endurecimento de feixe (beam-hardening correction): corrige variações na atenuação das bordas da imagem em relação ao centro devido a absorção diferenciada da radiação de baixa energia provenientes de um espectro policromático, característica da fonte utilizada;

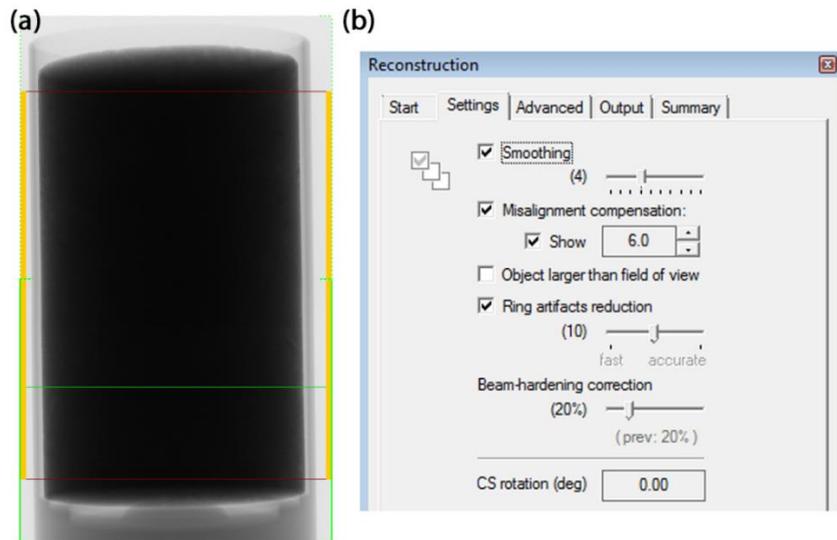


Figura 20: (a) Projeção; (b) Parâmetros de reconstrução.

É possível decidir também os limites mínimo e máximo do histograma da distribuição do coeficiente de atenuação da imagem (fig.21a). Valores abaixo do valor mínimo são convertidos para tons de cinza com valor 0 e valores acima do valor máximo são convertidos para tons de cinza com valor de 255 (fig.21b). Após a correção de cada um dos parâmetros, com o objetivo de obter uma reconstrução livre de artefatos e uma melhor qualidade na imagem final, escolhem-se estes valores mínimos e máximos (fig. 21c) do coeficiente de atenuação. De uma forma geral, o valor máximo escolhido é aproximadamente 10% maior do que o verificado no histograma da imagem, enquanto o valor mínimo é próximo de 0.

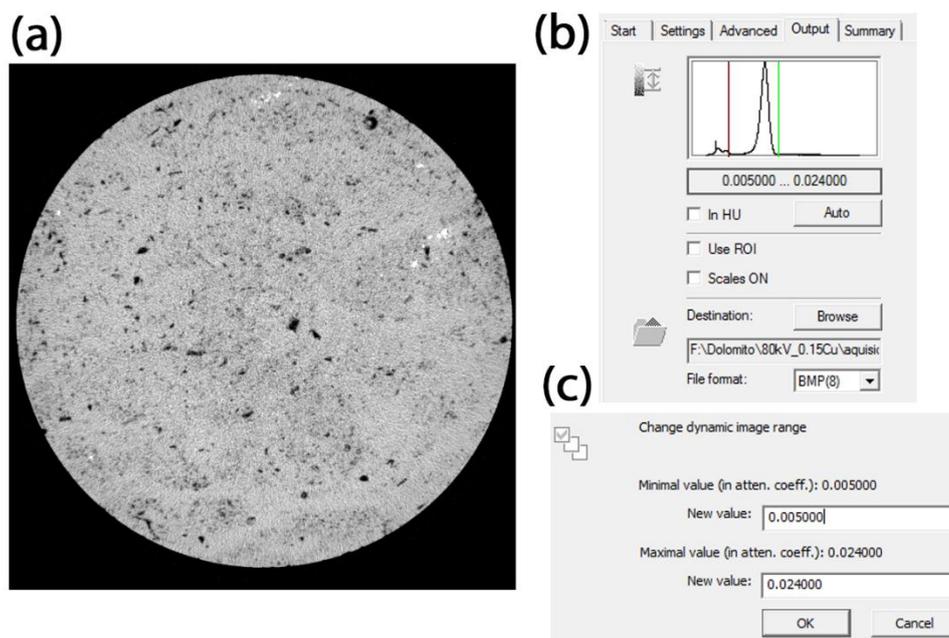


Figura 21: (a) reconstrução de uma fatia transversal da amostra; (b) histograma para coeficiente de atenuação; (c) valores de coeficiente de atenuação mínimo e máximo.

4.3. Software de Quantificação CTan

O software para quantificação de dados de imagens tomográficas utilizado neste trabalho foi o CTan[®] (v. 1.13.2.1). Este software é comercial, desenvolvido e distribuído pela fabricante do tomógrafo e permite quantificar parâmetros referentes a imagem (fig.22a) como, por exemplo, sua porosidade total, a distribuição do tamanho dos poros, etc (Skyscan, 2014).

O uso do software costuma seguir uma ordem de procedimentos. Inicialmente é definido a região de interesse (ROI) (fig.22b) a qual será analisada e processada pelo software. Com a área, ou volume, da imagem definido para quantificação, é feita uma binarização, ou segmentação (fig.22c), das estruturas de interesse, sejam elas poros, matriz da amostra ou estruturas de diferentes densidades da amostra. Em seguida, é feita a quantificação dos parâmetros segmentados, obtendo-se, por exemplo, a porosidade da amostra e a distribuição de tamanho de poros (fig. 22d). É possível, após a segmentação, criar um modelo 3D da ROI e estruturas segmentadas.

O CTan[®] (v. 1.13.2.1) foi utilizado neste trabalho devido à dois pontos principais: a definição da região de interesse de análise nas imagens tomográficas das amostras usadas na calibração do sistema por μ CT-DE e a identificação do valor do coeficiente de atenuação pelo volume da amostra, restrito a ROI selecionada.

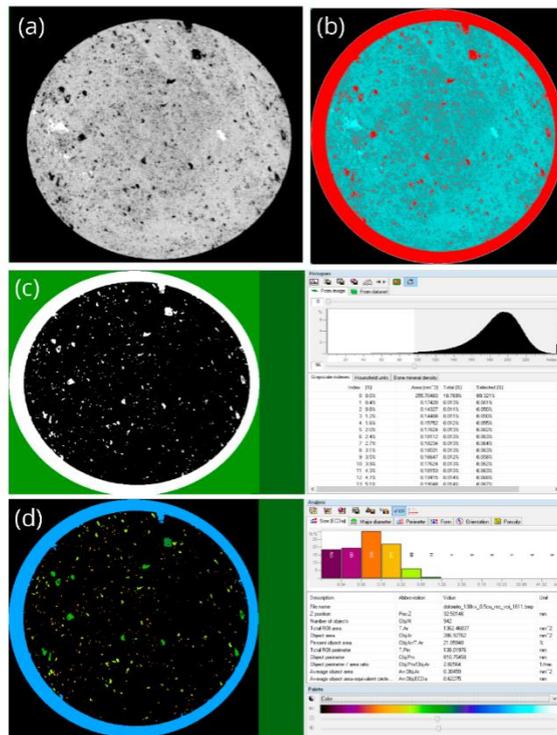


Figura 22: (a) seção transversal; (b) região de interesse (ROI); (c) imagem binarizada e histograma de binarização; (d) quantificação e distribuição por tamanho de poros.

4.4. Simulação

A validação da técnica de μ CT-DE foi feita utilizando coeficientes de atenuação tabelados para elementos químicos homogêneos (puros) e heterogêneos (minerais) de número atômico e densidade conhecidos, para duas energias escolhidas (Cesareo, 2000). Os parâmetros α e β , da eq. 38, foram obtidos pelo método da regressão linear do coeficiente de atenuação de massa e o número atômico dos elementos puros. A escolha das energias para verificação da metodologia através da simulação é irrelevante, visto que a metodologia deve funcionar para qualquer par de energias diferentes escolhido. As únicas ressalvas são o uso dos mesmos parâmetros de aquisição, com exceção dos valores do coeficiente de atenuação máximo e mínimo escolhidos durante a etapa de reconstrução. Esta etapa foi feita com energias de 80 e 130 kV.

A tabela 2 e 3 mostram os elementos químicos homogêneos e heterogêneos, respectivamente, usados na simulação da técnica de μ CT-DE, e os parâmetros de calibração, no caso, densidade, número atômico e coeficiente de atenuação (Chantler et al., 2000). Os elementos usados na calibração foram escolhidos de acordo com a frequência em que surgem na composição de minerais e amostras geológicas.

Tabela 2: Elementos homogêneos (puros) e parâmetros de simulação.

Elemento	ρ (g/cm ³)	Z_{ef}	μ_l (cm ² /g)	μ_h (cm ² /g)
C	2.25	6	0.161	0.140
Mg	1.74	12	0.195	0.148
Al	2.70	13	0.202	0.147
Si	2.42	14	0.222	0.199
Ca	1.55	20	0.365	0.189
Ti	4.50	22	0.405	0.191
Cr	7.14	24	0.490	0.212
Mn	7.30	25	0.530	0.220
Fe	7.86	26	0.595	0.238
Co	8.71	27	0.641	0.248
Ni	8.80	28	0.730	0.273
Cu	8.93	29	0.763	0.277
Zn	6.92	30	0.836	0.296

Tabela 3: Elementos heterogêneos (minerais) e parâmetros de simulação.

Mineral	Fórmula	ρ (cm ³ /g)	Z_{ef}	μ_l (cm ² /g)	μ_h (cm ² /g)
Albita	NaAlSi ₃ O ₈	2.60	11.62	0.1900	0.1471
Quartzo	SiO ₂	2.65	11.85	0.1935	0.1487
Howlita	Ca ₂ B ₅ SiO ₉ (OH) ₅	2.62	13.76	0.2113	0.1531
Dolomita	CaMg(CO ₃) ₂	2.83	13.94	0.2135	0.1533
Calcita	CaCO ₃	2.71	15.88	0.2462	0.1612
Apatita	Ca ₅ (PO ₄) ₃ F	3.17	16.42	0.2581	0.1634
Fluorita	CaF ₂	3.10	16.98	0.2674	0.1637
Pirita	FeS ₂	4.84	22.21	0.4153	0.1987
Hematita	Fe ₂ S ₃	5.04	23.70	0.4394	0.2040

O uso de elementos aleatórios da tabela periódica, assim como minerais, permite a avaliação da calibração simulada, de forma a garantir o funcionamento da metodologia, independente da escolha do elemento homogêneo ou heterogêneo, assim como verificar

a relação entre a atenuação, densidade e o número atômico. Neste caso, os elementos usados para validar a metodologia proposta e a simulação da mesma foram, para os elementos puros, Vanádio (V), Potássio (K) e Sódio (Na), e para os minerais, Rutilo, Diopsita e Cuprita.

4.5. Energia efetiva

A equação básica da dupla energia (eq. 38) remete a um feixe de radiação monocromático, isto é, raios X provenientes do tubo de raios X com energia única. Entretanto, o espectro do tubo de raios X utilizado no presente estudo é polienergético e, desta forma, o coeficiente de atenuação, que é dependente da energia, muda de acordo com a energia da radiação incidente, assim como as variáveis α e β . Em outras palavras, os coeficientes necessários para o procedimento de calibração são sensíveis a variações de energia e, neste caso, de todos os picos de energia obtidos do espectro polienergético.

Resumidamente, seria necessário ter o conhecimento integral do espectro do tubo de raios X para obter a energia média, ou energia efetiva, da radiação oriunda da fonte do microtomógrafo (Fig. 23). O sistema microtomográfico usado neste trabalho, entretanto, é fechado, ou seja, não pode ser acessado e operado enquanto a fonte de raios X está ligada, ou a porta aberta, devido a dispositivos de segurança internos. Não é possível, desta forma, adquirir o espectro de raios X da fonte.

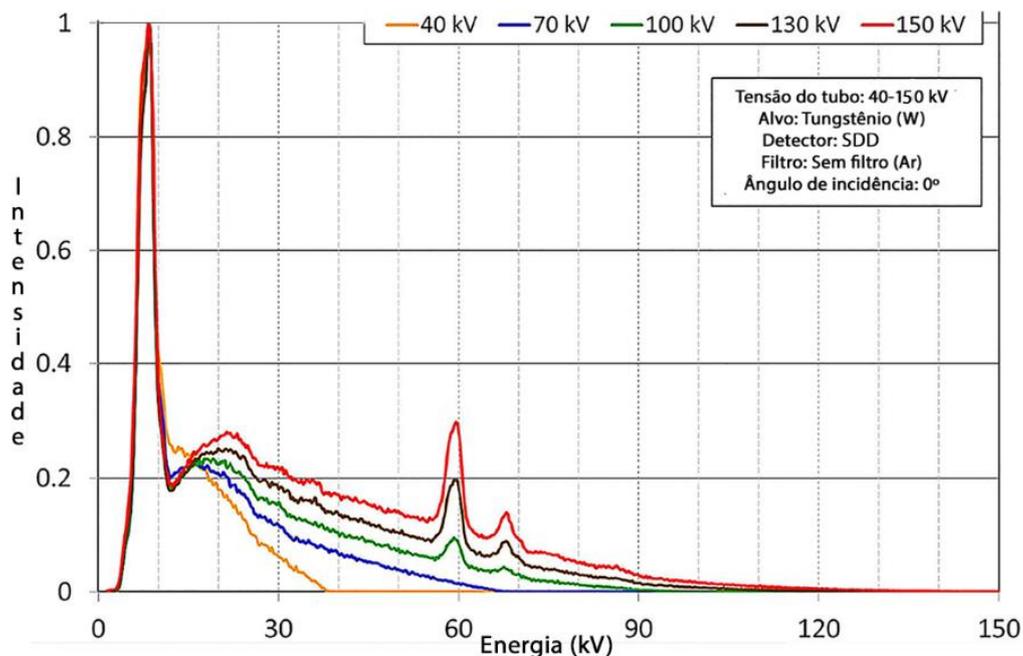


Figura 23: Exemplo de espectros do tubo de raios X em diferentes energias.

Algumas alternativas quanto a esta limitação foram propostas para obter uma aproximação da energia efetiva do espectro de raios X da fonte utilizada no presente estudo. Um espectro monoenergético permite uma tarefa mais simples para obtenção dos coeficientes de atenuação e as variáveis α e β , pois apresenta um pico de energia. Partindo deste raciocínio, é interessante monocromatizar o espectro do tubo de raios X, filtrando as baixas energias e transformando o espectro polienergético em um espectro próximo de um monoenergético.

Uma maneira de monocromatizar o feixe de raios X é pelo uso de filtros metálicos, os quais removem os raios X de baixa energia, alterando a energia efetiva do feixe e, portanto, o coeficiente de atenuação para cada amostra. Os filtros metálicos, ao eliminar as baixas energias, também diminuem efeitos de espalhamento e endurecimento de feixe da radiação, o que melhora a qualidade da imagem e diminui a formação de artefatos para minimizar a variabilidade da μ CT-DE. É necessário, contudo, estimar a espessura necessária dos filtros, para evitar perda de informação e qualidade da imagem devido à redução na intensidade dos fótons incidentes. Filtros metálicos de Cobre (Cu) com 0.15 e 0.50 mm de espessura foram utilizados nas energias de 80 e 130 kV, respectivamente, para todas as amostras, mantendo, assim, a mesma energia efetiva do espectro em cada aquisição. Os filtros possuem área quadrada de 9 cm², e cobrem completamente a saída do tubo de raios X. Filtros de cobre são comumente utilizados para altas energias, apresentando melhor eficiência de atenuação para baixas energias com espessuras menores quando comparado a outros filtros, como alumínio e latão.

A análise e estimativa da energia efetiva do tubo de raios X foi feita utilizando os softwares de reconstrução e quantificação, da fabricante do microtomógrafo, NRecon[®] (v. 1.6.9.3) e CTan[®] (v. 1.13.2.1), que forneceram uma imagem em tons de cinza, com valores associados do coeficiente de atenuação. Uma esfera certificada composta de 99% alumínio (Al) (Fig.24a) de (1.00 ± 0.01) cm de diâmetro foi utilizada neste trabalho para verificar e comparar os valores de coeficiente de atenuação teóricos com os dados experimentais obtidos através do microtomógrafo permitindo, assim, obter informações sobre o espectro do tubo de raios X e sua energia efetiva. Fig. 24d e 24e mostram a homogeneidade da esfera de Al, com um histograma aproximadamente constante de atenuação (Fig.24d) e ausência de poros ou buracos (Fig.24e). Fig. 24f mostra valores do coeficiente de atenuação dados pelo software CTan[®] (v. 1.13.2.1), calculados a partir do volume de interesse definido pelo usuário (Fig.24c) na imagem original (Fig.24b).

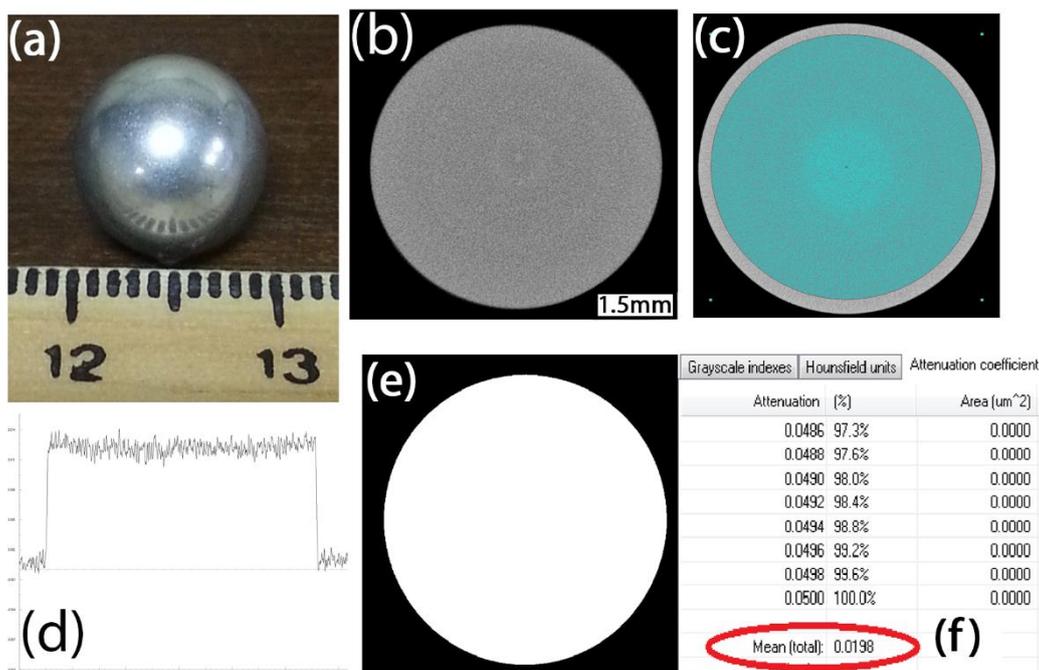


Figura 24: (a) esfera de alumínio; (b) seção transversal da reconstrução da esfera; (c) escolha do ROI; (d) histograma do coeficiente de atenuação; (e) imagem binarizada; (f) quantificação do coeficiente de atenuação (valor médio circulado em vermelho).

4.6. Calibração

A calibração pela técnica de μ CT-DE foi feita com dois grupos diferentes de amostras: elementos puros e minerais, de número atômico efetivo e densidade conhecidos.

A primeira calibração foi feita usando três barras finas dos elementos (Al), ferro (Fe) e cobre (Cu). As barras foram presas a um suporte cilíndrico de acrílico, para evitar movimentação e facilitar o posicionamento (Fig.25a). Fig. 25b e 25c mostra seções transversais da reconstrução tomográfica das barras, adquiridas em 80 e 130 kV.

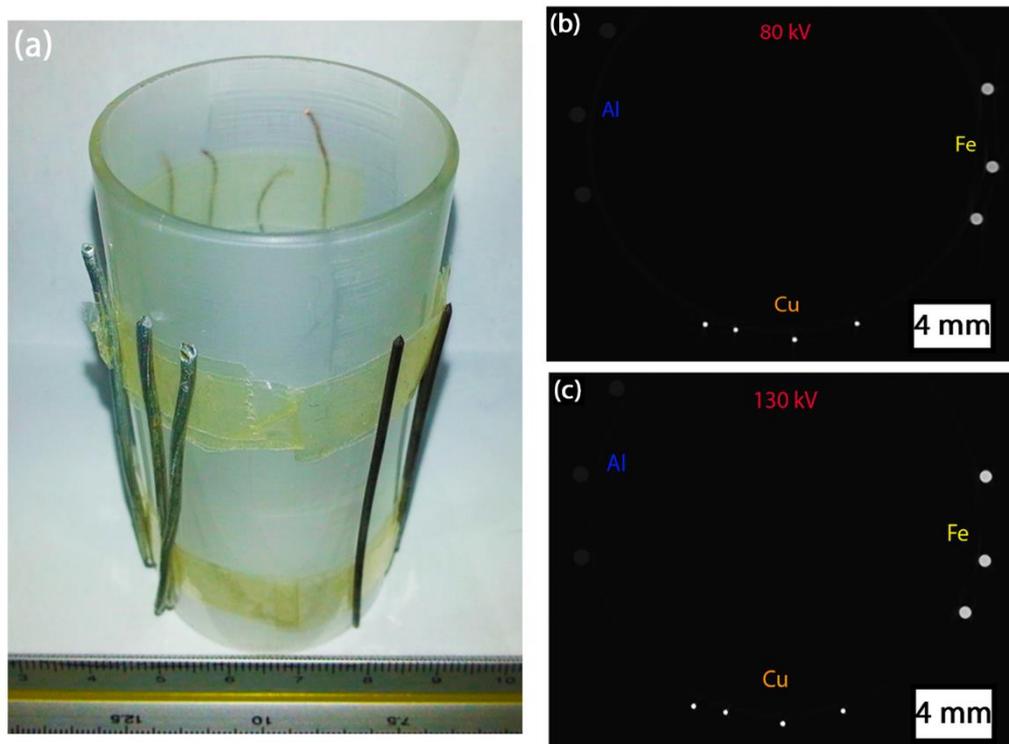


Figura 25: (a) cilindro com bastões dos elementos analisados; (b) imagem reconstruída de aquisição a 80 kV; (c) imagem reconstruída de aquisição a 130 kV.

Os coeficientes α e β , para ambas energias, podem ser obtidos por regressão linear, a qual fornece os valores que fornecem o melhor valor de ajuste para interpolação dos dados no gráfico. É possível, em seguida, comparar a curva ajustada com a equação teórica (eq. 38) que fornece informação acerca do coeficiente de atenuação. Finalmente, após a obtenção de todos os parâmetros necessários, as equações 39 e 40 representam toda informação essencial, ou seja, a capacidade de calcular a densidade ρ e o número atômico efetivo Z_{ef} a partir de qualquer amostra tomografada sobre as mesmas condições experimentais de aquisição.

A microtomografia de uma amostra de rocha dolomito (Fig.26a) foi feita usando as mesmas condições de tensão, corrente e filtros físicos para cada uma das energias, 80 e 130 kV. A Figura 26b mostra a seção transversal da amostra de dolomito. A delimitação da região de interesse, para permitir a quantificação do coeficiente de atenuação deve ser feita evitando regiões de maior variação de tom na imagem.

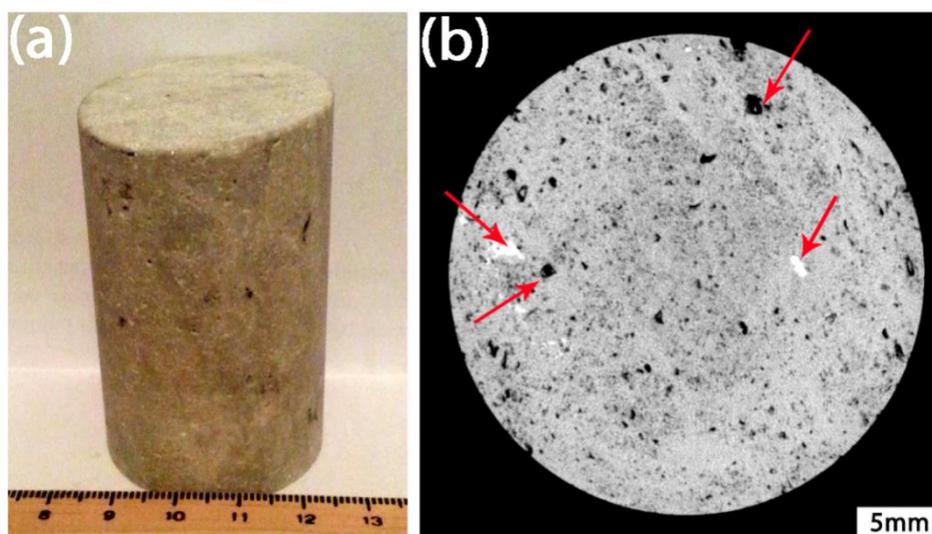


Figura 26: (a) amostra de dolomito; (b) imagem microtomográfica, com identificação de poros e materiais densos pelas setas vermelhas.

A segunda calibração foi feita usando diversas amostras de minerais, de composições diferentes, a fim de aumentar a acurácia e precisão, bem como a representação estatística, com um número maior de amostras, para um ajuste melhor.

Oito amostras de minerais conhecidos (Fig.27) foram utilizados: albita, apatita, calcita, coríndon, fluorita, howlita, quartzo e hematita. A amostra de albita foi usada apenas como material de referência, para testar a calibração mineralógica (Dana 2008). Nesse caso, por possuírem composição homogênea, a decisão da região de interesse nas imagens tomográficas dos minerais para quantificação do coeficiente de atenuação pode ser feita envolvendo toda a amostra.



Figura 27: Amostras de minerais usadas na calibração mineralógica.

A tabela 4 mostra a composição química molecular de cada amostra de mineral analisada (Dana, 2008).

Tabela 4: Minerais e suas composições químicas moleculares.

Amostra	Composição
Quartzo	SiO_2
Coríndon	Al_2O_3
Albita	$\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$
Howlita	$\text{Ca}_2\text{B}_5\text{SiO}_9(\text{OH})_5$
Hematita	Fe_2O_3
Apatita	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$
Fluorita	CaF_2
Calcita	CaCO_3

Uma terceira calibração, com minerais padrões, foi feita para tentar obter melhores resultados para aplicações na identificação mineralógica de rochas (fig.28).

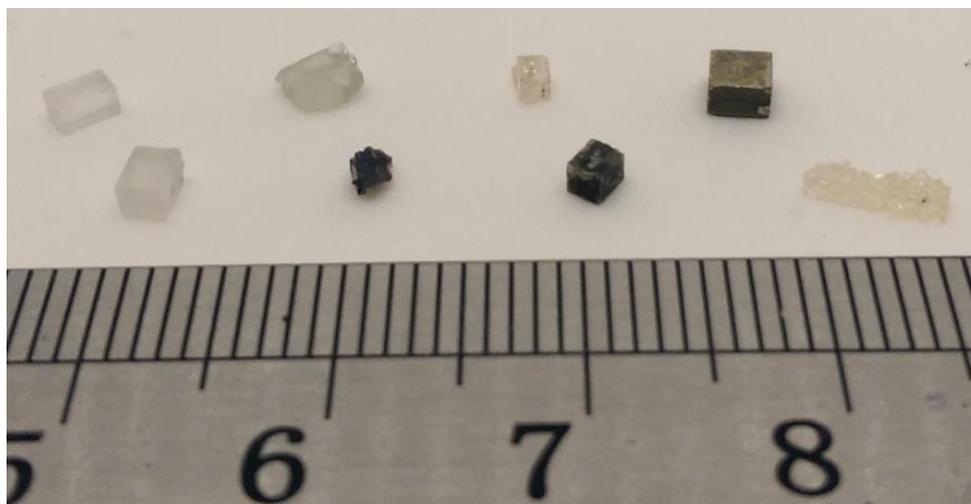


Figura 28: Minerais padrões

A tabela 5 mostra os minerais padrões adquiridos para a calibração. Importante mencionar que três amostras apresentaram problemas: biotita (agregado), pirita (alta densidade) e plagioclase (incrustações) e não puderam ser utilizadas para obter os dados dos coeficientes usados na dupla energia.

Tabela 5: Minerais padrões utilizados na calibração

Mineral	Composição
Hematita	Fe_2O_3
Biotita*	$\text{K}(\text{Mg},\text{Fe}^{++})_3\text{AlSi}_3\text{O}_{10}(\text{OH},\text{F})_2$
Pirita*	FeS_2
Orthoclase	KAlSi_3O_8
Quartzo	SiO_2
Calcita	CaCO_3
Fluorapatita	$\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$
Plagioclase*	$(\text{Na},\text{Ca})(\text{Si},\text{Al})_4\text{O}_8$

*não utilizadas

4.7. Processamento de imagem e dados

O software Matlab[®] (R2013a) é um ambiente computacional numérico, que permite manipulação de vetores e matrizes como fonte de dados, implementação de algoritmos, rotinas, funções e criação de interfaces com o usuário (McAndrew 2004). Possui interligação com linguagens computacionais mais conhecidas como C, C++, Java e Fortran, uma biblioteca vasta de caixas de ferramentas com funções pré-definidas para áreas específicas como processamento de imagem, e uma comunidade acadêmica que fornece diariamente novas funções e programas disponíveis gratuitamente, apesar do software Matlab[®] ser comercial.

A vantagem do uso do software Matlab[®] refere-se à facilidade de se trabalhar com variáveis e, por consequência, os dados que elas representam. Não há necessidade de pré-definir os tipos das variáveis, sejam numéricas ou textuais, e as operações podem ser feitas com conhecimento mínimo de operação de vetores e matrizes.

O software Matlab[®] foi utilizado para processar, simultaneamente, as imagens obtidas pela técnica de $\mu\text{CT-DE}$. As duas aquisições feitas em duas energias diferentes da mesma amostra devem ser processadas pelas equações da $\mu\text{CT-DE}$ para que duas imagens, uma relativa a distribuição da densidade no objeto e outra relativa a distribuição do número atômico do objeto, fossem geradas. Um código foi desenvolvido para efetuar estas operações comparando os valores de coeficiente de atenuação da imagem pixel por pixel.

Basicamente o código efetua as seguintes operações para cada par de imagens feitas:

- Leitura dos valores dos tons de cinza dos pixels das imagens tomográficas;
- Conversão dos valores de tons de cinza em valores de coeficiente de atenuação;
- Transformação e associação dos valores de um pixel para densidade e número atômico;
- Geração de imagens com escala de densidade e número atômico;

É necessário, para a transformação dos dados em densidade e número atômico, a calibração prévia do sistema, ou seja, a obtenção dos coeficientes α e β .

A identificação mineralógica é, por fim, uma questão de identificar, por uma biblioteca embutida no algoritmo, quais regiões, com pares densidade e número atômico efetivo, correspondem a qual mineral. Como o feixe é policromático e as imagens não são completamente livres de ruído e artefatos, é necessário, assim, associar um erro, ou faixa de valores aceitáveis, para segmentação. Esta não é uma escolha trivial, por isso é necessário obter a melhor imagem possível, seja por uma melhor aquisição ou reconstrução, e o uso de amostras de referência para calibração, para um ajuste correto do algoritmo.

Três amostras de rochas, F1, F3 e F7 (fig.29a-c) foram avaliadas a partir da calibração usando os minerais padrões e do código desenvolvido em MatLab, de forma qualitativa, para identificar as possibilidades da segmentação mineralógica.

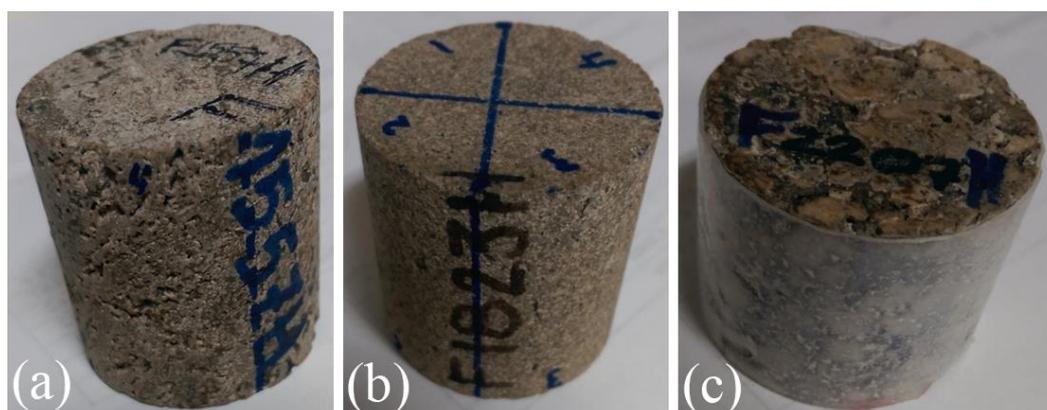


Figura 29: Amostras F1, F3 e F7 de rochas para análise qualitativa

V. Resultados

5.1. Simulação

Toda informação necessária para calibração do sistema pela técnica de μ CT-DE pode ser extraída dos dados teóricos, no caso, densidade, número atômico efetivo e coeficiente de atenuação encontrados nos gráficos ajustados. Fig. 30 e 31 mostram os gráficos com a melhor linha ajustada usando os dados da simulação, as variáveis da equação 38, o valor de qui-quadrado (χ^2), o qual mostra o quão adequado é o ajuste da linha aos dados, e o intervalo de 95% de confiança. Valores de χ^2 próximos a 1 (um) indicam uma concordância e correlação maior entre os dados e a linha ajustada. É possível ver, em ambos os gráficos, que todos os valores, incluindo seus erros associados, estão dentro do intervalo de confiança de 95% e que χ^2 encontra-se bem próximo a 1 em ambas energias, mostrando uma grande concordância de um comportamento linear da eq. 38, como era teoricamente esperado.

A tabela 6 e 7 mostram os parâmetros de calibração e os coeficientes α e β , obtidos para baixa e alta energia, extraídos da equação da linha ajustada no gráfico da simulação, comparado a eq.38.

A verificação da simulação e respectiva calibração foi feita usando três elementos aleatórios da tabela periódica, no caso, Vanádio (V), Potássio (K) e Sódio (Na). As tabelas 8 e 9 mostram os valores teóricos do coeficiente de atenuação nas energias de 100 e 150 kV, os valores teóricos de densidade e número atômico e os valores obtidos pela simulação para os elementos puros V, K e Na, e os minerais rutilo, diopsita e cuprita, usando as equações 39 e 40.

O desvio dos valores simulados em relação aos valores teóricos é menor que 5%, o que mostra boa concordância com a teoria e valida a metodologia usada no trabalho para calibrar o sistema microtomográfica pelo método da dupla energia.

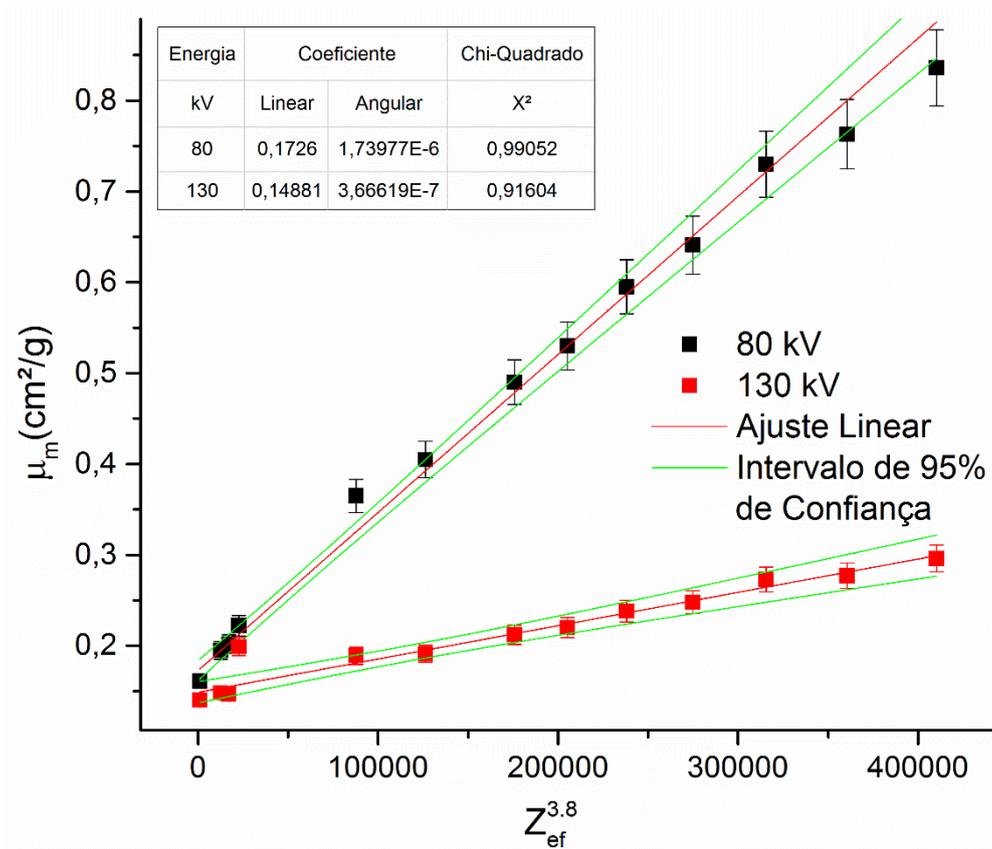


Figura 30: Gráfico de calibração para simulação por elementos homogêneos (puros).

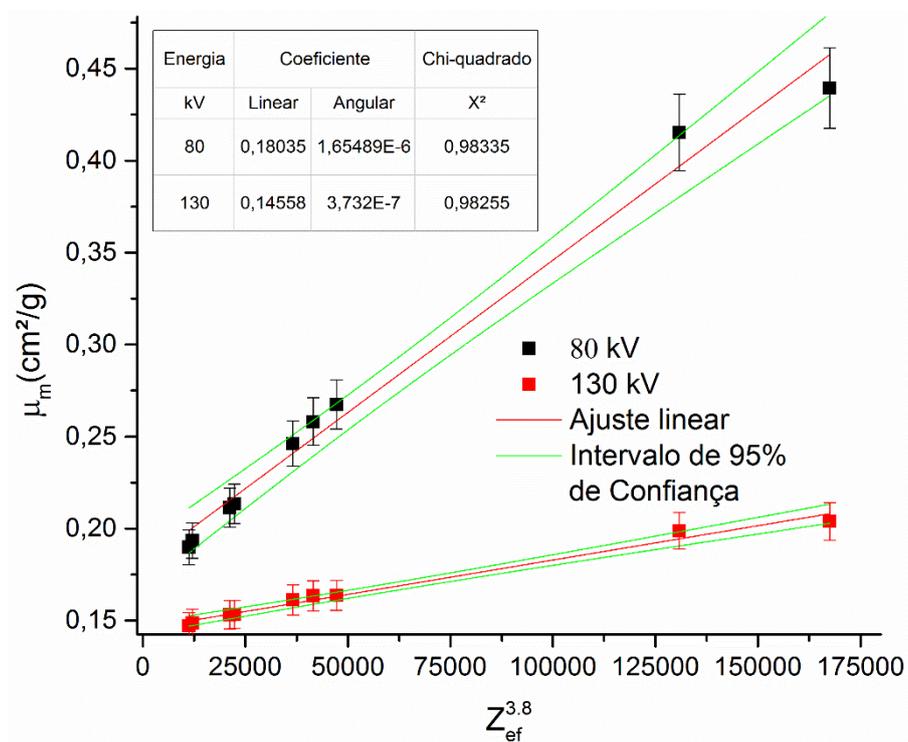


Figura 31: Gráfico para simulação por elementos heterogêneos (minerais).

Tabela 6: Coeficientes de calibração de elementos homogêneos para μ CT-DE.

Coeficientes	Valores
α_l	1.7260×10^{-1}
β_l	1.7398×10^{-6}
α_h	1.1488×10^{-1}
β_h	3.6662×10^{-7}

Tabela 7: Coeficientes de calibração de elementos heterogêneos para μ CT-DE.

Coeficientes	Valores
α_l	1.8035×10^{-1}
β_l	1.6549×10^{-6}
α_h	1.4558×10^{-1}
β_h	3.7320×10^{-7}

Tabela 8: Comparação de dados experimentais (ρ_{exp} , $Z_{ef,exp}$) e dados teóricos (ρ , Z_{ef}) para densidade e número atômico efetivo de V, K e Na.

Elementos	μ_l (cm^2/g)	μ_h (cm^2/g)	ρ (g/cm^3)	ρ_{exp} (g/cm^3)	Z_{ef}	$Z_{ef,exp}$
V	0.437	0.197	5.87	5.57	23	23.70
K	0.325	0.177	0.87	0.88	19	19.65
Na	0.179	0.141	1.8 - 2.7	1.78 - 2.65	15	15.20

Tabela 9: Comparação de dados experimentais (ρ_{exp} , $Z_{ef,exp}$) e dados teóricos (ρ , Z_{ef}) para densidade e número atômico efetivo dos minerais rutilo, diopsita e cuprita.

Mineral	Fórmula	μ_l (cm^2/g)	μ_h (cm^2/g)	ρ (g/cm^3)	ρ_{exp} (g/cm^3)	Z_{ef}	$Z_{ef,exp}$
Rutilo	TiO ₂	0.3101	0.1716	4.04	3.93	19.30	19.40
Diopsita	CaMg(Si ₂ O ₆)	0.2217	0.1553	3.39	3.41	14.33	14.36
Cuprita	CuO ₂	0.5637	0.2323	5.64	5.68	26.07	25.70

5.2. Energia efetiva

A tabela 10 mostra a energia máxima do sistema ($E_{m\acute{a}x}$), filtro metálico correspondente, valores tabelados do coeficiente de atenuação (μ_{ef}) para uma energia efetiva correspondente (E_{ef}) e um coeficiente de atenuação experimental (μ_{exp}) para comparação. Os coeficientes de atenuação efetivos foram comparados com os coeficientes de atenuação experimentais. É possível verificar que os valores possuem desvio menor que 10%, o que mostra uma boa aproximação com os valores esperados teoricamente para uma fonte de radiação policromática.

Fig. 32 mostra a melhor linha ajustada em relação aos dados teóricos e experimentais, o chi-quadrado (χ^2) e o intervalo de confiança de 95%. É possível verificar no gráfico que todos os valores, incluindo os erros associados, estão dentro do intervalo de confiança de 95% e o χ^2 encontra-se próximo de 1, mostrando uma boa concordância entre os valores teóricos e experimentais. Isto indica uma boa aproximação entre os dados obtidos pelo software e o valor esperado devido a filtragem do espectro para um valor específico de energia, e correspondente coeficiente de atenuação.

Tabela 10: Comparação de dados experimentais e teóricos para energia máxima e correspondente energia efetiva usadas.

Esfera de 99% de Al certificada				
E_{max} (keV)	Filtro (mm)	E_{ef} (keV)	μ_{ef} (cm ⁻¹)	μ_{exp} (cm ⁻¹)
80	1.0 Al	34	2.17	2.16
90	1.0 Al	35	1.98	1.96
100	0.25 Bronze	51	0.954	0.83
110	0.25 Bronze	54	0.858	0.75
120	0.50 Cu	62	0.710	0.66
130	0.50 Cu	66	0.670	0.61

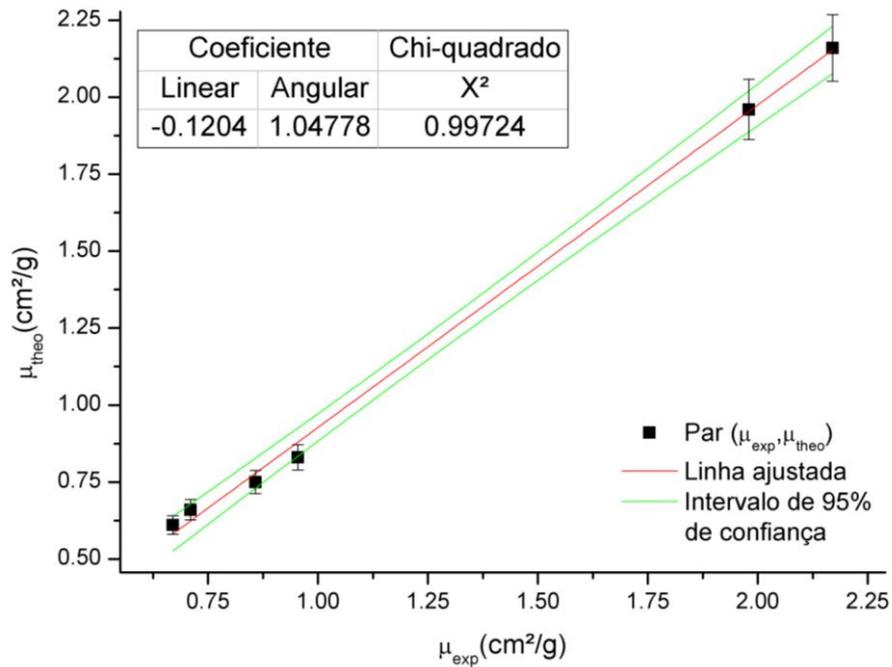


Figura 32: Gráfico comparando valores experimentais e teóricos para o coeficiente de atenuação referente a esfera de alumínio.

5.3. Calibração

Fig. 33 mostra a melhor linha ajustada para os materiais das barras, nas duas energias usadas, 80 e 130 kV. A tabela 11 mostra os resultados obtidos para densidade e número atômico efetivo para a amostra de dolomito.

Valores experimentais de densidade e número atômico efetivo mostraram uma boa aproximação com os valores teóricos. A distribuição de raios X detectados é governada pela distribuição de Poisson (Haight, 1967). Entretanto, para valores elevados de eventos, esta distribuição pode ser aproximada por uma distribuição Gaussiana (Krishnamoorthy, 2006). O erro, ou desvio padrão, para a distribuição Gaussiana permite verificar a confiabilidade das medidas distantes da média. Assim, um erro padrão garante 68.3% dos valores como confiáveis, e duas vezes o erro padrão garante 95.4% dos valores como confiáveis. Em estatística, aceita-se até duas vezes o erro padrão como região confiável para obtenção do valor correto.

Apesar do erro relativamente alto, os valores experimentais encontram-se dentro de uma faixa de duas vezes o erro padrão, o que ainda é um resultado aceitável. Um número menor de amostras para avaliação da calibração em uma primeira tentativa implica medidas com uma menor significância estatística e, por isso, um erro associado maior. A metodologia, já validada, sugere que usar um número maior de amostras pode melhorar o resultado experimental obtido e, portanto, diminuir o erro associado.

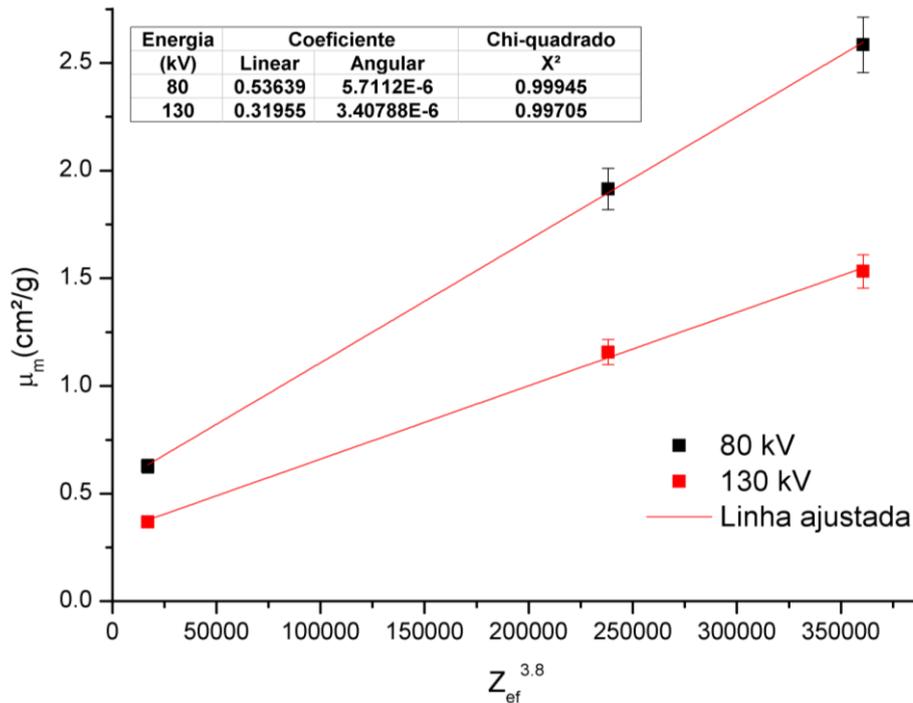


Figura 33: Gráfico de calibração para as barras.

Tabela 11: Valores experimentais para uma amostra de dolomite, obtidos através da μ CT-DE, comparados aos valores teóricos.

Parâmetros	Valores Teóricos	Valores experimentais
ρ (g/cm^3)	2.85	3.67 ± 0.60
Z_{ef}	13.70	14.40 ± 0.80

Fig. 34 mostra a melhor linha ajustada para os minerais usados, nas duas energias, 80 e 130 kV. A tabela 12 mostra os resultados obtidos para os valores de densidade e número atômico efetivo de uma amostra de albita.

Valores de densidade e número atômico efetivo mostram uma boa concordância entre eles. Um número maior de materiais de características conhecidas pode auxiliar na estatística de análise, diminuindo o erro em comparação aos dados obtidos.

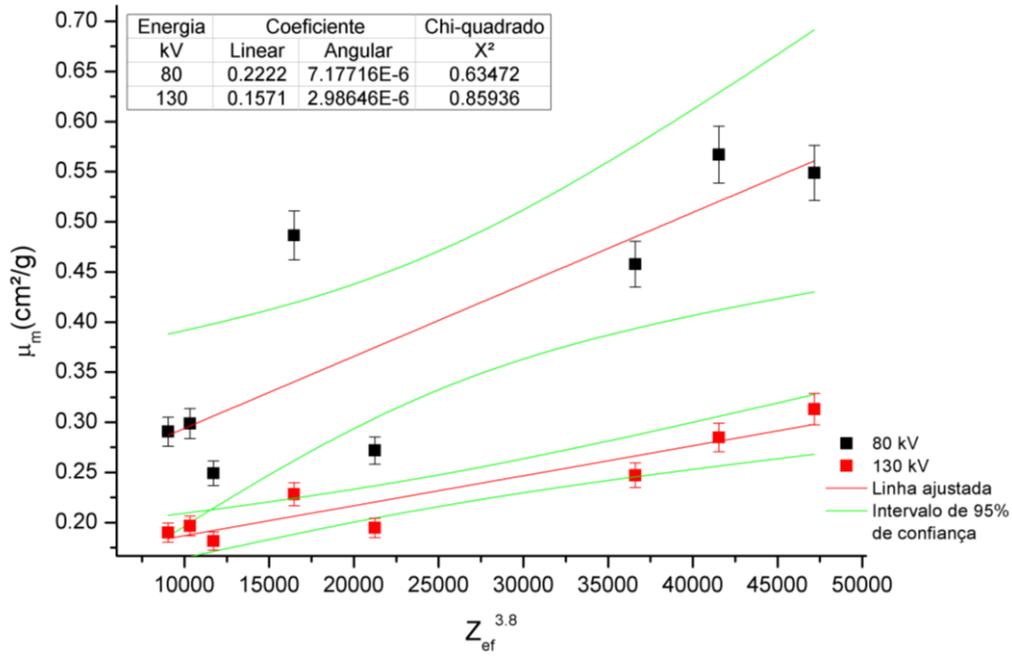


Figura 34: Gráfico para calibração pelas amostras de minerais.

Tabela 12: Valores experimentais para uma amostra de albita, obtidos através da μ CT-DE, comparados aos valores teóricos.

Parâmetros	Valores teóricos	Valores experimentais
ρ (g/cm^3)	2.60	3.26 ± 0.40
Z_{ef}	11.76	10.52 ± 0.60

Fig. 35 mostra a melhor linha ajustada para os minerais padrões usados, nas duas energias, 80 e 130 kV.

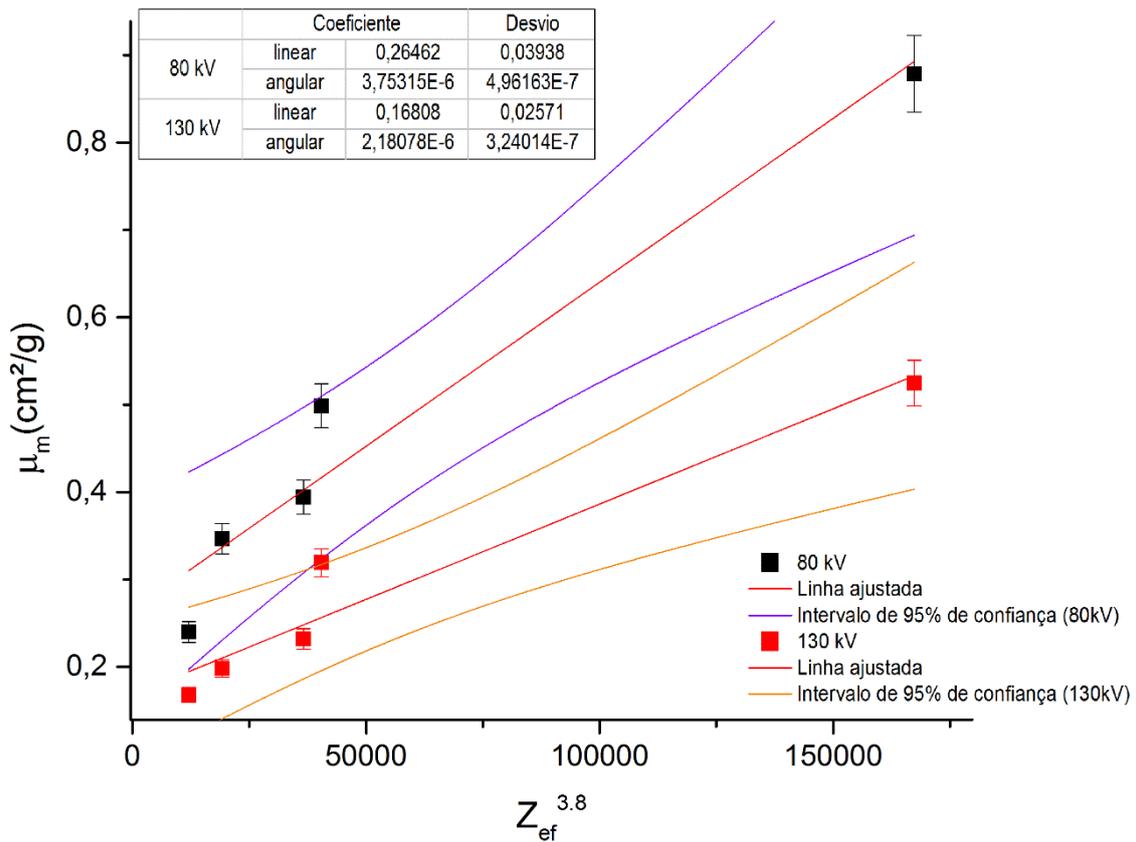


Figura 35: Gráfico para calibração pelas amostras de minerais padrões

5.4. Processamento de imagem e dados

5.4.1. Imagens em densidade e número atômico

Os resultados mostram a capacidade do código desenvolvido em separar as influências da densidade e número atômico em duas novas imagens, com escalas próprias. A partir da informação contida nos pixels das imagens originais de 80 e 130 kV, referentes ao coeficiente de atenuação, foi possível a obtenção das imagens de densidade (fig.36) e número atômico (Fig.37).

As figuras 36a e 37a mostram imagens em escala de densidade e número atômico efetivo de uma seção transversal da amostra de dolomito. As figuras 36b e 37b mostram imagens 3D da amostra toda. Ambas as imagens possuem uma escala de densidade e número atômico efetivo na região inferior, de acordo com as cores presentes nas imagens.

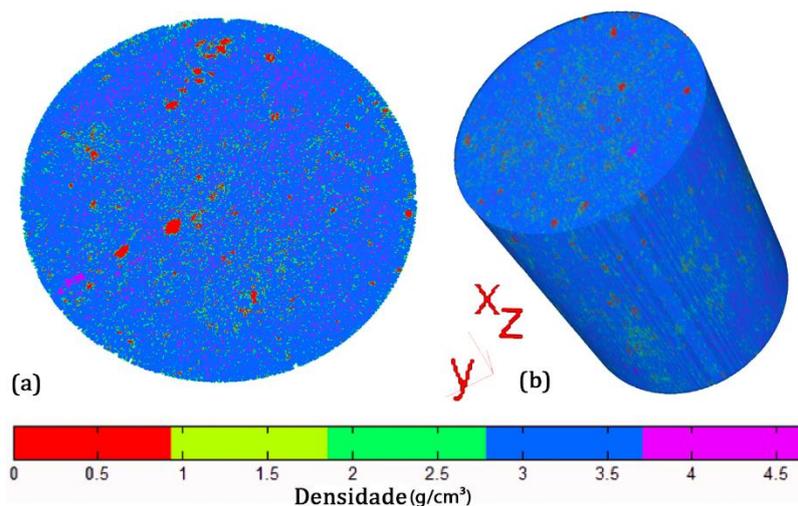


Figura 36: Imagem de densidade (a) 2D; (b) 3D

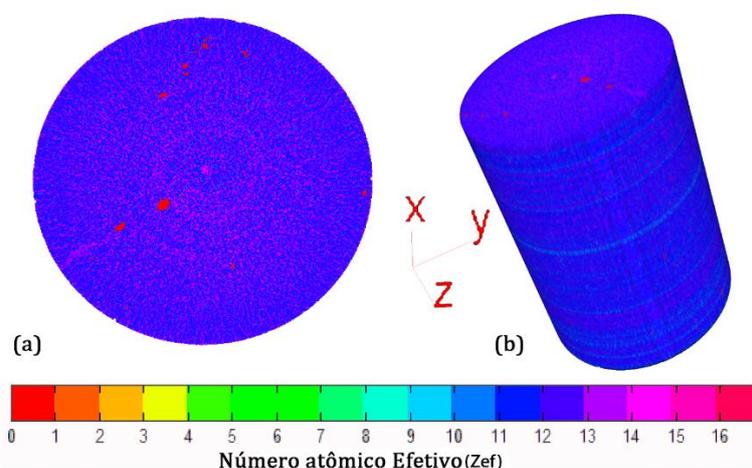


Figura 37: Imagem de número atômico efetivo (a) 2D; (b) 3D

É possível verificar que a faixa de cores da densidade estão muito próximos dos dados teóricos e experimentais. O número atômico efetivo mostra faixa de valores, de acordo com a faixa tonal, dentro do valor conhecido do mineral dolomita.

É necessário ter em mente que os materiais não são completamente homogêneos na sua distribuição, podendo apresentar impurezas, e há a natureza aleatória dos raios X, que acrescenta ruído e complica a obtenção de um correto valor de atenuação. A aquisição, reconstrução e o código de MatLab[®] ainda podem receber melhorias para minimizar o ruído final da imagem. De qualquer forma, os resultados mostram as grandes possibilidades para uma segmentação mineralógica.

5.4.2. Segmentação mineralógica

Resultados mostram a capacidade do código de segmentar a imagem em fases mineralógicas, como mostra a figura 38. Foram usadas três amostras de minerais para segmentação, no caso, fluorita, howlita e opala. É possível identificar na figura 38 a

separação feita pelo código identificando, corretamente, os diferentes minerais através de diferentes colorações definidas em escala.

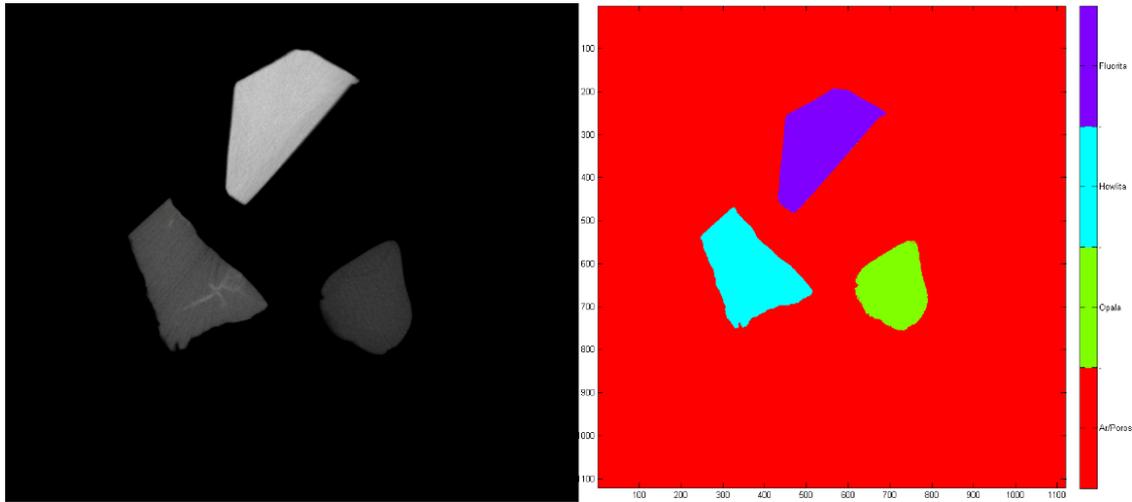


Figura 38: Segmentação mineralógica de uma imagem microtomográfica em uma imagem em escala de minerais.

5.4.3. Aplicações

As figuras 39, 40 e 41 mostram imagens das seções transversais (a) das amostras analisadas de forma qualitativa nas energias de 80 e 130 kV, juntamente com as imagens em escala de densidade (b), número atômico (c), mineralogia (d), histogramas de densidade (e) e número atômico (f) e distribuição 3D da mineralogia (g). Como a análise é feita de forma qualitativa, o histograma auxilia na verificação e separação pela presença de minerais diferentes.

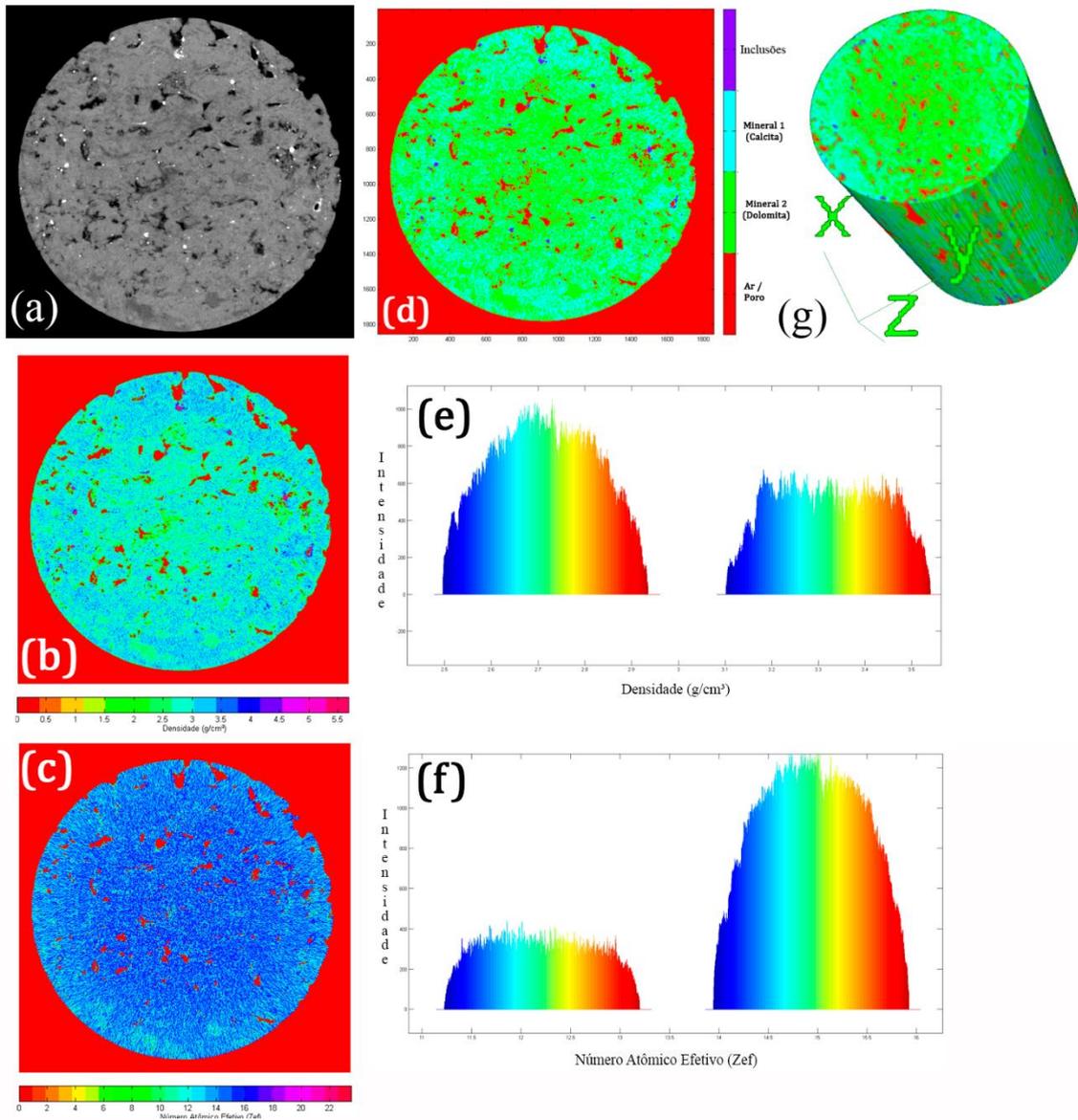


Figura 39: (a) seção transversal; imagens em (b) densidade, (c) número atômico e (d) mineralogia; histograma de (e) densidade e (f) número atômico; (g) imagem 3D de mineralogia da amostra F1.

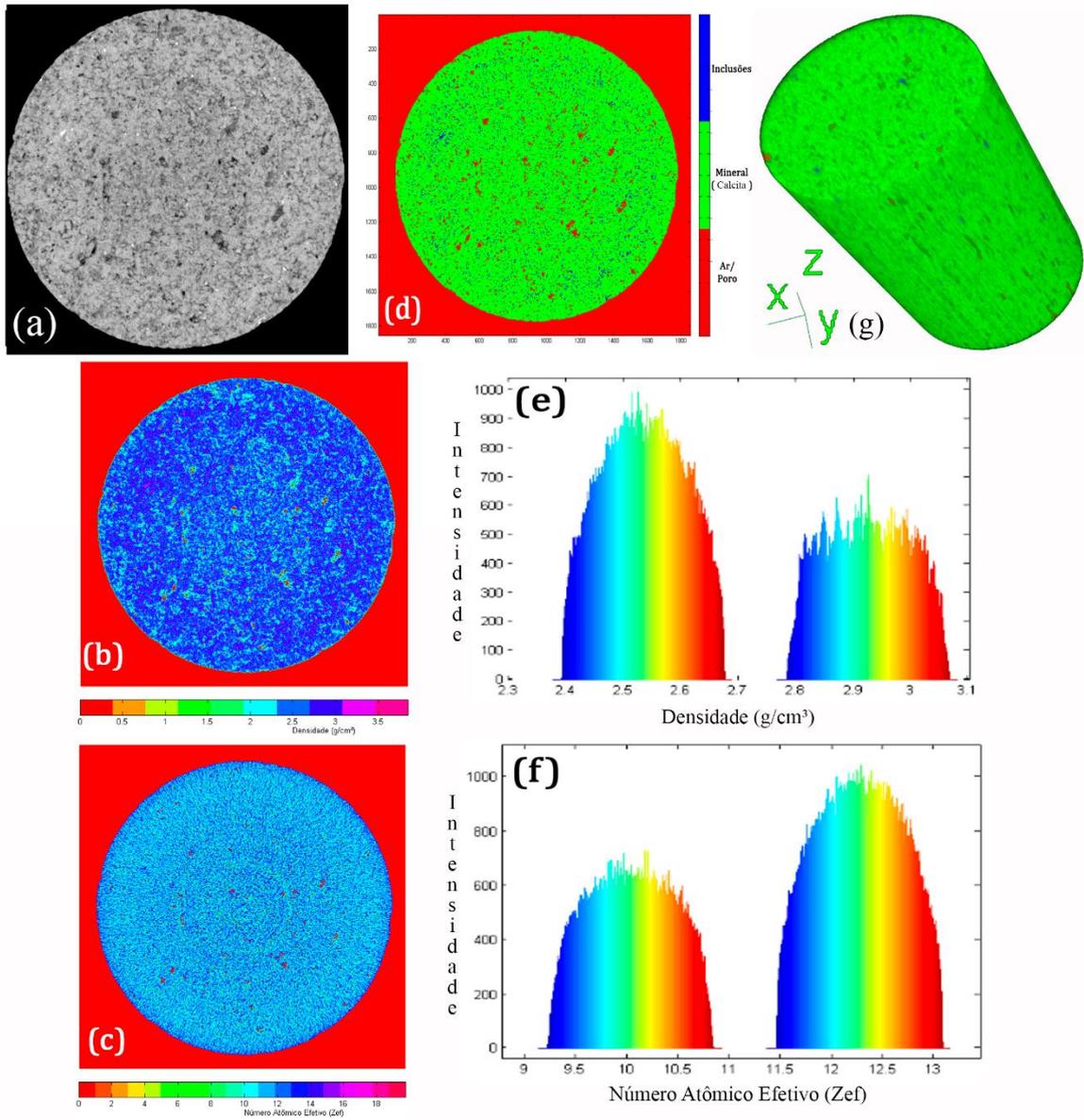


Figura 40: (a) seção transversal; imagens em (b) densidade, (c) número atômico e (d) mineralogia; histograma de (e) densidade e (f) número atômico; (g) imagem 3D de mineralogia da amostra F3.

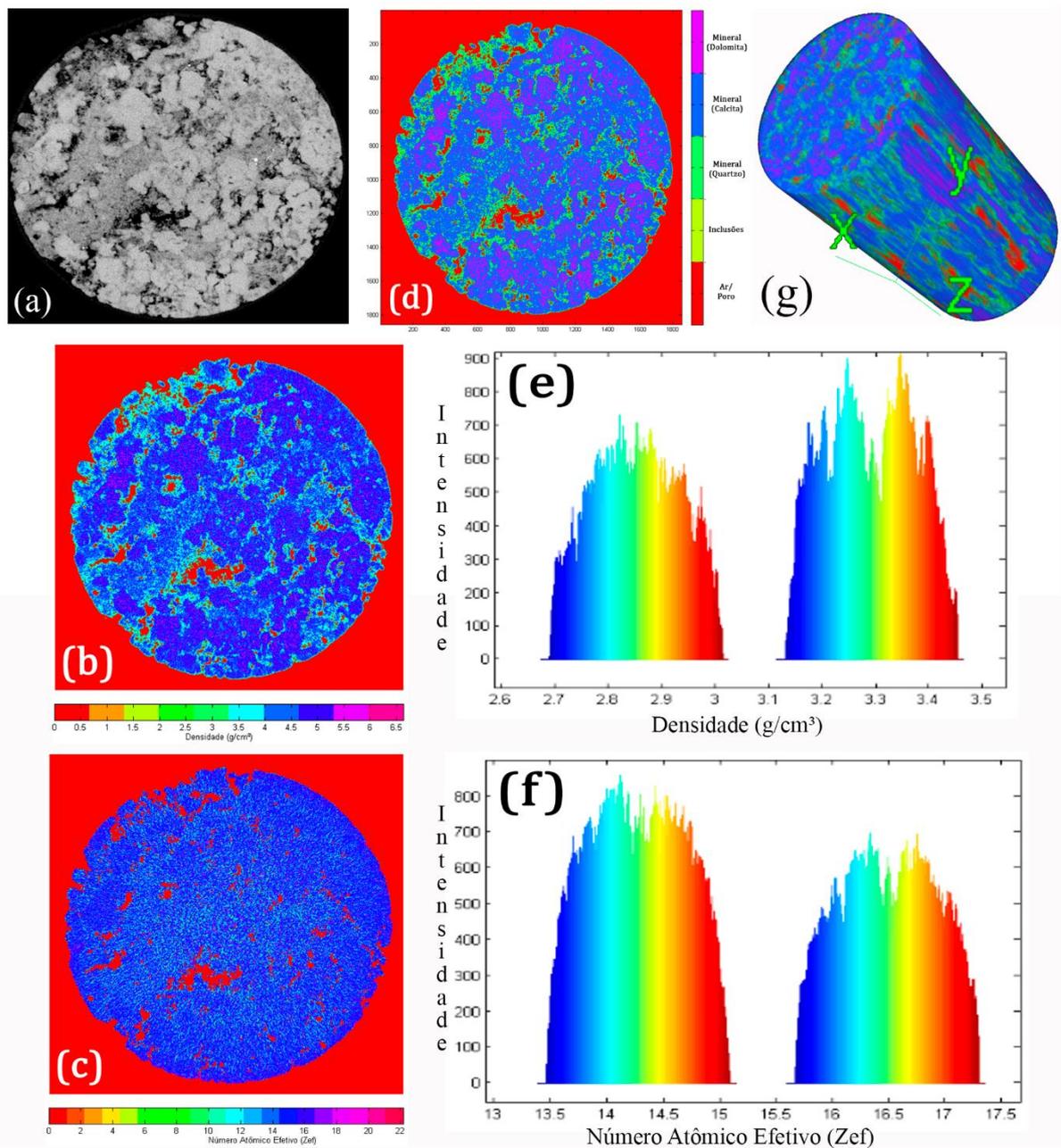


Figura 41: (a) seção transversal; imagens em (b) densidade, (c) número atômico e (d) mineralogia; histograma de (e) densidade e (f) número atômico; (g) imagem 3D de mineralogia da amostra F7.

As imagens mostram as possibilidades de uma identificação mineralógica de amostras de composição heterogênea, de forma qualitativa, através das informações obtidas das imagens de densidade e número atômico efetivo associadas aos histogramas de distribuição destes parâmetros.

Utilizando de correspondências dos dados de densidade e número atômico, são criados classificadores de acordo com os minerais identificados e, após a coincidência

destes dados, é gerada uma nova imagem identificando a distribuição, e presença, de minerais. Esta classificação só é possível após calibração do sistema e inclusão de uma biblioteca de identificação de minerais no código desenvolvido em Matlab®. Todo material não identificado pela biblioteca deve ser alocado como um classificador geral até o reconhecimento e atualização da biblioteca. Além disso, é necessário incluir um erro associado, ou faixa de valores, que adiciona a variabilidade dos dados de um mesmo material, associado aos erros da técnica e a própria natureza aleatória da radiação.

É necessário ressaltar que, apesar da capacidade de diferenciação do código, o erro associado, quando propagado pelas diversas etapas de aquisição, reconstrução, calibração e conversão, é considerável e pode gerar sobreposição de classificadores do código para os minerais, devido à resolução e proximidade dos valores de densidade e número atômico para os principais minerais em estudo.

VI. Conclusões

Os resultados da simulação identificam que a metodologia utilizada está de acordo com o esperado teoricamente, mostrando desvios dos dados simulados menores que 5% dos dados teóricos. A energia efetiva e o coeficiente de atenuação correspondente dado pelo software do sistema encontram-se em acordo, também, com os dados teóricos. Os valores experimentais encontram-se próximos daqueles tabelados, onde a primeira medida experimental possui um desvio maior do valor esperado devido ao número reduzido de materiais padrões. Um número menor de amostras para avaliação da calibração em uma primeira tentativa implica medidas com uma menor significância estatística e, por isso, um erro associado maior. Um número maior de materiais de características conhecidas pode auxiliar na estatística de análise, diminuindo o erro em comparação aos dados obtidos.

As imagens de densidade e número atômico efetivo, quando comparadas com os valores tabelados da amostra de dolomito, mostram que o código funciona. Uma análise qualitativa identifica um acordo dos valores tabelados com a amostra de dolomito considerando a escala de cores. É possível verificar ruído relacionado a natureza aleatória dos raios X, sua interação com a amostra e os valores flutuantes dos coeficientes de atenuação resultantes. O código desenvolvido em MatLab apresenta bons resultados de segmentação na reconstrução de imagens em densidade, número atômico e mineralogia.

A técnica de dupla energia é eficaz para identificação mineralógica, permitindo possibilidades para uma identificação tridimensional de densidade e número atômico efetivo diretamente em imagens microtomográficas calibradas.

Referências bibliográficas

- Ambrose, J. (1973). Computerized transverse axial scanning (tomography). Part II. Clinical Application. *British Journal of Radiology*, 46, pp. 1023-1047.
- Anderson, C. M., Carlos, R. A., Iara, F. M., *et al.* (2012). Effects of manual threshold setting on image analysis results of a sandstone sample structural characterization by X-ray microtomography. *Applied Radiation and Isotopes*, 70, pp. 937-941.
- Beckers, E., Plougonvenb, E., Roisinc, C., *et al.* (2014). X-ray microtomography: A porosity-based thresholding method to improve soil pore network characterization? *Geoderma*, 154, pp. 219-220.
- Bhuiyan, I. U., Mouzon, J., Forsberg, F., *et al.* (2013). Consideration of X-ray microtomography to quantitatively determine the size distribution of bubble cavities in iron ore pellets. *Powder Technology*, 233, pp. 312-318.
- Bielecki, J., Jarzyna, J., Bożek, S., *et al.* (2013). Computed microtomography and numerical study of porous rock samples. *Radiation Physics and Chemistry*, 56, pp. 59-66.
- Bonnin, A., Duvauchelle, P., Kaftandjian, V., *et al.* (2014). Concept of effective atomic number and effective mass density in dual-energy X-ray computed tomography. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 318, pp. 223-231.
- Buzug, M. (2008). *Computed Tomography From photon statistics to modern cone-beam CT* (1ª ed.). Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Carvalho, G., Pessoa, J., Assis, J. *et al.* (2010). Caracterização do concreto utilizando microtomografia por raios X e scanner comercial. *Anais do CNMAC*, 3, pp. 694-700.
- Cesareo, R. (2000). X-ray Physics: Interaction with matter, production, detection. *La Rivista del Nuovo Cimento della Società Italiana di Fisica*.
- Chantler, C., Olsen, K., Dragoset, R., *et al.* (2000). Detailed Tabulation of Atomic Form Factors, Photoelectric Absorption and Scattering Cross Section, and Mass Attenuation

Coefficients for $Z = 1-92$ from $E = 1-10$ eV to $E = 0.4-1.0$ MeV. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 29(4).

Cnudde, V., Boone, M. (2013). High-resolution X-ray computed tomography in geosciences: A review of the current technology and applications. *Earth-Science Reviews*, 123, pp. 1-17.

Cnudde, V., Cwirzen, A., Masschaele, B., *et al.* (2008). Porosity and microstructure characterization of building stones and concretes. *Engineering Geology*, 103, pp. 76-83.

Cormack, A. (1963). Representation of a function by its line integrals, with some radiological applications. *Journal of Applied Physics*, 34(9), pp. 2722-2727.

Cormack, A. (1964). Representation of a function by its line integrals, with some radiological applications. II. *Journal of Applied Physics*, 35(10), pp. 2908-2913.

Dana, J. D. (2008). *Manual of Mineralogy* (22^a ed.). Merchant Books.

Feldkamp, L., Davis, L., Kress, J. (1984). Practical cone beam algorithm. *J. Opt. Soc. Am. A*, 1(6), pp. 612-619.

Haight, Frank. A. (1967). *Handbook of the Poisson Distribution*, John Wiley & Sons.

Haili, L., Rudy, S., Anneleen, F., *et al.* (2009). 3D quantification of mineral components and porosity distribution in Westphalian C sandstone by microfocus X-ray computed tomography. *Sedimentary Geology*, 220, pp. 116-125.

Hao, J., Kang, K., Zhang, L., *et al.* (2013). A novel image optimization method for dual-energy computed tomography. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 722, pp. 34-42.

Hounsfield, G. (1973). Computerized transverse axial scanning (tomography). Part I. Description of a system. *British Journal of Radiology*, 46, p. 1016.

Iovea, M., Oaie, G., Ricman, C., *et al.* (2009). Dual-energy X-ray computer axial tomography and digital radiography investigation of cores and other objects of geological interest. *Engineering Geology*, 103, pp. 119-126.

- Jovanović, Z., Khan, F., Enzmann, *et al.* (2013). Simultaneous segmentation and beam-hardening correction in computed microtomography of rock cores. *Computer & Geosciences*, 56, pp. 142-150.
- Kalender, W. (2011). *Computed Tomography: Fundamentals, System Technology, Image Quality, Applications* (3^a ed.). Erlangen: Publicis Publishing.
- Ketcham, R., Carlson, W. (2001). Acquisition, optimization and interpretation of X-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences. *Computers and Geosciences*, 27, 381-400.
- Knoll, F. G. (2010). *Radiation Detection and Measurement* (4^a ed.). John Wiley and Sons.
- Krishnamoorthy, Kalimuthu (2006). *Handbook of Statistical Distributions with Applications*. Chapman & Hall/CRC.
- Machado, A., Lima, I., Lopes, R. (2014). Effect of 3d computed microtomography resolution on reservoir rocks. *Radiation Physics and Chemistry*, 95, pp. 405-407.
- Marins, J., Deus, G. D., Neves, A., *et al.* (2013). Assessing Accumulated Hard-Tissue Debris Using Micro-Computed Tomography and Free Software for Image Processing and Analysis. *Journal of Endodontics*. doi:10.1016/j.joen.2013.07.025
- McAndrew, A. (2004). An introduction to Digital Image Processing with Matlab. In *Notes for SCM2511 Image Processing 1*. Victoria University of Technology: School of Computer Sciences and Mathematics.
- Nachtrab, F., Weis, S., Keßling, P., *et al.* (2011). Quantitative material analysis by dual-energy computed tomography for industrial NDT applications. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 633, pp. s159-s162.
- Natterer, F. (2001). *The mathematics of computerized tomography* (1^a ed.). Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Neves, A., Coutinho, E., Cardoso, M., *et al.* (2010). Micro-CT based quantitative evaluation of caries excavation. *Dental Materials*, 26, pp. 579-588.
- Oliveira, L. (2002). *Tomografia computadorizada tridimensional por transmissão de raios-x na análise e caracterização de objetos volumétricos*. Tese* de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil:.

- Radon, J. (1917). On determination of functions from their integral values along certain manifolds. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 5(4), pp. 170-176.
- Reymesen, K., Swennen, R. (2008). Application of microfocus computed tomography in carbonate reservoir characterization: Possibilities and limitations. *Marine and Petroleum Geology*, 25, pp. 486-499.
- Rizescu, C., Besliu, C., Jipa, A. (2001). Determination of local density and effective atomic number by the dual-energy computerized tomography method with the ¹⁹²Ir radioisotope. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 465, pp. 584-599.
- Röntgen, W. (1895). Eine Neue Art von Strahlen (On a new kind of Rays). *Physikalisch-medicinischen Gesellschaft of Würzburg*.
- Sanjoy, M., Hagadorn, J. W., Thelen, W. A., *et al.* (2013). Quantitative discrimination between geological materials with variable density contrast by high resolution X-ray computed tomography: An example using amygdule size-distribution in ancient lava flows. *Computer & Geosciences*, 54, pp. 231-238.
- Sherley, D. (1985). *Optical Mineralogy* (2^a ed.). New Zealand: University of Canterbury.
- Skyscan (2014). Disponível em: <www.skyscan.be> Acesso em: 16 nov. 2014, 12:30:00.
- Torikoshi, M., Tsunoo, T., Ohno, Y., *et al.* (2005). Features of dual-energy X-ray computed tomography. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 548, pp. 99-105.
- Tsuchiyama, A., Nakano, T., Uesugi, K., *et al.* (2013). Analytical dual-energy microtomography: A new method for obtaining three-dimensional mineral phase images and its application to Hayabusa samples. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 116, pp. 5-16.
- Van Geet, M., Swennen, R., Wevers, M. (2000). Quantitative analysis of reservoir rocks by microfocus X-ray computerised tomography. *Sedimentary Geology*, 132, pp. 25-36.
- Van Geet, M., Swennen, R., Wevers, M. (2001). Towards 3-D petrography: application of microfocus computer tomography in geological science. *Computers & Geosciences*, 27, pp. 1091-1099.

Xiao, S., Bresler, Y., David, C. M. (2003). Fast Feldkamp algorithm for cone-beam computer tomography. *International Conference on Image Processing (ICIP)*, 3, pp. 819-822.

Zabler, S., A., Rack, I., Manke, *et al.* (2008). High-resolution tomography of cracks, voids and micro-structure in greywacke and limestone. *Journal of Structural Geology*, 30, pp. 876-887.

Zoran, J., Faisal, K., Frieder, E., *et al.* (2013). Simultaneous segmentation and beam-hardening correction in computed microtomography of rock cores. *Computers & Geosciences*, 56, pp. 142-150.

Anexo A

Código Matlab

```
close all; clear all; clc;
%Número de imagens totais do stack de imagens (N)
N = ;
s = cell(N,1);
f = cell(N,1);
%Número de imagem de inicialização (n)
n=;
for d = 1:N
%Inicia nome base
base_namel = '.bmp';
base_nameh = '.bmp';
%Com o nome base, salva todos os nomes necessários, que serão
%utilizados posteriormente para chamar todas as imagens
tmp_strl = num2str(n+d-1);
L = length(tmp_strl);
base_namel(12-L:11) = tmp_strl;
s{d} = base_namel;
tmp_strh = num2str(n+d-1);
J = length(tmp_strh);
base_nameh(12-J:11) = tmp_strh;
f{d} = base_nameh;
%le a imagem original
[itcl,ma] = imread(s{d});
[itc,ma] = imread(f{d});
%le o tamanho da matriz de pixels da imagem original
xl=size(itcl,1);
yl=size(itcl,2);
xh=size(itc,1);
yh=size(itc,2);
%valor máximo e mínimo do coeficiente de atenuação da imagem
uminl=;
```

```

umaxl=;
uminh=;
umaxh=;
% valores do coeficiente angular e linear
alphal=;
alphah=;
betal=;
betah=;
% calcula os valores de coeficiente de atenuação
for i=1:xh
for j=1:yh
icah(i,j)=10*(2*pi*(((umaxh-uminh)*double(itch(i,j))/255)+uminh));
ical(i,j)=10*(2*pi*(((umaxl-uminl)*double(itcl(i,j))/255)+uminl));
% calcula o valor da densidade e número atômico efetivo
rho(i,j) = (((betah*ical(i,j))-(betal*icah(i,j)))/...
((betah*alphal)-(betal*alphah)));
zef(i,j) = power(abs(((alphal*icah(i,j))-(alphah*ical(i,j)))/...
((betah*ical(i,j))-(betal*icah(i,j))))) ,1/3.8);
end;
end;
% mostra imagem em escala de densidade e número atômico efetivo
% coloca legenda da barra de cor
% salva imagem
deltarho=rhomin-rhomin;
deltazef=zefmax-zefmin;
maprhoHSV = hsv(ceil(deltarho));
mapzefHSV = hsv(ceil(deltazef));
scrsz = get(0,'ScreenSize');
figure('OuterPosition',[scrsz(4)/2 scrsz(4)/7 scrsz(3)/2 scrsz(4)/1.2]);
imshow(rho, []);
colormap(hsv(ceil()));
cbh = colorbar('location', 'SouthOutside');
set(cbh, 'Units', 'normal', 'Xtick', rhomin::ceil(rhomin));
text(1.5, -1, 'Density (g/cm³)', 'Parent', cbh);

```

```

F = getframe(gcf);
[G,Map]=frame2im(F);
r = sprintf('.bmp',d);
imwrite(G,maprhohsv,r,'bmp')
close

scrsz = get(0,'ScreenSize');
figure('OuterPosition',[scrsz(4)/2 scrsz(4)/7 scrsz(3)/2 scrsz(4)/1.2]);
imshow(zef, []);
colormap(hsv(ceil())));
cbh = colorbar('location', 'SouthOutside');
set(cbh, 'Units', 'normal', 'Xtick',zefmin::ceil(zefmax));
text(10, -1, 'Effective Atomic Number (Zef)', 'Parent', cbh);
Z = getframe(gcf);
[L,Map]=frame2im(Z);
r = sprintf('.bmp',d);
imwrite(L,mapzefhsv,r,'bmp')
close
end

```

Anexo B

Artigos Publicados

Author's personal copy

Applied Radiation and Isotopes 89 (2014) 6–12



Contents lists available at ScienceDirect
Applied Radiation and Isotopes
journal homepage: www.elsevier.com/locate/apradiso



Methodology for attainment of density and effective atomic number through dual energy technique using microtomographic images



H. Alves^{*,1}, I. Lima¹, R.T. Lopes¹

Nuclear Engineering Program, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

HIGHLIGHTS

- Dual energy technique is promising for identification of distribution of minerals.
- A feasible methodology of dual energy in analysis of tomographic images was sought.
- The dual energy technique is efficient for density and atomic number identification.
- Simulation showed that the proposed methodology agrees with theoretical data.
- Nondestructive characterization of distribution of density and chemical composition.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 22 August 2013
Received in revised form
2 January 2014
Accepted 23 January 2014
Available online 4 February 2014

Keywords:

Dual energy
Microtomography
Mineralogy
Effective atomic number
Density

ABSTRACT

Dual energy technique for computerized microtomography shows itself as a promising method for identification of mineralogy on geological samples of heterogeneous composition. It can also assist with differentiating very similar objects regarding the attenuation coefficient, which are usually not separable during image processing and analysis of microtomographic data. Therefore, the development of a feasible and applicable methodology of dual energy in the analysis of microtomographic images was sought.

© 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

The combination of chemical composition and density from a sample yields the attenuation coefficient. This condition is a challenge in understanding the distribution of heterogeneous composition, throughout geological samples, in microtomographic images, because it does not establish, per se, if observed variations of color in grayscale images are due to differences in density, chemical composition, or some combination of the two. Still, if contributions of density and chemical composition can be resolved, a powerful tool for nondestructive characterization of the internal distribution of density and chemical composition of any sample will be achieved.

One problem is that the density and chemical composition are not attainable for any microtomographic system through conventional methods since there is not, a priori, a sole combination of those parameters for specific energies or energy spectra, i.e., a range of energies. This problem, however, can be solved using data obtained from two distinct X-ray spectra, i.e., two different ranges of energies, hence the use of the dual energy computed microtomography technique (μ CT-DE) (Tsuchiyama et al., 2013).

The application of μ CT-DE technique is usually based in the ascertainment of the relative contributions of photoelectric absorption and Compton scattering in the total attenuation coefficient (Eq. 1) (Remeyen and Swennen, 2008):

$$\mu_{m(E)} = \mu_{l(E)}/\rho = \alpha_{(E)} + \beta_{(E)}Z_{ef}^{3.8} \quad (1)$$

where μ_m is the mass attenuation coefficient and μ_l is the linear attenuation coefficient.

The α and β constants are energy dependent, i.e., they change according to the interaction of the X-rays when passing through the sample. Since it is a polychromatic source, the resulting mean

* Corresponding author.

E-mail addresses: haimon.dlafis@gmail.com (H. Alves), ricardo@ln.ufrj.br (R.T. Lopes).

¹ Tel.: +55 21 2562 7311.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.apradiso.2014.01.018>
0969-8043 © 2014 Elsevier Ltd. All rights reserved.

energy will change according to the sample and, likewise, the α and β variables. Therefore this relationship is better represented by a monochromatic X-ray, although it can be extended to polychromatic X-rays by means, e.g., of mean energy, or effective energy.

μ CT-DE technique allows the obtainment of two or more linear equations, for each chosen energy, so that through, e.g., the mathematical method of linear regression, the linear and angular constants α and β , respectively, of a linear equation of the form $y = \beta x + \alpha$ can be attained.

All of this data enables a calibration of a microtomographic system, i.e., to find meaningful and standard information regarding the objective of the technique, which is density and effective atomic number. Any sample tomographed under the same conditions of acquisition, except the two chosen energies of the X-ray source, can be studied for further knowledge of its density and effective atomic number (Van Geet et al., 2000) by the following equations:

$$\rho = \frac{\beta_h \mu_l - \beta_l \mu_h}{\beta_h \alpha_l - \beta_l \alpha_h} \quad (2)$$

$$Z_{ef} = \sqrt[3.8]{\frac{\alpha_l \mu_h - \alpha_h \mu_l}{\beta_h \mu_l - \beta_l \mu_h}} \quad (3)$$

where ρ is the density of the analyzed material or sample; β_l and β_h are angular constants for low and high chosen energies, respectively; α_l and α_h are linear constants for low and high chosen energies, respectively; μ_l and μ_h are the linear attenuation coefficients for low and high chosen energies, respectively.

Z_{ef} is the effective atomic number of the analyzed material or sample, defined by:

$$Z_{ef} = \left(\sum_i^N f_i Z_i^{3.8} \right)^{1/3.8} \quad (4)$$

where f_i is the molecular percentage of the element found in the sample.

The objective of this work was to develop and implement a methodology to calibrate a μ CT system into a μ CT-DE system. Its applications allow distinguishing small variations in chemical composition and density, which cannot be observed in a conventional grayscale tomographic image. It can also be used to obtain the effective atomic number and density of any sample of unknown composition and, eventually, separate images by mineral composition.

2. Methodology

The methodology was divided in three main steps: the validation of the proposed methodology of μ CT-DE technique through a simulation using tabulated theoretical values of density, atomic number and attenuation coefficients for chemical elements of the periodic table (Cesareo, 2000; Chantler et al., 1995); the evaluation of the X-ray tube spectrum regarding its effective energy by interaction on a certified aluminum sphere; and the application of the methodology for calibration of the system using geological samples and minerals of known effective atomic number and density.

The microtomographic system used in this work to study the dual energy technique was the microtomograph, 1173 model, from Skyscan-Bruker®. This system consists of: an X-ray tube of tungsten (W) anode with maximum capacity of operation on 130 kV tension and 8 W power; a flat-panel detector of 2240 × 2240 pixels in its matrix; minimum focal spot size of 5 μ m; maximum resolution of 10 μ m; and a micropositioning stage, in XYZ direction, for samples.

Table 1
Acquisition parameters.

Parameters	Values
Tension (kV)	80/130
Current (μ A)	100/61
Matrix (pixels)	2240 × 2240
Pixel size (μ m)	10
Angular step (deg)	0.5
Number of frames	5
Filter (mm)	0.15 / 0.50 Cu

Table 1 shows acquisition parameters used in the study and implementation of the methodology of μ CT-DE.

The energy of the system is related to the capacity of the X-ray to pass through a sample. Higher energies are able to go through denser objects, as lower energies are able to go through less dense objects. It is of much importance to choose an adequate energy for each studied sample, since it will affect the contrast and quality of the final image. The current is proportional to the number of photons, or X-rays, which exit the X-ray source towards the sample and the detector. A higher current helps in statistical data of the incident radiation, but it can also increase noise on the final image due to scattering. The detector matrix is connected to the image quality and resolution. A higher matrix allows for more detailed information, i.e., higher resolution on the final image of the sample. The pixel size is directly connected to the spatial resolution of the system. It represents the ability to solve and differentiate all objects on an image, i.e., the smallest structure, if it is an object, or the smallest separation between objects, if it is a void, that can be recognized in the image. The angular step is the angle between each acquired projection. The number of frames refers to the number of images taken to compose the final projection image, as to raise the signal to noise ratio and, hence, improve the final image quality. The physical and metallic filters are used to absorb and attenuate the lower energy photons, increasing the effective energy of the X-ray spectrum, and reducing the intensity of undesirable effects in the final image such as beam-hardening (Jovanović et al., 2013).

2.1. Simulation

The proof and validation of the μ CT-DE technique was made using tabulated attenuation coefficients for pure, chemical elements of known effective atomic number and density from the periodic table, for two chosen energies (Cesareo, 2000). α and β , from Eq. (1), were obtained through linear regression of the mass attenuation coefficient and atomic number of the pure elements. The choice of which energies to use to verify the methodology through simulation is irrelevant, since the methodology is expected to work with any two different energies, provided that the energies and all acquisition parameters remain constant, aside from the minimum and maximum values of attenuation coefficients during reconstruction procedure. Therefore, this step was made with 100 and 150 kV energies.

Table 2 shows all pure chemical elements used for the simulation of dual energy technique, as well as its calibration parameters, such as density, atomic number and attenuation coefficient. The elements used in this calibration are the ones that are most commonly found on minerals and geological samples.

The use of random elements from the periodic table allows evaluation of the simulated calibration, to ensure the methodology works with any choice of pure elements. In this case, the elements used to validate the proposed simulation were vanadium (V), potassium (K) and sodium (Na). It is important to warn that it was noticed that the dual energy technique does not give reliable

Table 2
Chemical elements and parameters for simulation.

Element	ρ (g/cm ³)	μ_l (cm ² /g)	μ_n (cm ² /g)	Z_{ef}
C	2.25	0.151	0.135	6
Mg	1.74	0.169	0.139	12
Al	2.70	0.170	0.140	13
Si	2.42	0.184	0.145	14
Ca	1.55	0.257	0.167	20
Ti	4.50	0.272	0.165	22
Cr	7.14	0.317	0.179	24
Mn	7.30	0.337	0.184	25
Fe	7.86	0.372	0.196	26
Co	8.71	0.395	0.202	27
Ni	8.80	0.440	0.221	28
Cu	8.93	0.458	0.222	29
Zn	6.92	0.497	0.234	30

results for elements that are found in nature in gaseous form, probably due to its low density and instability. Although an important detail, it does not invalidate the proposed methodology, since the analyzed samples are found in solid form.

2.2. Effective energy

The basic equation of dual energy (Eq. 1) refers to a monoenergetic radiation beam, i.e., X-rays arising from the X-ray tube with a unique energy. However, the X-ray tube spectrum is polienegetic and, as such, the attenuation coefficient, which is energy dependent, changes according to the energy of the incident radiation, as well as the α and β constants. In other words, the required coefficients for the calibration procedure are sensitive to variations of energy and, in this case, of all peaks of energies from the polienegetic spectrum. Strictly speaking, it would be necessary to have the knowledge of the X-ray tube spectrum to obtain the mean energy, or effective energy (Fig. 1). The microtomograph system used in this work, however, is not open, i.e., it cannot be accessed when the X-ray source is on, because of internal security switches. It is not possible then to acquire an X-ray spectrum of the X-ray source.

Some alternatives were proposed for some kind of approximation of the effective energy. A monoenergetic spectrum enables a simpler task about the attainment of the coefficients. Using this reasoning, it is interesting to monochromatize the X-ray tube spectrum, i.e., filtering the low energies and making the polienegetic spectrum more close to a monoenergetic spectrum.

One way to monochromatize an X-ray beam is using physical metallic filters, which removes the X-rays of lower energies, altering the effective energy of the beam and, therefore, the attenuation coefficient for each sample. The physical metallic filters eliminate the lower energies, decreasing scattering and beam-hardening effects of radiation. It is necessary, however, to evaluate how thick the filter must be, as to not lead to a loss of information and image quality due to reduced intensity of the incident photons. Physical metallic filters of 0.15 and 0.50 mm thickness of copper (Cu) were used for 80 and 130 kV acquisitions, respectively, for all samples, as to maintain the effective energy of the spectrum the same in each acquisition. The filters had 3×3 cm² of area, which effectively covers the output of the X-rays from the X-ray source. Filters of Cu are most commonly used for higher energies, and they show better attenuation of lower energies with smaller thickness, compared to other common filters, like Al and brass.

The knowledge of the X-ray tube spectrum allows the evaluation of the effective energy of the X-ray tube. It was used in the reconstruction and quantification programs of the

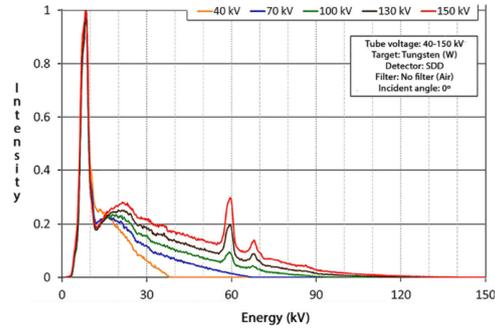


Fig. 1. Output spectrum of an X-ray tube, in similar conditions as the ones used in this study.

microtomograph, NRecon[®] (v. 1.6.9.3) and CTan[®] (v. 1.13.2.1), which provided a grayscale image with values of the attenuation coefficients. A certificated aluminum (Al) sphere of 99% pureness (Fig. 2) of (1.00 ± 0.01) cm of diameter was used in this study to verify and compare the theoretical attenuation coefficient values with the experimental data, which provides information on the X-ray tube spectrum and its effective energy. Fig. 2d and e shows the homogeneity of the Al sphere, with an almost constant histogram (Fig. 2d) and no pores or voids (Fig. 2e). Fig. 2f shows the value of attenuation coefficient given by CTan[®] (v. 1.13.2.1), calculated in the volume of interest defined by the user (Fig. 2c).

2.3. Calibration

Calibration for the μ CT-DE technique was made using samples of pure elements, which have a tabulated density and an effective atomic number.

The first evaluation was made using three thin rods of the elements aluminum (Al), iron (Fe), and copper (Cu). Those rods were tied to a cylinder shaped acrylic support, to avoid movement and facilitate positioning (Fig. 3a). Fig. 3b and c shows a slice of a tomography from the thin rods, acquired at 80 and 130 kV respectively.

The coefficients α and β , for both energies, can be obtained through the linear regression, which gives the best fitting for interpolating all data in a graph. Then it is possible to compare the fitted curve to the theoretical equation (Eq. 1) that gives information about attenuation coefficients. Finally, obtaining all necessary parameters, Eqs. (2) and (3) express all meaningful information, i.e., the ability to calculate density, ρ , and effective atomic number, Z_{ef} from any tomographed sample, under the same experimental conditions.

A microtomography of a dolomite sample (Fig. 4a) was done using the same conditions of tension, current and physical filters for each of the two energies: 80 and 130 kV. Fig. 4b shows a cross section from the dolomite sample. The region of interest, to allow quantification of the attenuation coefficient, is more difficult to be defined in this sample, since it has some denser components than the matrix. It has to be chosen properly, avoiding regions of greater variations of color on the image.

After the first evaluation using the thin rods and the dolomite sample, a second one was made, in order to improve accuracy and precision with an increased number of samples, to make a better fitting. Minerals of different compositions were used in the second attempt of calibration.

Eight samples of known minerals (Fig. 5) were used: albite, apatite, calcite, corundum, fluorite, howlite, quartz and hematite.

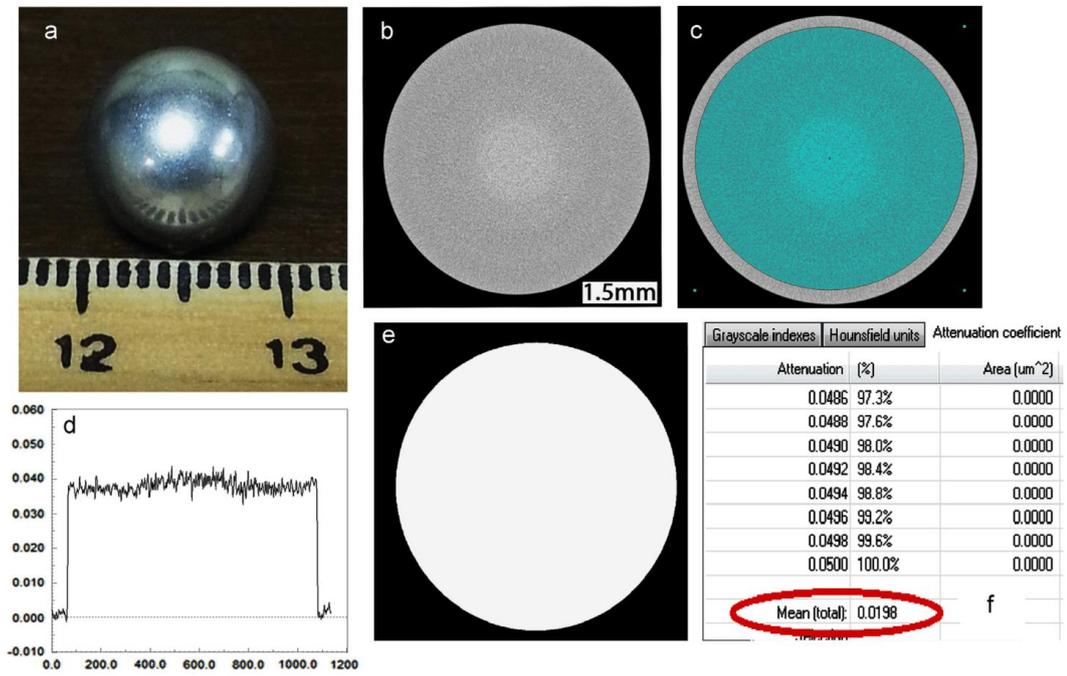


Fig. 2. (a) Certified aluminum sphere of 99% purity; (b) a tomography cross section; (c) defined region of interest for calculating the attenuation coefficient; (d) histogram of distribution of the attenuation coefficient throughout the sample; (e) segmented image; and (f) mean attenuation coefficient.

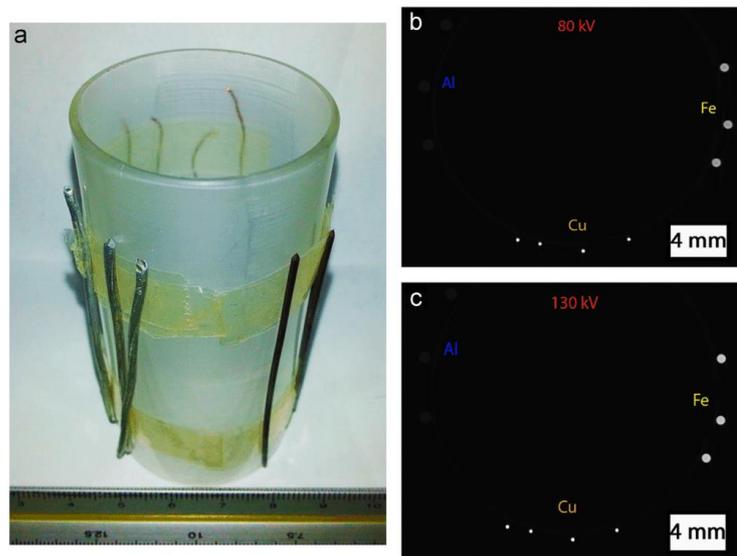


Fig. 3. (a) Thin rods of Al, Fe and Cu tied to a cylinder; (b) cross section of 80 kV reconstruction; and (c) cross section of 130 kV reconstruction.

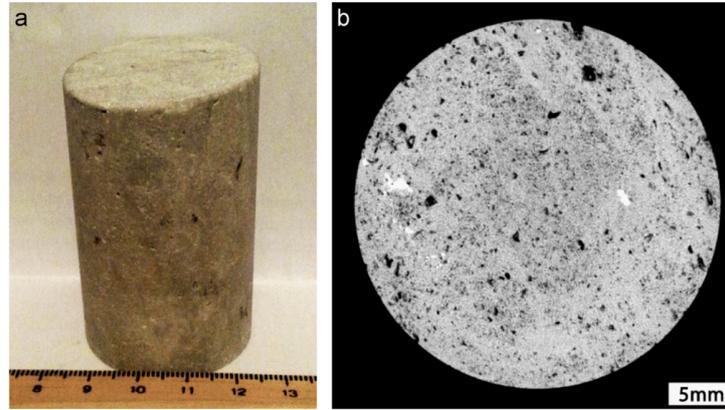


Fig. 4. (a) Dolomite sample and (b) cross section of a tomography of the dolomite sample.



Fig. 5. Minerals used for the second calibration of heterogeneous materials.

Table 3
Minerals and its molecular chemical composition.

Sample	Composition
Quartz	SiO ₂
Corundum	Al ₂ O ₃
Albite	NaAlSi ₃ O ₈
Howlite	Ca ₂ B ₅ SiO ₉ (OH) ₅
Hematite	Fe ₂ O ₃
Apatite	Ca ₅ (PO ₄) ₃ F
Fluorite	CaF ₂
Calcite	CaCO ₃

The albite sample was used as a reference material to verify the new calibration (Dana, 2008). Since the minerals were of homogeneous composition, the region of interest for quantification of the attenuation coefficient can fill the whole sample.

Table 3 shows the molecular chemical composition of each mineral sample used.

3. Results

3.1. Simulation

All required information for the μ CT-DE system calibration can be extracted from the theoretical data, i.e., the density, attenuation coefficients and effective atomic number given into the calibrated

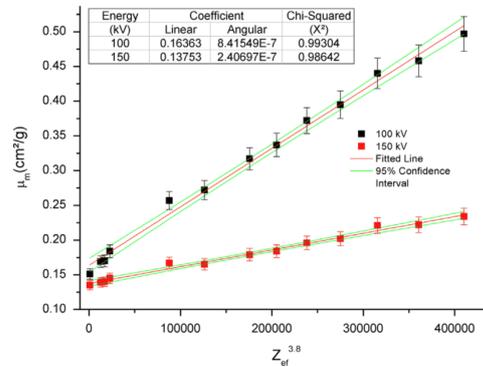


Fig. 6. Graph with adjusted simulation data.

graphs. Fig. 6 shows the best fitted straight line to the simulation data, its equation and constants, the chi-square (χ^2), which shows how well adjusted the line is, and the 95% confidence interval. Values of χ^2 closest to 1 (one) indicates higher agreement and correlation between the data and the fitted line. It is possible to see in the graph that all values, but one, are in the 95% confidence interval and a χ^2 close to 1 in both energies, showing a very good agreement of a linear behavior of Eq. (1), which was theoretically expected.

Table 4 shows calibration parameters, the angular and linear coefficient β and α , respectively, obtaining the equation of the fitted lines from the graph of simulation, compared to Eq. (1).

The verification of the simulation and its calibration was done using three random elements from the periodic table, in this case, vanadium (V), potassium (K) and sodium (Na). Table 5 shows theoretical values of the attenuation coefficients of V, K and Na for 100 and 150 kV energies, as well as the theoretical values and the obtained simulated values for density and atomic number for V, K and Na, using Eqs. (2) and (3).

The deviation of the simulated values regarding the theoretical values is less than 5%, which shows a very good agreement with the X-ray physics theory and validates the methodology used in

Table 4
Calibration coefficients for dual energy technique.

Coefficients	Values
α_l	1.6363×10^{-1}
β_l	8.41549×10^{-7}
α_h	1.3753×10^{-1}
β_h	2.40697×10^{-7}

Table 5
Comparison of experimental (ρ_{exp} , $Z_{ef exp}$) and theoretical data (ρ , Z_{ef}) for density and effective atomic number of vanadium, potassium and sodium.

Elements	μ_l (cm ² /g)	μ_h (cm ² /g)	ρ (g/cm ³)	ρ_{exp} (g/cm ³)	Z_{ef}	$Z_{ef exp}$
V	0.288	0.168	5.87	5.54	23	23.72
K	0.234	0.158	0.87	0.873	19	19.67
Na	0.159	0.134	1.8–2.7	1.78–2.66	15	15.17

Table 6
Comparison of experimental and theoretical data for maximum and effective energy used.

99% Pure certified Al sphere				
E_{max} (keV)	Filter (mm)	E_{ef} (keV)	μ_{ef} (cm ⁻¹)	μ_{exp} (cm ⁻¹)
80	1.0 Al	34	2.17	2.16
90	1.0 Al	35	1.98	1.96
100	0.25 Brass	51	0.954	0.83
110	0.25 Brass	54	0.858	0.75
120	0.50 Copper	62	0.710	0.66
130	0.50 Copper	66	0.670	0.61

this work to calibrate the system of microtomography using the dual energy method.

3.2. Effective energy

Table 6 shows maximum energy used (E_{max}), corresponding physical metallic filter, tabulated values of effective attenuation coefficient (μ_{ef}) for a corresponding effective energy (E_{ef}) and experimental attenuation coefficient (μ_{exp}). The effective attenuation coefficients were compared to the experimental attenuation coefficients. It can be seen that the values have deviation of less than 10%, which shows a very good approximation of the experimental from the theoretical data for a polychromatic X-ray source.

Fig. 7 shows the best fitted line adjusted to the values between the theoretical and experimental data, the chi-square (χ^2) and 95% confidence interval. It is possible to see in the graph that all values are in the 95% confidence interval and a χ^2 close to 1, showing a very good agreement between the theoretical and experimental values. That indicates a very good approximation with the given value by the software and the expected value regarding the filtered spectrum for a specific energy value, and its corresponding attenuation coefficient.

3.3. Calibration

Fig. 8 shows the fitted line for the materials of the chosen thin rods in the two energies used, 80 and 130 kV. Table 7 shows the obtained results for density and effective atomic number from the dolomite sample.

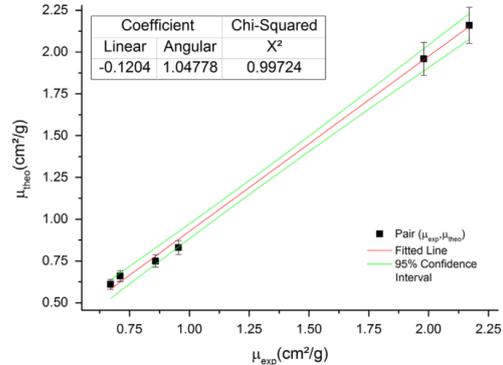


Fig. 7. Graph of comparison of the theoretical and experimental mass attenuation coefficient.

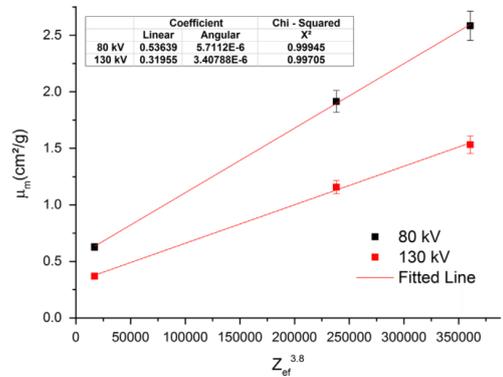


Fig. 8. Calibration graph of dual energy technique using Al, Fe and Cu thin rods.

Table 7
Experimental values obtained for a dolomite sample, through μ CT-DE, compared to the theoretical values.

Parameters	Theoretical values	Experimental values
ρ (g/cm ³)	2.85	3.67 ± 0.60
Z_{ef}	13.70	14.40 ± 0.80

Values of density and effective atomic number showed a very good agreement with the theoretical values. Even though there was a greater error compared to the theoretical value, the experimental values are within two times the standard error, which is still a very reasonable result. The reason for this is because of a smaller number of samples used in the first stage of the system calibration, which implies a greater error on the measurements made. Since the methodology was already validated through the simulation, it suggests that obtaining a larger number of samples can improve the experimental data obtained and, thus, decreasing the measurement error.

Fig. 9 shows the fitted lines for the reference samples of minerals in the two energies used, 80 and 130 kV. Table 8 shows the obtained results for density and effective atomic number of the albite sample.

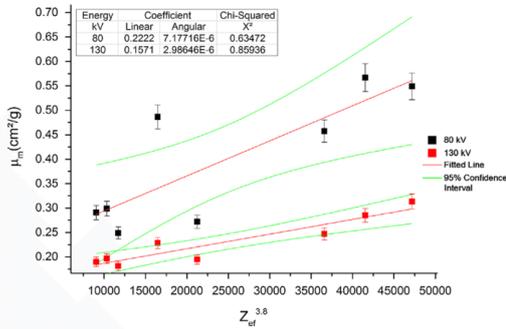


Fig. 9. Graph of dual energy calibration for mineral samples.

Table 8

Experimental values obtained for an albite sample, through μ CT-DE, compared to the theoretical values.

Parameters	Theoretical values	Experimental values
ρ (g/cm ³)	2.60	3.26 ± 0.40
Z_{ef}	11.76	10.52 ± 0.60

Values of density and effective atomic number showed a very good agreement among them. An increased number of reference materials results in a smaller error to the obtained values.

4. Conclusions

The results of simulation showed that the proposed methodology is indeed correct and in agreement with theoretical data, showing deviation of the simulated data of less than 5% from the theoretical data. The effective energy and its corresponding attenuation coefficient given by the system software are also in accordance with the theoretical data. Calibration and quantification using known samples indicates that the experimental values

are close from those tabulated, having the first experimental measurement a greater standard deviation from the expected values due to the reduced number of standard materials, being improved in the second experimental measurement in the mineralogical analysis due to the increasing number of standard minerals.

The dual energy technique is efficient for mineralogical identification, opening a horizon of possibilities for future tridimensional identification of density and effective atomic number directly in calibrated microtomographic images and, eventually, segmentation of microtomography images by their mineral composition.

Acknowledgments

The authors would like to thank ANP, Petrobras, CNPq, CAPES and FAPERJ for the financial support of this work.

References

- Cesareo, Roberto, 2000. X-ray physics: interaction with matter, production, detection, La Rivista del Nuovo Cimento della Società Italiana di Fisica. Editrice Compositori
- Chandler, C.T., 1995. Theoretical form factor, attenuation and scattering tabulation for $Z=1-92$ from $E=1-10$ eV to $E=0.4-1.0$ MeV. J. Phys. Chem. Ref. Data 24, 71–643.
- Dana, James Dwight, 2008. Manual of Mineralogy, 22nd ed. Merchant Books, New York
- Jovanović, Zoran, Khan, Faisal, Enzmann, Frieder, Kersten, Michael, 2013. Simultaneous segmentation and beam-hardening correction in computed microtomography of rock cores. Comput. Geosci. 56, 142–150.
- Remeysen, K., Swennen, R., 2008. Application of microfocus computed tomography in carbonate reservoir characterization: possibilities and limitations. Mar. Pet. Geol. 25, 486–499.
- Tsuchiya, A., Nakano, T., Uesugi, K., Uesugi, M., Takeuchi, A., Suzuki, Y., Noguchi, R., Matsumoto, T., Matsuno, J., Nagano, T., Imai, Y., Nakamura, T., Ogami, T., Noguchi, T., Abe, M., Yada, T., Fujimura, A., 2013. Analytical dual-energy microtomography: a new method for obtaining three-dimensional mineral phase images and its application to Hayabusa samples. Geochim. Cosmochim. Acta 116, 5–16.
- Van Geet, M., Swennen, R., Wevers, M., 2000. Quantitative analysis of reservoir rocks by microfocus X-ray computerised tomography. Sediment. Geol. 132, 25–36.

Mineralogy evaluation and segmentation using dual-energy microtomography

H. Alves,^{a*} I. Lima,^a J. T. de Assis,^b A. A. Neves^c and R. T. Lopes^a

Computed tomography is a nondestructive technique that allows the visualization of internal structures of a sample. However, the attenuation coefficient of a material to radiation, shown in grayscale levels, can be interpreted as the combination of parameters of density and atomic number. Thus, the separation of different structures of equal attenuation is no simple task, requiring prior knowledge of the sample composition, which is usually not available. By calibration of a high-resolution microtomographic system through the dual-energy technique, using materials of known composition, it is possible to identify and segment images to obtain the spatial distribution of parameters of density and atomic number. As the combination of these two data is unique to each material, it allows the identification and separation of regions, indistinguishable in common grayscale images obtained by microtomography. In this work, we developed a methodology for the evaluation of the dual-energy technique, as well as assessment, segmentation, and reconstruction of images on a scale of density and atomic number; added to this, we sought to develop a code in MatLab® for data, image processing, and mineralogical segmentation. The results show the capabilities of the dual-energy technique, combined with the microtomography technique, to obtain information on the composition of the sample, its three-dimensional spatial distribution, and separation of structures of the same composition. Copyright © 2015 John Wiley & Sons, Ltd.

Introduction

There has been an increasing interest regarding the chemical composition and its distribution inside an unknown sample. Originally, those characteristics were studied by traditional destructive techniques, such as thin sections using a petrographic microscope.^[1] However, there are many drawbacks that come with such techniques: the definitive loss of the sample; the time-consuming acquisition, evaluation, and quantification of the data; and the limitation of a 2D interpretation of parameters such as porosity, pore network, distribution of porosity, or mineralogy.

Microtomography (μ CT) is a nondestructive technique that relies on the interaction and attenuation of the radiation when passing through a sample.^[2–7] The technological advancements on X-ray tubes with smaller focal spot sizes and flat panel detectors made resolution of the micron scale possible, which, in turn, urged its spread throughout many small to medium laboratories.^[8,9] The result of μ CT is a grayscale image of the internal composition of the sample, which allows for 3D analysis of the same parameters that were usually limited to a 2D evaluation and provides information on their distribution. Considering that μ CT offers thousands of images, the statistics are far superior to any other available nondestructive technique.^[10] The possibilities of study have been worldly recognized from several areas of expertise such as orthodontics,^[11–13] biology, earth sciences,^[14–16] archeology, and many others.

Even though μ CT offers many advantages, it has its limitations. Many artifacts arise from the polychromatic nature of the X-rays and the sensitivity of each detector pixel. Smaller resolution usually prevents the usage of bigger samples and is computationally intensive. The grayscale images are often mistaken for a distribution of density, which is not always the case, and do not allow a standard differentiation of materials that have a similar attenuation coefficient.^[17]

Because the attenuation coefficient is a parameter that depends on the density and effective atomic number of the material, the

combination of the two gives limitless possibilities on the resulting attenuation coefficient for characteristic X-ray energy. However, it is possible to solve this limitation using data obtained from two distinct X-ray spectra.^[18,19]

The application of the dual-energy μ CT (μ CT-DE) technique is usually based in the ascertainment of the relative contributions of photoelectric absorption and Compton scattering in the total attenuation coefficient (Eqn (1)):^[20]

$$\mu_{m(E)} = \mu_{l(E)}/\rho = \alpha_{(E)} + \beta_{(E)}Z_{ef}^{3.8} \quad (1)$$

where μ_m is the mass attenuation coefficient and μ_l is the linear attenuation coefficient.

The α and β constants are energy dependent, i.e. they change according to the energy of the incident X-rays that are going through the sample. A polychromatic source can be thought of as resulting mean energy that will change as it passes through the sample and likewise the α and β variables. Therefore, Eqn (1) actually represents a monochromatic X-ray, although it can be extended to polychromatic X-rays by means, e.g. of mean energy or effective energy.

The combination of μ CT with the dual-energy technique allows the obtainment of two or more linear equations, for each chosen energy, so that through, e.g. the mathematical method of linear regression, the linear and angular constants α and β , respectively, of a linear equation of the form $y = \beta x + \alpha$ can be attained.

* Correspondence to: Haimon Alves, Nuclear Engineering Program, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil. E-mail: haimon.dlafis@gmail.com

a Nuclear Engineering Program, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

b Mechanical Engineering, State University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

c Department of Pediatric Dentistry and Orthodontics, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

Table 1. Acquisition parameters	
Parameters	Values
Tension (kV)	80/130
Current (μA)	100/61
Matrix (pixels)	2240 × 2240
Pixel size (μm)	10
Angular step (°)	0.5
Number of frames	5
Filter (mm)	0.15/0.50 Cu

All of these data allow for a calibration of a microtomographic system, i.e. to find significant and standard information concerning the objective of the technique, which is to determine density and effective atomic number. Any sample tomographed under the same conditions of acquisition, for each of the two different energy values of the X-ray source, can be studied for further knowledge of its density and effective atomic number by Eqns (2) and (3):

$$\rho = \frac{\beta_h \mu_l - \beta_l \mu_h}{\beta_h \alpha_l - \beta_l \alpha_h} \quad (2)$$

$$Z_{ef} = \sqrt[3.8]{\frac{\alpha_l \mu_h - \alpha_h \mu_l}{\beta_h \mu_l - \beta_l \mu_h}} \quad (3)$$

where ρ is the density of the analyzed material or sample, β_l and β_h are angular constants for low and high chosen energy values, respectively, α_l and α_h are linear constants for low and high chosen energy values, respectively, μ_l and μ_h are the linear attenuation coefficients for low and high chosen energy values, respectively, and Z_{ef} is the effective atomic number of the analyzed material or sample, defined by

$$Z_{ef} = \left(\sum_i^N f_i Z_i^{3.8} \right)^{1/3.8} \quad (4)$$

where f_i is the molecular percentage of the element found in the sample.

The objective of this work was to improve and extend the original work^[21] through verification of the use of the dual-energy technique for heterogeneous materials, such as minerals, and implement a semiautomated Matlab® code to obtain microtomographic images on scales of density and effective atomic number that allow 3D evaluation and qualitative comparison of density and effective atomic number images with the quantified values of the same parameters using reference samples.

Table 2. Heterogeneous elements (minerals) and simulation parameters					
Mineral	Formula	ρ (cm ³ /g)	Z_{ef}	μ_l (cm ² /g)	μ_h (cm ² /g)
Albite	NaAlSi ₃ O ₈	2.60	11.62	0.1900	0.1471
Quartz	SiO ₂	2.65	11.85	0.1935	0.1487
Howlite	Ca ₂ B ₅ SiO ₃ (OH) ₅	2.62	13.76	0.2113	0.1531
Dolomite	CaMg(CO ₃) ₂	2.83	13.94	0.2135	0.1533
Calcite	CaCO ₃	2.71	15.88	0.2462	0.1612
Apatite	Ca ₅ (PO ₄) ₃ F	3.17	16.42	0.2581	0.1634
Fluorite	CaF ₂	3.10	16.98	0.2674	0.1637
Pyrite	FeS ₂	4.84	22.21	0.4153	0.1987
Hematite	Fe ₂ S ₃	5.04	23.70	0.4394	0.2040



Figure 1. Standard minerals.

Methodology

The methodology was divided in three main steps: the validation of the proposed methodology of the μ CT-DE technique through a simulation using tabulated theoretical values of density, atomic number, and attenuation coefficients for heterogeneous materials (minerals); the calibration and quantification through standard minerals; and the application of a developed Matlab® code on the microtomographic images, after calibration, on five reference samples, a 1-in-diameter cylinder-shaped dolomite and four small minerals of albite, howlite, fluorite, and opal as to obtain 2D and 3D density and effective atomic number images.

The microtomographic system used in this work to study the dual-energy technique was the microtomograph, 1173 model, from Skyscan-Bruker®. This system consists of an X-ray tube of tungsten (W) anode with maximum operation capacity of 130-kV tension and 8-W power, a flat-panel detector of 2240 × 2240 pixels in its matrix, minimum focal spot size of 5 μm, maximum resolution of 10 μm, and a micropositioning stage, in XYZ direction, for samples.

Table 1 shows the acquisition parameters for the two distinct acquisitions.

Simulation

The dual-energy technique has been confirmed to be capable of differentiating homogeneous materials,^[21] and now, simulations were performed using heterogeneous materials to confirm the possibility of using a polychromatic source to distinguish materials of random chemical composition, with emphasis on mineralogy.

The proof and validation of the μ CT-DE technique were made using tabulated attenuation coefficients for heterogeneous materials, i.e. minerals, of known effective atomic number and density, for two chosen energy values. α and β , from Eqn (1), were obtained

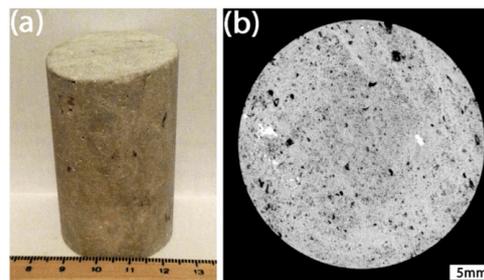


Figure 2. (a) Dolomite sample and (b) microtomographic section.

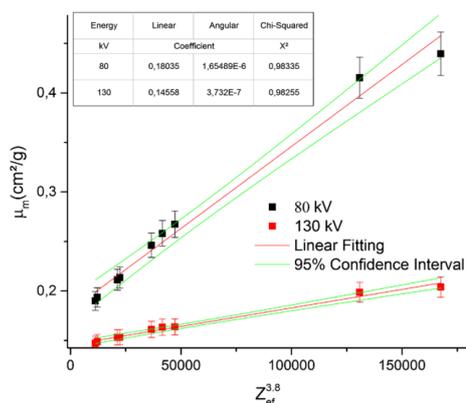


Figure 3. Simulation of μ CT-DE using 80 and 130-kV energy values.

Coefficients	Values
α_l	1.8035×10^{-1}
β_l	1.6549×10^{-6}
α_h	1.4558×10^{-1}
β_h	3.7320×10^{-7}

through linear regression of the mass attenuation coefficient and atomic number of the heterogeneous minerals.

The choice of which energy values to use to verify the methodology through simulation is irrelevant because the methodology is expected to work with any two different energy values, provided that the energy and all acquisition parameters remain constant, aside from the minimum and maximum values of attenuation coefficients during reconstruction procedure. However, for the sake of comparison regarding the experimental acquisition parameters, this step was made with 80 and 130-kV energy values.

Table 2 shows all the minerals, used as heterogeneous materials, and its information for the simulation step.^[22] The simulated energy values used were 80 and 130 kV. The elements used in this calibration are ones most commonly found on geological samples.

The use of random materials allows evaluation of the simulated calibration, to ensure that the methodology works with any choice of heterogeneous materials. The evaluation and validation of the simulation performance were performed using random minerals not previously used in the calibration process. In this case, the minerals rutile, diopside, and cuprite were used as reference.

Mineral	Formula	μ_l (cm ² /g)	μ_h (cm ² /g)	ρ (g/cm ³)	ρ_{exp} (g/cm ³)	Z_{ef}	$Z_{ef,exp}$
Rutile	TiO ₂	0.3101	0.1716	4.04	3.98	19.30	19.40
Diopside	CaMg(Si ₂ O ₆)	0.2217	0.1553	3.39	3.42	14.33	14.35
Cuprite	CuO ₂	0.5637	0.2323	5.64	5.70	26.07	25.70

NRecon® (v.1.6.9.3) and CTan® (v. 1.13.2.1) software was used in the reconstruction and quantification of the attenuation coefficient for the calibration, respectively.

Calibration

Elements and minerals have been used to calibrate the μ CT-DE.^[21] Because the elements were few and the minerals were not guaranteed to be free, or accounted for, of impurities, standard materials were acquired. In order to improve accuracy and precision with an increased number of samples, to make for a better fitting, those standard minerals of different composition were used in a new attempt of calibration.

Five samples of standard and known minerals (Fig. 1) were used: hematite, orthoclase, quartz, calcite, and fluorapatite. The albite and dolomite samples were used as reference material to verify the new calibration through quantification, the dolomite sample being also used for quantitative verification; the minerals howlite, opal, and fluorite were used to verify quantitatively and visually the segmented images corresponding to a segmentation on a scale of mineralogy.

Because the standard minerals were of homogeneous composition, the region of interest for quantification of the attenuation coefficient can fill the whole sample.

The coefficients α and β , for both energy values, can be obtained through the linear regression, which gives the best fitting for interpolating all data in a graph. Then, it is possible to compare the fitted curve to the theoretical equation (Eqn (1)) that gives information about attenuation coefficients. Finally, obtaining all necessary parameters, Eqns (2) and (3) express all meaningful information, i. e. the ability to calculate density, ρ , and effective atomic number, Z_{ef} from any tomographed sample, under the same experimental conditions.

Density and effective atomic number

After validation and calibration, the microtomographic images of the dolomite sample were run into the MatLab® code, which as an output gives density and effective atomic number-scaled images.

The values of the original 8-bit grayscale images, with 256 values of gray intensity, are extracted by the code and converted to attenuation coefficient values, according to internal conversion for the specified microtomograph. By inserting the α and β values for low and high energy values in the dual-energy Eqns (2) and (3), the values of density and effective atomic number are calculated for each pixel of the images. The code gives then, for each grayscale image, a pair of color images scaled in density and effective atomic number values. A standard dolomite sample of known composition and quantified through dual energy was used to evaluate qualitatively the output of the code.

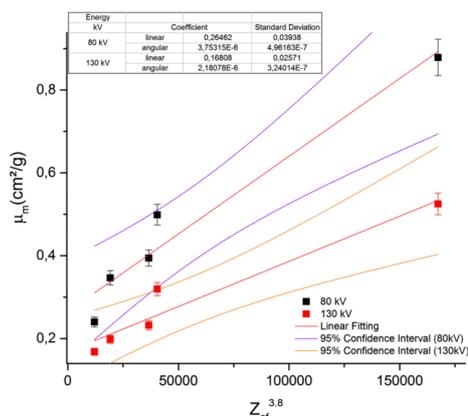


Figure 4. Calibration of the system using standard minerals.

Table 5. Experimental values obtained for a dolomite sample, through μ CT-DE, compared with the theoretical values		
Parameters	Theoretical values	Experimental values
ρ (g/cm ³)	2.83	3.22 ± 0.40
Z_{ef}	13.94	13.61 ± 0.30

Table 6. Experimental values obtained for an albite sample, through μ CT-DE, compared with the theoretical values		
Parameters	Theoretical values	Experimental values
ρ (g/cm ³)	2.60	2.96 ± 0.40
Z_{ef}	11.76	11.22 ± 0.50

The μ CT of the dolomite reference sample (Fig. 2(a)) was performed using the same conditions of tension, current, and physical filters for each of the two energies values 80 and 130 kV. Figure 2(b) shows a cross section from the dolomite sample. The region of interest, to allow quantification of the attenuation coefficient, is more difficult to be defined in this sample because it has some denser components than the matrix. It has to be chosen properly, avoiding regions of greater variations of color on the image.

The microtomographic images of the minerals howlite, opal, and fluorite were also run into the MatLab® code in order to evaluate the capabilities of segmentation exclusively through combination of density and effective atomic number data. The steps are basically the same as the ones used for the dolomite sample, but instead of giving a pair of color images scaled in density and effective atomic number values, the resulting image is already segmented by each mineral using the parameters of the standard calibration and the combination of the values obtained of density and effective atomic number through the MatLab® code.

Results

Simulation

All required information for the μ CT-DE system calibration can be extracted from the theoretical data, i.e. the density, attenuation coefficients, and effective atomic number given into the calibrated graphs. Figure 3 shows the best-fitted straight line to the simulation data, its equation and constants, the chi square (χ^2), which shows how well adjusted the line is, and the 95% confidence interval. It is possible to see a very good agreement of a linear behavior of Eqn (1), which was theoretically expected.

Table 3 shows the calibration parameters, i.e. the linear and angular coefficient α and β , respectively, for describing the fitted lines in the graph of the simulation, following Eqn (1).

The verification of the simulation and its calibration were performed using three random minerals, in this case, rutile, diopside, and cuprite. Table 4 shows theoretical values of the attenuation coefficients of those minerals for 80 and 130-kV energy values, as well as the theoretical values and the obtained simulated

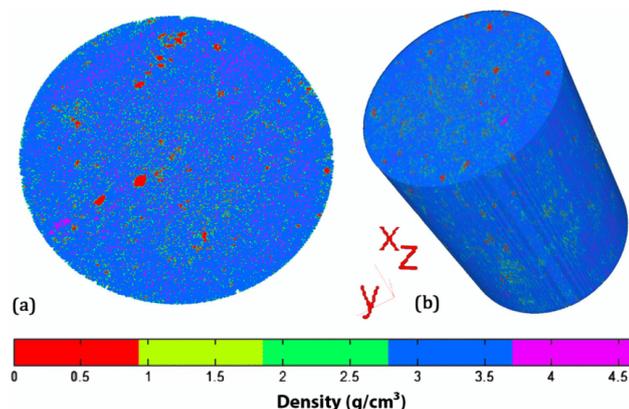


Figure 5. (a) 2D image of density and (b) 3D image of density.

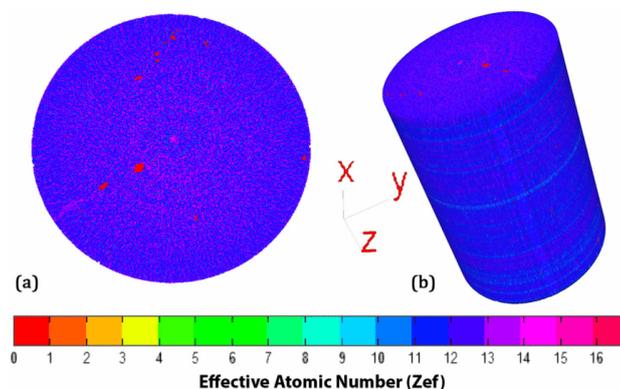


Figure 6. (a) 2D image of effective atomic number and (b) 3D image of effective atomic number.

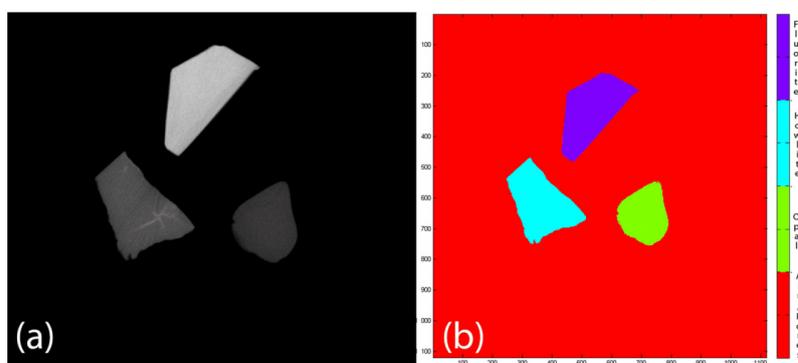


Figure 7. Segmentation through the mineralogy scale.

values for density and atomic number for those minerals using Eqns (2) and (3). The deviation of the simulated values regarding the theoretical values is less than 5%, which shows a very good agreement with the X-ray physics theory and validates the methodology used in this work to calibrate the system of μ CT using the dual-energy method for minerals.

Calibration

Figure 4 shows the fitted lines for the reference samples of minerals in the two energy values used, 80 and 130 kV. Tables 5 and 6 show the new experimental values found for density and effective atomic number for the dolomite and albite samples and the comparison between theoretical and experimental values of both samples. Values of density and effective atomic number showed a very good agreement among them, within one standard deviation. An increased number of reference materials result in a smaller error to the obtained values.

Density and effective atomic number

Figures 5(a) and 6(a) (left side) show density and effective atomic number images of a section of the sample. Figures 5(b) and 6(b) (right side) show 3D images of the whole sample. Both images have a scale of density and effective atomic number in the bottom, regarding the colors presented in the images.

It is possible to see that the range of colors of density is near the theoretical and experimental values. The main color goes from somewhere between $2.75 < \rho < 3.75$. The effective atomic number shows lower values, although within the variation of the obtained data.

Figure 7(a) shows a tomographic image of a section of the three minerals that were used for verification purposes of the compatibility of data between density and effective atomic number. This time, however, the resulting image given by the Matlab[®] code was performed in a scale of minerals (Fig. 7(b)), after processing the combination of density and effective atomic number parameters.

The final image shows that the segmentation on a scale that differentiates minerals is possible, and the results are quite promising.

One has to have in mind that the materials are not completely homogeneous in their own distribution, and there is the random nature of the X-rays, which adds noise and complicates the attainment of the correct attenuation coefficient. The acquisition, reconstruction, and Matlab® code could be improved in the future to minimize noise. Nevertheless, the results show great possibilities for potential mineralogy segmentation.

Conclusions

The simulation is a necessary first step that proves that the dual-energy technique is capable of differentiating not only homogeneous materials but also heterogeneous materials.

The calibration using more and new standard materials showed improved results for both evaluated minerals within one standard deviation.

The obtained images of density and effective atomic number, when compared with the tabulated values of the dolomite sample, show that the Matlab® code works but still needs improvement. A qualitative evaluation shows an agreement with the tabulated values of a dolomite sample ($\rho = 2.83 \text{ g/cm}^3$ and $Z_{\text{eff}} = 13.94$) considering the scale of colors. It is possible to see noise related to the random nature of X-rays, its interaction with the sample, and the resulting fluctuating values of attenuation coefficients.

The segmented image on a mineralogy scale shows promising results in the possibility of separating a distribution of mineralogy through any sample, whose knowledge would be invaluable to several studies of the influence of mineralogy in reservoir characterization.

Acknowledgements

The authors would like to thank Agência Nacional do Petróleo, Petrobras, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, and Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro for the financial support of this work.

References

- [1] E. R. Thomas, H. J. Richard. A comparison of optical and X-ray CT technique for void analysis in soil thin section. *Geoderma* **2007**, *141*, 60–70.
- [2] W. C. Röntgen. Eine Neue Art von Strahlen (on a new kind of rays). *Physikalisch-medizinischen Gesellschaft of Würzburg* **1895**, *64*, 1–37.
- [3] J. Radon. On determination of functions from their integral values along certain manifolds. *IEEE Trans. Med. Imaging* **1895**, *5*(4), 170–176.
- [4] A. M. Cormack. Representation of a function by its line integrals, with some radiological applications. *J. Appl. Phys.* **1963**, *34*(9), 2722–2727.
- [5] A. M. Cormack. Representation of a function by its line integrals, with some radiological applications. II. *J. Appl. Phys.* **1964**, *35*(10), 2908–2913.
- [6] G. N. Hounsfield. Computerized transverse axial scanning (tomography). Part I. Description of a system. *Brit. J. Radiol.* **1973**, *46*(552), 1016.
- [7] J. Ambrose. Computerized transverse axial scanning (tomography). Part II. Clinical application. *Brit. J. Radiol.* **1973**, *46*(552), 1023–1047.
- [8] L. A. Feldkamp, L. C. Davis, J. W. Kress. Practical cone beam algorithm. *J. Opt. Soc. Am. A* **1984**, *1*(6), 612–619.
- [9] W. A. Kalender. *Computed Tomography: Fundamentals, System Technology, Image Quality, Applications*, Publicis Publishing, 3rd. Erlangen, **2011**.
- [10] H. Alves, I. Lima, J. T. Assis, M. Geraldes, R. T. Lopes. Comparison of pore space features by thin sections and X-ray microtomography. *Appl. Radiat. Isot.* **2014**, *94*(12), 182–190.
- [11] G. De-Deus, J. Marins, A. d. A. Neves, C. Reis, S. Fidel, M. A. Versiani, H. Alves, R. T. Lopes, S. Paciomnik. Assessing accumulated hard-tissue debris using micro-computed tomography and free software for image processing and analysis. *J. Endod.* **2014**, *40*(2), 271–276.
- [12] G. De-Deus, E. J. N. L. Silva, J. Marins, E. Souza, A. d. A. Neves, F. G. Belladonna, H. Alves, R. T. Lopes, M. A. Versiani. Lack of causal relationship between dental microcracks and root canal preparation with reciprocation systems. *J. Endod.* **2014**, *40*(9), 1447–1450.
- [13] A. A. Neves, E. Coutinho, M. V. Cardoso, S. V. Jaecques, B. V. Meerbeek. Micro-CT based quantitative evaluation of caries excavation. *Dent. Mater.* **2010**, *579*–588.
- [14] L. Halli, R. Swennen, A. Foubert, M. Dierick, P. Jacobs. 3D quantification of mineral components and porosity distribution in Westphalian C sandstone by microfocus X-ray computed tomography. *Sediment. Geol.* **2009**, *220*(1–2), 116–125.
- [15] R. A. Ketcham, W. D. Carlson. Acquisition, optimization and interpretation of X-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences. *Comput. Geosci.* **2001**, *27*, 381–400.
- [16] V. Cnudde, M. N. Boone. High-resolution X-ray computed tomography in geosciences: a review of the current technology and applications. *Earth-Sci. Rev.* **2013**, *123*, 1–17.
- [17] K. Remeysen, R. Swennen. Application of microfocus computed tomography in carbonate reservoir characterization: possibilities and limitations. *Mar. Petrol. Geol.* **2008**, *25*, 486–499.
- [18] M. Van Geet, R. Swennen, M. Wevers. Quantitative analysis of reservoir rocks by microfocus X-ray computerized tomography. *Sediment. Geol.* **2000**, *132*(1–2), 25–36.
- [19] M. Van Geet, R. Swennen, M. Wevers. Towards 3-D petrography: application of microfocus computer tomography in geological science. *Comput. Geosci.* **2001b**, *27*(9), 1091–1099.
- [20] S. L. Wellington, H. J. Vinegar. X-ray computerized tomography. *J. Petrol. Tech.* **1987**, *39*(8), 885–898.
- [21] H. Alves, I. Lima, R. T. Lopes. Methodology for attainment of density and effective atomic number through dual energy technique using microtomographic images. *Appl. Radiat. Isot.* **2014**, *89*(7), 6–12.
- [22] C. T. Chandler. Theoretical form factor, attenuation and scattering tabulation for $Z/41-92$ from $E/41-10 \text{ eV}$ to $E/40.4-1.0 \text{ MeV}$. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1995**, *24*, 71–643.