



UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
Facultatea de Fizică
Școala Doctorală de Fizică



Edward HERMANN

DETERMINAREA COMPOZIȚIEI CHIMICE A
SUBSTANȚELOR PRIN TRANSMISIA RAZELOR X

Teză de doctorat

Conducător științific
Prof. dr. Octavian DULIU

București, 2017

Rezumat

Scanarea bagajelor în vederea detectării automate a substanțelor periculoase și explozive a devenit în ultima perioada o misiune importantă în contextul creșterii amenințărilor teroriste și al fluxului de pasageri în transportul aerian. În prezent sunt folosite pentru scanarea bagajelor și detecția obiectelor/substanțelor periculoase dispozitive bazate pe principii diferite, precum: analiza chimică a urmelor de substanțe volatile, tehnici imagistice prin radiografie sau tomografie prin transmisie cu raze X, gama sau fascicule de neutroni, difracție raze X (Wells, Bradley 2012).

Razele X sunt cunoscute și folosite de mai bine de un secol, iar sursele de raze X sunt astăzi relativ ușor de realizat. Acestea sunt importante pentru puterea lor de penetrare a materialelor, dar și pentru faptul că interacționează cu orice tip de atom. Pentru a caracteriza atenuarea razelor într-un mediu este necesară înțelegerea fenomenelor fizice care au loc la traversarea unui mediu. Coeficientul de atenuare linear μ este mărimea fizică care caracterizează atenuarea razelor și este strâns legată de secțiunea eficace de împrăștiere σ prin relația:

$$\sigma = \left(\frac{\mu}{\rho}\right) m_A / N_A \quad (1)$$

unde ρ este densitatea mediului, m_A este masa molară, iar N_A numărul lui Avogadro.

În domeniul energetic de interes pentru acest studiu (10keV- 1MeV), razele X interacționează cu paturile electronice ale atomilor substanței, iar interacția nucleară este neglijabilă. Forțele implicate sunt de natură electromagnetică, iar mecanismele de interacție sunt explicate și descrise matematic de formalismul electrodinamicii cuantice.

Secțiunea eficace depinde de natura materialului (tipul atomilor constituenți) și de energia fotonilor incidenți.

$$\sigma = func(Z_1, Z_2, \dots, Z_n, E_{foton}) \quad (2)$$

Cunoașterea dependenței lui σ de material și energie are o importanță majoră și poate servi la identificarea materialului.

Deși matematic secțiunea eficace de împrăștiere poate fi calculată cu ajutorul teoriei perturbațiilor din electrodinamica cuantica, expresia rezultată nu poate fi exprimată analitic, prin formule matematice simple, complicând foarte mult problema identificării substanțelor. De-a lungul timpului s-au încercat diverse parametrizări ce au la baza considerente teoretice sau experimentale, încercându-se diverse expresii analitice pentru relația (2) cu rezultate mai mult sau mai puțin satisfăcătoare (Smith, Martz, Kallman

2011). Problema acestor parametrizări este lipsa de generalitate, respectiv domeniul limitat de aplicabilitate.

În capitolul 4 vom prezenta mai multe metode de identificare a materialelor, bazate pe cunoașterea dependenței secțiunii eficace de atomii constituenți și de energia fotonilor.

În lucrarea de față propunem și examinăm o metoda alternativă de analiza a obiectelor compuse dintr-un material omogen (capitolul 5) și a obiectelor compuse din straturi de material (capitolul 7). Scopul final este determinarea compoziției chimice în cazul obiectelor omogene și structura (compoziția și grosimea straturilor) în cazul obiectelor complexe, exploatând comportamentul spectral al atenuării razelor X.

În loc de a utiliza parametrizări, implicând stabilirea unei expresii analitice pentru dependența $\mu = \mu(E, \rho, Z)$, studiul curent propune o abordare algebrică, bazată pe dependența lineară a coeficientului de atenuare a unei substanțe compuse de coeficienții de atenuare ai atomilor constituenți (Hubbell 2000).

Aceasta metodologie va fi aplicată în capitolul 6 la studiul unor materiale organice (cu focus asupra unor substanțe periculoase) a căror coeficienți de atenuare teoretici sunt afișați în baza de date XCOM NIST (Hubbell, Seltzer 2016).

În capitolul 7 vom prezenta un experiment realizat pentru a testa aplicabilitatea în practică a metodei descrise.

O altă metodă importantă pentru analiza compoziției și structurii obiectelor este analiza cantitativă a imaginilor achiziționate prin diverse tehnici, cum ar fi radiografia sau tomografia cu raze X.

În capitolul 8 vom prezenta tehnica analizei cantitative a imaginilor în caracterizarea structurii materialelor în rezultatele obținute în studiul rocilor extrase de la mare adâncime.

Cuvânt înainte

În urmă cu câțiva ani, după o îndelungată perioadă în care am lucrat în domeniul dezvoltării de aplicații software, am decis să-mi reiau studiile în domeniul fizicii, la Universitatea din București, Facultatea de Fizică.

Trebuie să mărturisesc că am fost cucerit de pasiunea și entuziasmul cadrelor didactice, a inginerilor și fizicienilor cu care am avut norocul să colaborez, hotărându-mă în cele din urmă să-mi schimb cariera și să continui în domeniul cercetării în fizică.

În realizarea tezei am beneficiat de îndrumare competentă și indemn permanent din partea îndrumătorilor științifici.

Țin să mulțumesc domnului Dr. Ing. Mihai Iovea pentru sfaturile valoroase, suportul permanent acordat la realizarea acestei lucrări, și echipei Accent Pro 2000, pentru ajutorul acordat pe toată durata acestui studiu.

De asemenea țin să mulțumesc domnului Prof. Univ. Dr. Octavian Dului pentru sprijinul acordat și sfaturile competente.

Doresc să mulțumesc cadrelor universitare de la Facultatea de Fizică București: Prof. Univ. Dr. Alexandru Jipa, Prof. Univ. Dr. Virgil Băran, Conf. Univ. Dr. Radu Paul Lungu, Conf. Univ. Dr. Mihai Dondera.

Mulțumesc soției mele care m-a sprijinit în toți acești ani și nu în ultimul rând, mulțumesc tatălui meu care mi-a fost întotdeauna mentor și model.

Cuprins

REZUMAT	I
CUVÂNT ÎNAINTE.....	III
1. INTRODUCERE	3
2. RAZELE X	5
2.1 ISTORIC.....	5
2.2 PRODUCEREA RAZELOR X	6
3. FENOMENE FIZICE - INTERACȚIA RAZELOR X CU SUBSTANȚA	11
3.1 ATENUAREA RADIAȚIEI	11
3.2 EFECTUL FOTOELECTRIC	14
3.3 EFECTUL COMPTON (ÎMPRĂȘTIEREA NECOERENTA).....	16
3.4 ÎMPRĂȘTIEREA RAYLEIGH (ÎMPRĂȘTIEREA COERENTĂ)	18
3.5 EFECTUL GENERARE DE PERECHI ȘI GENERAREA DE TRIPLEȚI	19
3.6 FOTOABSORBȚIA NUCLEARA.....	21
3.7 COEFICIENTUL DE ATENUARE PENTRU SUBSTANȚE COMPUSE ȘI AMESTECURI	22
4. METODE DE IDENTIFICARE A MATERIALELOR UTILIZÂND RAZELE X.....	25
4.1 FLUORESCENȚA CU RAZE X (X-RAY FLOURESCENCE -XRF).....	25
4.2 DIFRAȚIA CU RAZE X (XRD)	27
4.3 TEHNICI DE ANALIZĂ AUTOMATĂ A IMAGINII	29
4.4 DETERMINAREA NUMĂRULUI ATOMIC EFECTIV - Z EFECTIV.....	30
5. ANALIZA MATERIALELOR UTILIZÂND COMPORTAMENTUL SPECTRAL AL TRANSMISIEI RAZELOR X	37
5.1 DETERMINAREA COMPOZIȚIEI CHIMICE PENTRU SUBSTANȚE OMOGENE.....	37
5.2 INVESTIGAREA CORPURILOR COMPLEXE (STRATURI DE MATERIAL)	41
6. REZULTATE TEORETICE	43
6.1 DETERMINAREA COMPOZIȚIEI CHIMICE.....	43
6.2 ANALIZA STABILITĂȚII METODEI, SIMULAREA DE ZGOMOT STATISTIC	47
6.3 CONCLUZII	49
6.4 DESCOMPUNEREA ÎN VALORI SINGULARE (SINGULAR VALUE DECOMPOSITION - SVD) ȘI STABILITATEA SOLUȚIEI	52
7. REZULTATE EXPERIMENTALE	55
7.1 DESCRIEREA EXPERIMENTULUI.....	55
7.2 REZULTATE EXPERIMENTALE.....	57
8. ANALIZA AUTOMATĂ A IMAGINILOR, FUNCȚIA DE DISTRIBUȚIE A ORIENTĂRII (ODF)	61
8.1 ETAPELE PRELUCRĂRII CANTITATIVE A IMAGINILOR.....	63
8.2 REZULTATELE STUDIULUI	64
8.3 CONCLUZII	65
9. CONCLUZII GENERALE.....	67
BIBLIOGRAFIE	69
LISTA CONTRIBUȚIILOR PROPRII	73

10.1	LUCRĂRI PUBLICATE ÎN REVISTE.....	73
ANEXE		75
A1.	MEDIAREA COEFICIENTULUI DE ATENUARE.....	75
A.2.	CALCULUL COMPOZIȚIEI CHIMICE ȘI A DENSITĂȚII.....	76
A.3.	DETERMINAREA COMPOZIȚIEI CHIMICE ÎN CAZUL ZGMOTULUI STATISTIC	77
A4.	REZULTATELE COMPLETE SI INCERTITUDINILE OBTINUTE LA DETERMINAREA COMPOZIȚIEI CHIMICE ȘI A DENSITĂȚII PENTRU SUBSTANȚE OMOGENE	80
A5.	RUTINA DE CALCUL PENTRU DETERMINAREA GRADULUI SINGULARITĂȚII MATRICEI A PRIN SVD	93

1. Introducere

Scanarea bagajelor în vederea detectării automate a substanțelor periculoase și explozive a devenit în ultima perioadă o misiune importantă în contextul creșterii amenințărilor teroriste și al fluxului de pasageri în transportul aerian. În prezent sunt folosite pentru scanarea bagajelor și detecția obiectelor/substanțelor periculoase dispozitive bazate pe principii diferite, precum: analiza chimică a urmelor de substanțe volatile (trace analysis), tehnici imagistice prin radiografie sau tomografie prin transmisie cu raze X, gama sau fascicule de neutroni, difracție raze X, etc.

Razele X sunt folosite pe scară largă datorita puterii de penetrare și a faptului că pot interacționa cu orice atom.

La trecerea printr-un material, razele X sunt atenuate după o lege exponențială caracterizată de **coeficientul linear de atenuare μ** . Coeficientul linear de atenuare reprezintă probabilitatea de interacție dintre un foton și mediul străbătut pe unitatea de lungime a parcursului și are o dependență complexă de densitatea și numărul atomic Z al materialului străbătut și de energia fotonilor. S-a dovedit că dependența de densitate a coeficientului linear de atenuare este una lineară (Hubbell 1999) și poate fi separată cu ușurință. Astfel se definește **coeficientul de atenuare masic**, raportul dintre coeficientul de atenuare linear și densitatea materialului prin care trec fotonii. Coeficientul de atenuare masic nu depinde de densitatea materialului, ci doar de numărul atomic Z și de energia fotonilor incidenți E .

Dependența coeficientului de atenuare masic de energia razelor X, denumit și comportament spectral stă la baza tehnicilor dual-energy și multi-energy (Midgley 2005, McCollough and All 2105, Saversky and All 2015, Wait and All 2015).

Metoda radiografică dual-energy constă în măsurarea coeficientului de atenuare a razelor X la doua energii și compararea rezultatelor cu coeficienții de atenuare ai materialelor cunoscute (Alvarez & Macovski, 1976).

Măsurând coeficienții de atenuare la doua energii diferite: $\mu_1 = \mu_1(\rho, Z)$ și $\mu_2 = \mu_2(\rho, Z)$, putem determina cuplu de variabile (ρ, Z) .

Pentru substanțele compuse din mai multe tipuri de atomi poate fi definit un număr atomic efectiv Z_{eff} care să preserve aceeași lege de dependență a coeficientului de atenuare ca și în cazul substanțelor elementale: $\mu_E = \mu(E, \rho, Z_{\text{eff}})$.

Metoda dual-energy implică dificultăți practice legate de producerea fascicolului de raze X dual-energy și detecția separată la energii diferite. Printre tehnicile utilizate se enumeră: **Rapid kVp Switching** (Kalender et al., 1986), **Dual X-ray source** (Flohr et

al., 2006), iar pentru detecție *Energy-sensitive sandwich detectors* (Press et al., 2002, Boll et al., 2008).

O alta problemă este dificultatea de a stabili valoarea numărului atomic efectiv Z_{eff} , datorată interpretărilor multiple ale acestuia (Duvauchelle et al, 1999).

În plus perechea (ρ, Z_{eff}) nu este întotdeauna suficientă pentru a distinge materialul.

Dezvoltarea detectorilor spectroscopici a deschis calea sistemelor multi-energy.

Detectorii de tip *photon-counting* (Kang, Lee, Cho 2015, Dierickx, Yao, Witvrouwen 2016, Philipp, Tate, Purohit 2016, Becker 2016) au capacitatea de a măsura energia depozitată de fiecare foton individual la o rezoluție energetică înaltă și fac posibilă aplicarea tehnicilor radiografice și tomografice multi-energy. Un avantaj major îl reprezintă faptul că metodele utilizează spectrul continuu al radiației X de frânare (*Bremsstrahlung*) generat de tuburile obișnuite de raze X.

În această lucrare ne propunem să examinăm o metodă de analiză a obiectelor compuse din material omogen sau straturi de material pentru a detecta compoziția chimică a acestora și structura obiectelor complexe, utilizând comportamentul spectral al atenuării razelor X. În loc de a utiliza parametrizări, implicând stabilirea unei expresii analitice pentru dependența $\mu_E = \mu(E, \rho, Z_{\text{eff}})$ ne propunem o abordare algebrică, bazată pe dependența lineară a coeficientului de atenuare a unei substanțe compuse de coeficienții de atenuare ai atomilor constituenți. Această metodologie va fi aplicată la studiul unor materiale organice (cu focus asupra unor substanțe periculoase) a căror coeficienți de atenuare teoretici sunt afișați în baza de date XCOM NIST (Hubbell, Seltzer 2016).

O altă metodă investigată în acest studiu este analiza de imagine. Analiza cantitativă a imaginilor obținute prin radiografie sau tomografie reprezintă un instrument puternic în identificarea materialelor și caracterizarea structurilor macroscopice.

2. Razele X

2.1 Istoric

Razele X au fost descoperite accidental în 1895 de fizicianul german Wilhelm Conrad Roentgen, în timp ce experimenta tuburi de vid. Acesta le-a denumit raze X datorita naturii necunoscute a radiației. Celebra fotografie a mâinii soției sale în care se disting cu claritate oasele degetelor și inelul a electrizat întreaga lume.



Figura 2.1.1: *Imaginea mâinii obținută de W.C. Roentgen cu ajutorul razelor X în decembrie 1895*

Sursă imagine:

<http://nau.edu/cefns/labs/electron-microprob>

Razele X sunt o formă de radiație electromagnetică cu frecvența cuprinsă între 3×10^{16} Hz și 3×10^{20} Hz și energia în domeniul 100 eV – 1 MeV. Razele X au suficientă energie pentru a ioniza atomi și a rupe legăturile moleculare.

Razele X cu energii mai mari (peste 30 keV) pot penetra obiecte relativ groase fără a fi absorbite sau împrăștiate. Această proprietate a făcut ca razele X să fie utilizate la investigarea interiorului obiectelor și vizualizarea interiorului corpurilor opace. Cele mai cunoscute aplicații sunt în domeniul medical (radiografia și tomografia medicală), domeniul securității (scanarea bagajelor), dar și în variate domenii industriale (defectoscopia prin radiografie și tomografie industrială).

2.2 Producerea razelor X

Cea mai comună metodă de generare a razelor X este prin bombardarea unui metal cu particule încărcate electric (electroni sau ioni). Un tub de raze X este un tub vidat în care electronii sunt eliberați dintr-un filament străbătut de un curent electric cu intensitate mare și accelerați într-un câmp electric puternic (de ordinul kV) către un anod metalic. La ciocnirea electronilor cu atomii anodului o parte din energia cinetică a electronilor este convertită în radiație (numai o mică parte a energiei cinetice este convertită în radiație (<0.5%), cea mai mare parte fiind convertită în căldură) (Johns, Cunningham 1986).

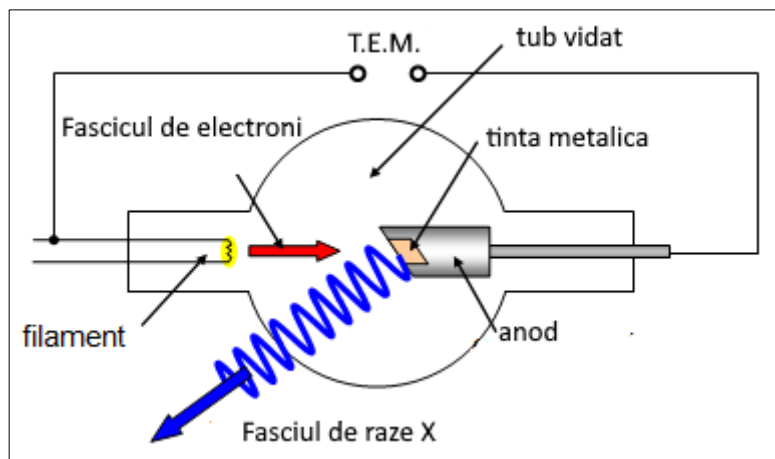


Figura 2.2.1: Schema unui tub de raze X.

Sursa imagine <http://www.schoolphysics.co.uk/>

Într-un tub de raze X au loc două mecanisme de emisie a razelor X:

Un electron ionizează atomul țintei scoțând un electron de pe un nivel interior al atomului. În acest caz se va produce o rearanjare a electronilor de pe paturile superioare, aceștia ocupând nivelele inferioare. Aceasta rearanjare este însoțită de emisia de cuante

cu energia corespunzătoare diferențelor dintre nivelele energetice. Radiația astfel emisă se numește radiație caracteristică, iar spectrul este discret.

La trecerea prin vecinătatea nucleului electronii relativști sunt frânați în urma interacției coulombiene cu electronii atomici. Energia cinetică pierdută se transformă în cuante, radiația astfel emisă se numește radiație de frânare sau *bremsstrahlung* și are un spectru continuu.

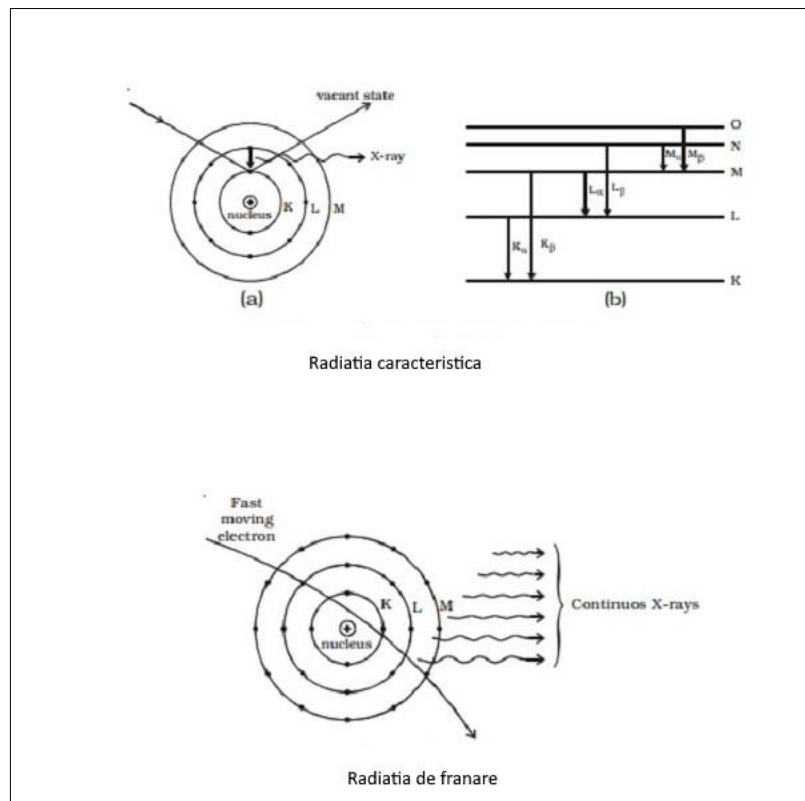


Figura 2.2.2: Mecanisme de producere a razelor X: Radiația caracteristică și radiația de frânare

Sursa imagine: http://www.readorrefer.in/article/X-ray-spectra---continuous-and-characteristic-X-ray-spectra_2935/

Spectrul tipic al unui tub de raze X (Figura 2.2.3) este combinația celor două mecanisme.

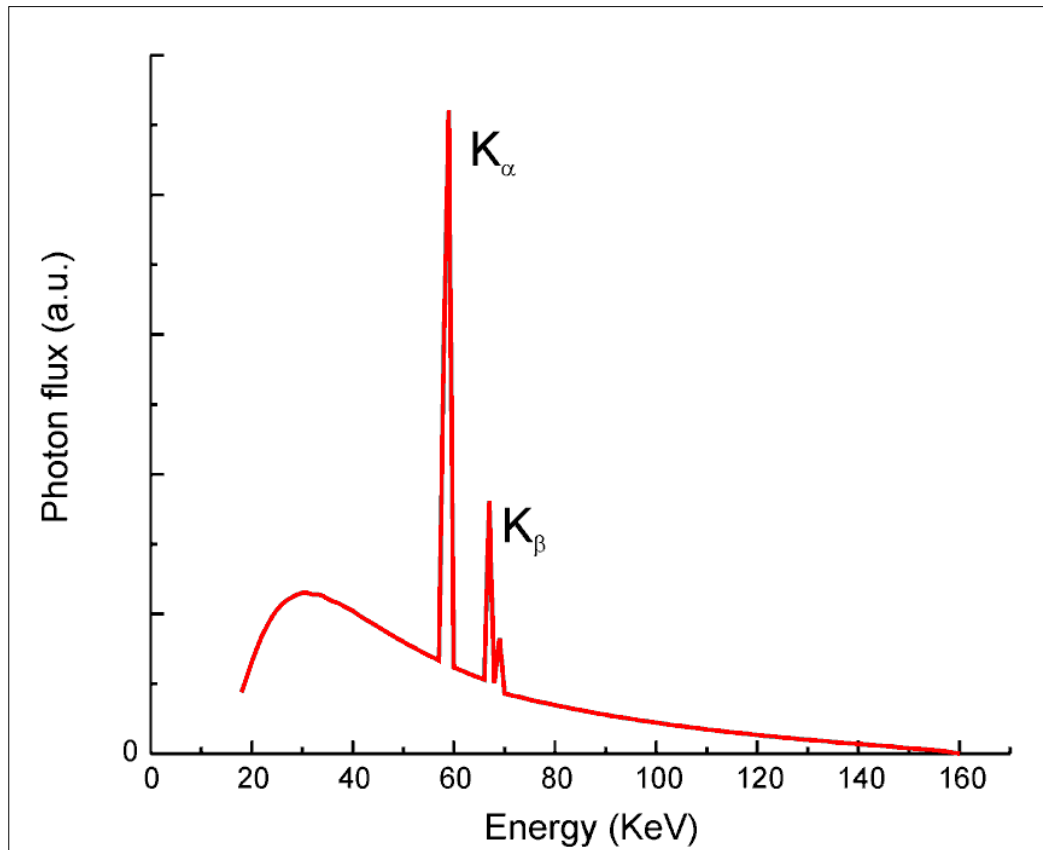


Figura 2.2.3: *Spectrul tipic al unui tub de raze X. Picurile K_α și K_β corespund mecanismului radiației caracteristice*

În alte dispozitive pentru generarea electronilor în locul filamentului încălzit se folosește un cristal piroelectric supus unor variații ciclice de temperatură (răcire-încălzire) (Nagaychenko, Sanin, Yegorov, Yegorov 2003).

Cristalele pyroelectrice generează electroni la schimbările de temperatura cu energii care pot atinge 170 keV (Rosenman, Shur, Krasik, Dunaevsky 2000).

Razele X pot fi de asemenea produse și cu ajutorul Synchrotronului – un accelerator de particule care forțează electronii să se miște pe o traiectorie circulară cu un câmp magnetic.

Accelerația unghiulară a particulelor electronilor relativști este cea care generează radiația electromagnetică numită și radiație synchrotron. Spectrul radiației synchrotron este continuu (Bordovitsyn 1999)

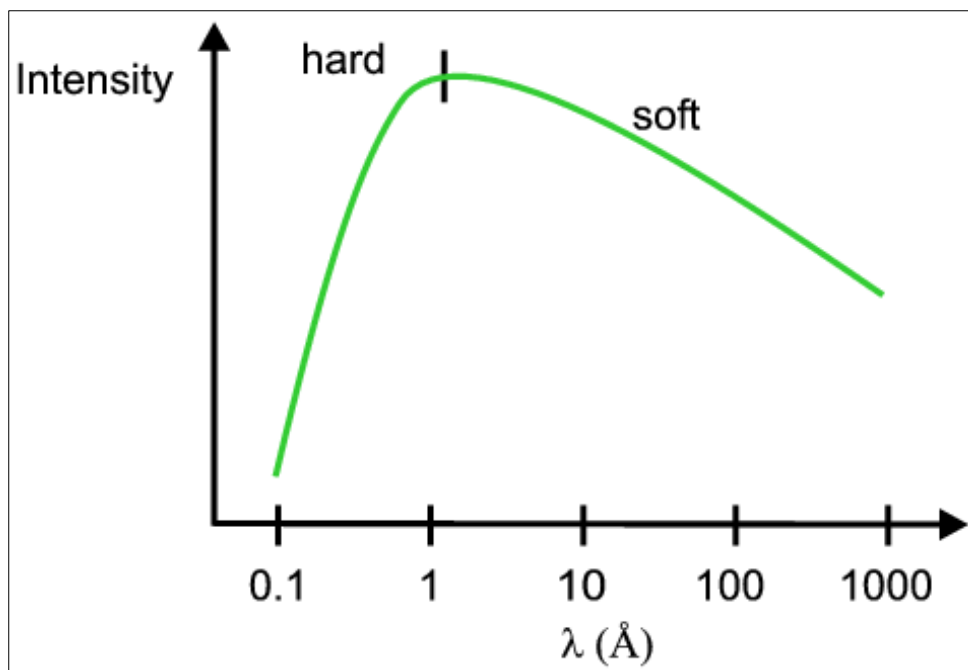


Figura 2.2.3: *Spectrul radiației synchrotron.*

Sursa imagine: <http://pd.chem.ucl.ac.uk/pdnn/inst2/prop.htm>

3. Fenomene fizice - interacția razelor X cu substanța

3.1 Atenuarea radiației

Pentru analiza fenomenelor fizice este utilă examinarea cazului unui fascicul îngust monocromatic de radiații trecând printr-un material omogen. Așa cum explică Hubbell (Hubbell 1999), variația relativă a intensității radiației este proporțională cu grosimea materialului. Constanta de proporționalitate este coeficientul de atenuare masic (μ/ρ):

$$-\frac{dI}{I} = \frac{\mu}{\rho} dx \quad (3.1)$$

Ecuția 3.1 poate fi integrată, obținându-se relația:

$$I(x) = I_0 \int_0^x e^{-\left(\frac{\mu}{\rho}\right)x} dx \quad (3.2)$$

În cazul în care materialul străbătut este omogen ($\mu=\text{constant}$) ecuația 3.2 devine:

$$I(x) = I_0 e^{-\mu x} \quad (3.3)$$

relație cunoscută ca Legea Beer–Lambert.

Coeficientul liniar de atenuare este legat de secțiunea eficace atomică de interacțiune a radiației notată σ , prin relația:

$$\mu = \sigma n_a \quad (3.4)$$

unde n_a reprezintă concentrația atomică a materialului:

$$n_A = \rho \frac{N_A}{A} \quad (3.5)$$

ρ este densitatea, N_A numărul lui Avogadro și A masa atomică.
Ecuația 3.3 se mai scrie și sub forma:

$$I = I_0 e^{-\chi} \quad (3.6)$$

unde χ se numește parametru de atenuare.

În general, interacțiunile fotonilor cu materia, care au ca rezultat absorbția sau împrăștierea fotonilor individuali din fascicolul primar de radiație X sau gama pot fi clasificate ținând cont de :

- tipul țintei cu care interacționează fotonii, precum electroni, atomi sau nuclee ;
- tipul evenimentului care are loc, respectiv împrăștiere, absorbție, formare de perechi, etc.

Conform clasificării interacțiunilor elementare ale fotonilor cu materia făcută de J.H. Hubbell acestea sunt prezentate în Tabelul 3.1.

Tabelul 3. 1: Clasificarea interacțiilor fotonilor cu substanța (Hubbell, 2000)

Tipul interacției	Absorbție	Împrăștiere	
Interacția cu		Elastica (coerenta)	Inelastica (necoerenta)
Electroni atomici	Efect fotoelectric $\sigma \sim Z^4$ (energii joase) $\sigma \sim Z^5$ (energii înalte)	Împrăștiere Rayleigh $\sigma_R \sim Z^2$ (limita energiilor joase)	Împrăștiere Compton $\sigma_C \sim Z$
Nucleoni	Reacții fotonucleare (γ, n), (γ, p) Fotofisiune, etc ($E \geq 10$ MeV)	Împrăștiere nucleară elastică (γ, γ) $\sim Z^2$	Împrăștiere nucleară inelastică (γ, γ)
Câmpul electric din jurul particulelor încărcate	Producere perechi electron-pozitron în câmpul nucleului, $\sigma_p \sim Z^2$ ($E \geq 1.02$ MeV)	Împrăștierea Delbruck $\sim Z^4$	
	Producere perechi electron-pozitron în câmpul electronului $\sigma_p \sim Z$ ($E \geq 2.04$ MeV)		
	Producere perechi nucleon-antinucleon. ($E \geq 3$ GeV)		
Mezoni	Producerea fotomezonului ($E \geq 150$ MeV)	Modificare (γ, γ)	

3.2 Efectul fotoelectric

Efectul fotoelectric constă în absorbția integrală a unui foton incident de către un electron legat de atom. Fotonul incident este absorbit dispărând integral, iar electronul este ejectat de atom.

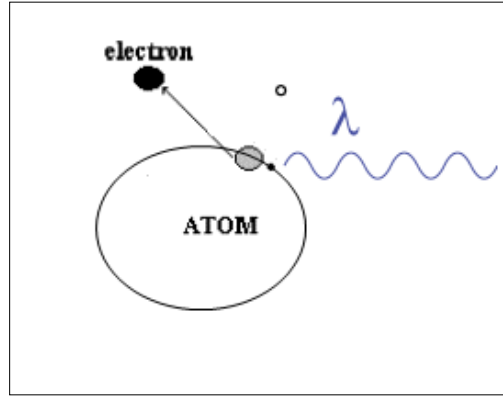


Figura 3.1.1: *Efectul Fotoelectric*

Electronul ejectat transportă astfel energia fotonului, mai puțin energia de legătură a electronului în atom.

$$E_{electron} = h\nu - W_{legatura} \quad (3.2.1)$$

Electronii păturii K, care sunt cel mai puternic legați, au probabilitatea cea mai mare de a produce absorbția fotoelectrică în domeniul energetic al razelor X.

Energia de prag

Producerea efectului fotoelectric este condiționată de energia fotonului incident, care trebuie să fie mai mare decât energia de legătura a electronilor.

$$h\nu \geq W_{legatura} \quad (3.2.2)$$

Secțiunea eficace

Secțiunea eficace de împrăștiere pentru efectul fotoelectric atomic poate fi calculată cu o precizie buna utilizând formalismul cuantic și teoria perturbațiilor de ordinul I.

Aceasta a fost calculată inițial de Scofield ([Scofield 1973](#)) fără renormare, iar soluția renormată ulterior calculată de Hubbell ([Hubbell, Gimm, Overbo 1980](#)).

Se calculează probabilitatea de tranziție de la o stare inițială, care constă într-un electron legat cu funcția de undă de forma $e^{-r/a}$ unde a este raza orbitei Bohr și un foton

incident cu funcția de unda $e^{ik \cdot r}$, la o stare finală cu un electron liber cu funcția de unda de forma $e^{ip \cdot r/\hbar}$.

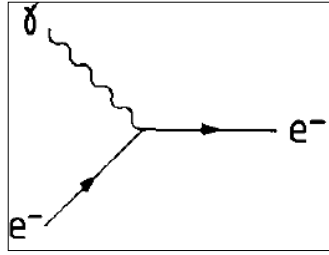


Figura 3.1.2: Diagrama Feynman pentru efectul Fotoelectric

Secțiunea eficace diferențială este (Sidney 2006)

$$\frac{d\sigma_{FE}}{d\Omega} = 4\sqrt{2} \frac{r_e^2 Z^5}{(137)^4} \left(\frac{m_e c^2}{\hbar \omega} \right)^{7/2} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{\left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta \right)^4} \quad (3.2.3)$$

Integrând relația 2.1.2 obținem secțiunea totală:

$$\sigma_{FE} = 4\sqrt{2} \sigma^0 \frac{Z^5}{(137)^4} \left(\frac{m_e c^2}{\hbar \omega} \right)^{7/2} \quad (3.2.4)$$

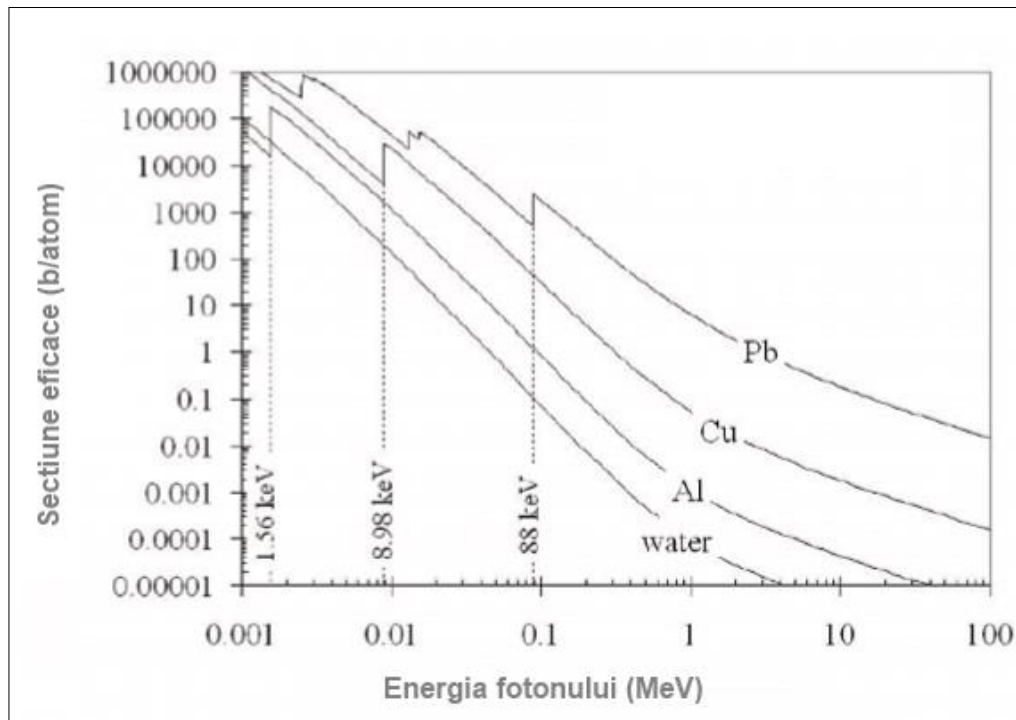


Figura 3.2.3: Secțiunea eficace a efectul fotoelectric pentru diverse materiale

Sursa imagine: physics.queensu.ca <http://www.physics.queensu.ca/~phys352/lect17.pdf>

La energii mici secțiunea eficace este proporțională cu E^{-1} , iar la energii mari este proporțională cu $E^{-3/2}$.

3.3 Efectul Compton (împrăștierea necoerenta)

Efectul Compton constă în împrăștierea unui foton pe un electron liber sau slab legat, după interacțiune fotonul modificându-și energia și direcția de propagare, iar electronul primind un anumit impuls.

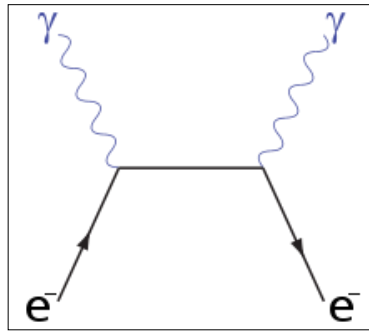


Figura 3.3.1: Diagrama Feynman pentru efectul Compton

Secțiunea eficace

În cea mai mare parte a domeniului energetic în care împrăștierea Compton are o contribuție majoră la secțiunea eficace totală, este aplicabilă teoria Klein-Nishina (electrodinamică cuantică, perturbații de ordinul I):

$$\frac{d\sigma_C}{d\Omega} = F_{KN} \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2 \theta) \quad (3.3.1)$$

$$F_{KN} = \left(\frac{1}{1+A(1-\cos\theta)} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{A(1-\cos\theta)^2}{[1+A(1-\cos\theta)](1+\cos^2\theta)} \right\} \quad (3.3.2)$$

unde A este

$$A = \frac{h\nu}{m_e c^2} \quad (3.3.3)$$

Depărtarea de la aceasta teorie are loc la energii joase datorită efectelor de legătura a electronilor în atom și la energii înalte datorită posibilității emisiei unui foton adițional (efectul Compton dublu).

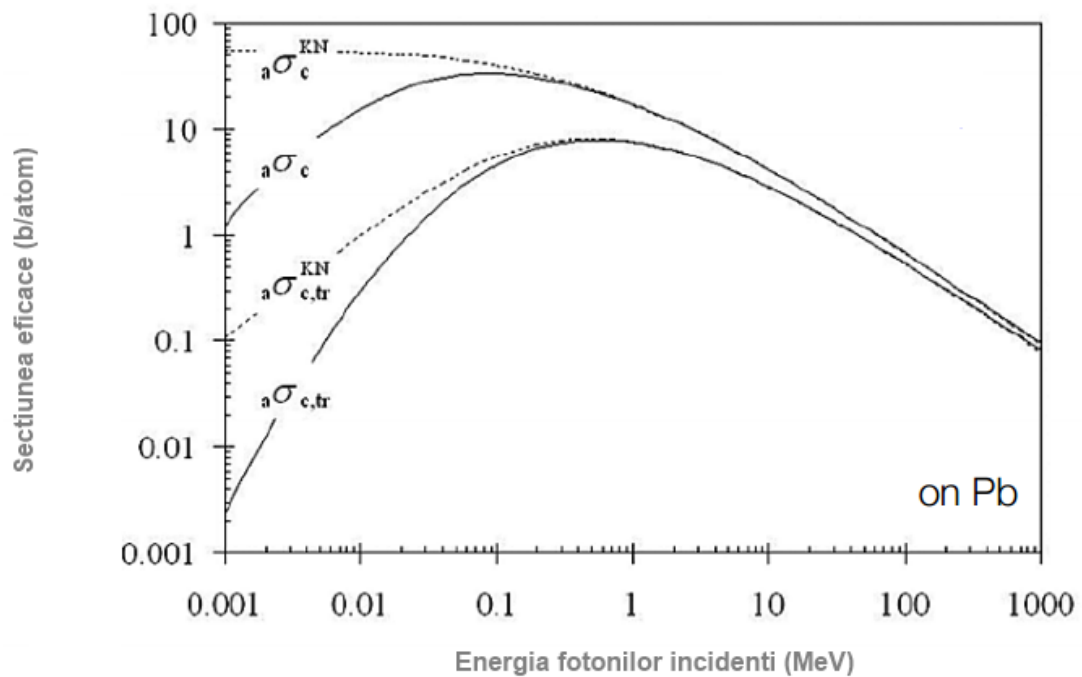


Figura 3.3.2: Secțiunea eficace și transferul de energie pentru efectul Compton.

Sursa imagine: physics.queensu.ca <http://www.physics.queensu.ca/~phys352/lect17.pdf>

Practic secțiunea eficace a efectului Compton nu depinde de numărul atomic Z al țintei. Dependența de energie: secțiunea eficace atomică a împrăștierei Compton este la energii înalte invers proporțională cu energia fotonilor :

$$\sigma_c \propto E^{-1} \quad (3.3.4)$$

3.4 Împrăștierea Rayleigh (împrăștierea coerentă)

Împrăștierea Rayleigh este procesul în care fotonii incidenți sunt împrăștiați elastic de electronii legați ai atomului. Ca urmare a interacției, atomul nu este nici excitat și nici ionizat.

În urma împrăștierii Rayleigh fotonii nu își modifică energia, din acest motiv împrăștierea se numește împrăștiere coerentă, iar fenomenul este o consecință a caracterului ondulator al radiației.

Împrăștierea coerentă se produce la energii mici și este frecventă la împrăștierea fotonilor pe substanțe cu număr atomic Z mare.

Secțiunea eficace de împrăștiere pentru fotonii nepolarizați este (Hubble 1999):

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} = \pi r^2 e^2 \int_{-1}^1 (1 + \cos^2 \theta) [F(q, Z)]^2 d(\cos \theta) \quad (3.4.1)$$

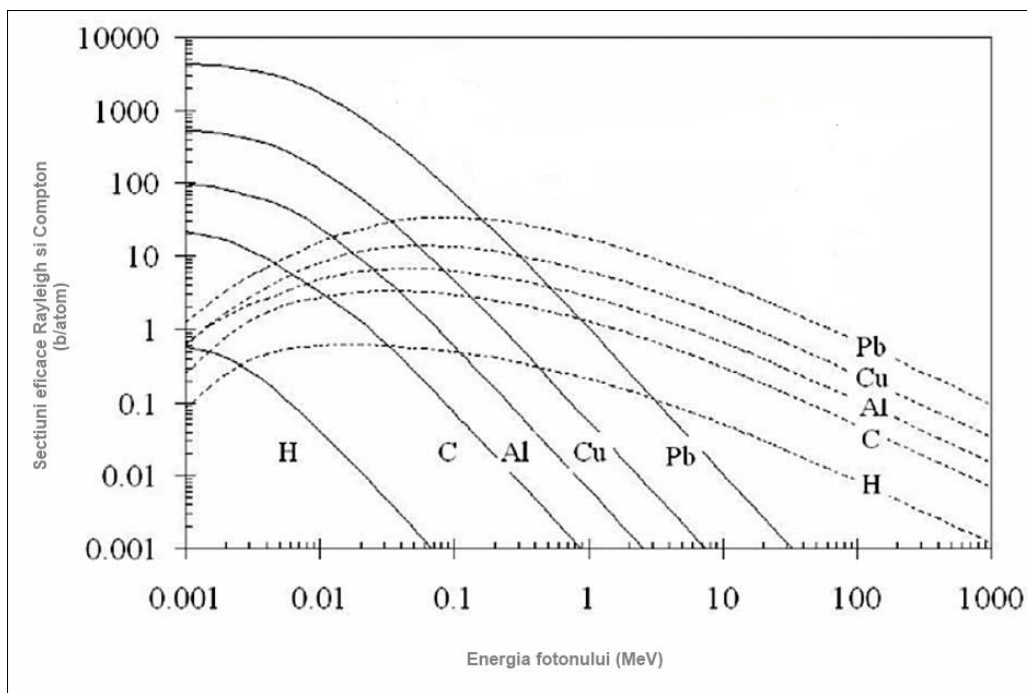


Figura 3.3.1: Secțiunea eficace pentru împrăștierea Rayleigh și Compton

Sursa imagine: physics.queensu.ca <http://www.physics.queensu.ca/~phys352/lect17.pdf>

3.5 Efectul generare de perechi și generarea de tripleți

Ambele efecte se produc prin interacția unui foton cu un câmp electric puternic produs de nucleul atomic (în cazul generării de perechi) sau de un electron în cazul generării de tripleți.

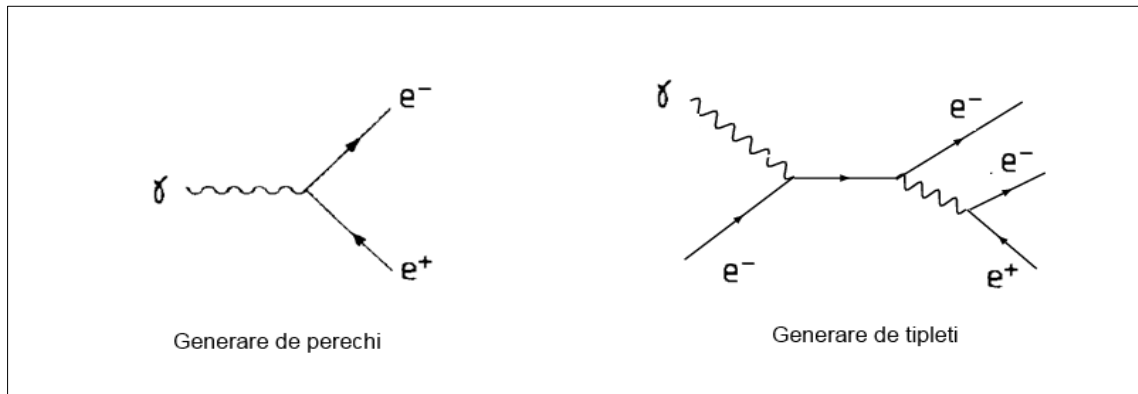


Figura 3.5.1: Diagramele Feynman pentru generare de perechi respectiv generarea de tripleți.

În ambele efecte energia de prag a fotonului incident este:

$$(h\nu)_{min} = 2m_0c^2 \left(1 + \frac{2m_0c^2}{2Mc^2} \right) \quad (3.5.1)$$

Unde m_0 este masa de repaus a electronului, iar M este masa nucleului în cazul generării de perechi sau masa electronului în cazul generării de tripleți:

$M \equiv M_{nucleu}$ în cazul generării de perechi

$M \equiv m_0$ în cazul generării de tripleți

Din relația 2.4.1 se deduce în mod evident că energia minimă a fotonului incident pentru a fi posibilă reacția este:

$$E_{prag} = 2m_0c^2 = 1.022\text{MeV} \quad (3.5.2)$$

Secțiunea eficace de împrăștiere la generarea de perechi

Bethe și Heitler (1934) au derivat expresia secțiunii atomice diferențiale pentru generarea de perechi:

$$\frac{dK_{GP}}{dT_e} = \sigma_0 \frac{Z^2}{T_{disp}} P \quad (3.5.3)$$

Unde σ_0 este definită:

$$\sigma_0 \approx \frac{3^2}{137} \quad (3.5.4)$$

cu r_0 reprezentând raza clasică a electronului.

Cantitate P este o funcție care depinde puternic de energia fotonului, aproape independentă de numărul atomic Z .

T_{disp} reprezintă energia cinetică disponibilă:

$$T_{disp} = h\nu - (h\nu)_{min} \quad (3.5.5)$$

Integrând relația 3.4.3 obținem:

$$\sigma_{GP} = \sigma_0 Z^2 \bar{P} \quad (3.5.6)$$

Dacă considerăm interacția ca fiind îndepărtată de nucleu, electronii orbitali vor produce o ecranare a câmpului electric nuclear. În cazul în care această ecranare este neglijată, P nu depinde de Z și avem doar o ușoară dependență logaritmică de energie:

$$P \approx 28 \ln \left(\frac{h\nu}{m_0 c^2} \right) - \frac{218}{27} \quad (3.5.7)$$

În cazul în care ecranarea nu este neglijată, P depinde slab (logaritmic) de Z și practic nu depinde de energie:

$$P \approx \frac{28}{9} \ln(183 Z^{-1/3}) - \frac{2}{27} \quad (3.5.8)$$

Există o mare similaritate între generarea de perechi și împrăștierea Compton.

$$\sigma_{GP} = \frac{r_0}{137} Z^2 \left(\frac{28}{9} \ln(183 Z^{-1/3}) - \frac{2}{27} \right) \quad (3.5.9)$$

Secțiunea eficace de împrăștiere la generarea de tripleți

Expresia secțiunii diferențiale este similară cu cea a generării de perechi cu excepția dependenței de Z și a unui factor C legat de schimbul de electron:

$$\sigma_{GTrip} = \frac{\sigma_{GP}}{ZC} = \frac{\sigma_0 Z \bar{P}}{C} \quad (3.5.10)$$

Unde dependența factorului C de Z este neglijabilă:

$$\begin{array}{ll} C = 1.6 \pm 0.2 & \text{pentru } 5\text{MeV} < h\nu < 20\text{ MeV} \\ C = 1.1 \pm 0.1 & \text{pentru } 20\text{MeV} < h\nu < 100\text{ MeV} \end{array}$$

3.6 Fotoabsorbția nucleară

În reacția de fotoabsorbție nucleară un foton este absorbit de nucleu. După absorbție pot fi emiși neutroni sau fotoni, iar nucleul va suferi transformări.

În general energia de prag a fotonilor incidenți pentru producerea acestor reacții este mai mare de 1 MeV, iar probabilitatea de producere a efectului este mult mai scăzută decât a celorlalte efecte.

3.7 Coeficientul de atenuare pentru substanțe compuse și amestecuri

Așa cum s-a arătat, pentru elementele pure secțiunea eficace și implicit coeficientul de atenuare variază cu energia și cu numărul atomic Z .

În general procesele sunt independente unul de celalalt și contribuția fiecăruia la secțiunea eficace reprezintă un factor aditiv (Hubbel 1999).

$$\sigma_{total} = \sigma_{Foto} + \sigma_{Compton} + \sigma_{Rayleigh} + \sigma_{GPAtom} + \sigma_{GTrip} + \sigma_{FotoNucl} \quad (3.7.1)$$

Această relație se aplică (conform ecuației 2.2) și pentru coeficientul total de atenuare linear,

$$\mu_{total} = \mu_{Foto} + \mu_{Compton} + \mu_{Rayleigh} + \mu_{GPAtom} + \mu_{GTrip} + \mu_{FotoNucl} \quad (3.7.2)$$

și în mod evident și coeficienților de atenuare masici:

$$\mu_{(m)total} = \mu_{(m)Foto} + \mu_{(m)Compton} + \mu_{(m)Rayleigh} + \mu_{(m)GPAtom} + \mu_{(m)GTrip} + \mu_{(m)FotoNucl} \quad (3.7.3)$$

În figura 3.7.1 sunt reprezentate curbele contribuțiilor efectelor la coeficientul de atenuare masic total, putând fi remarcate domeniile energetice în care efectele sunt relevante.

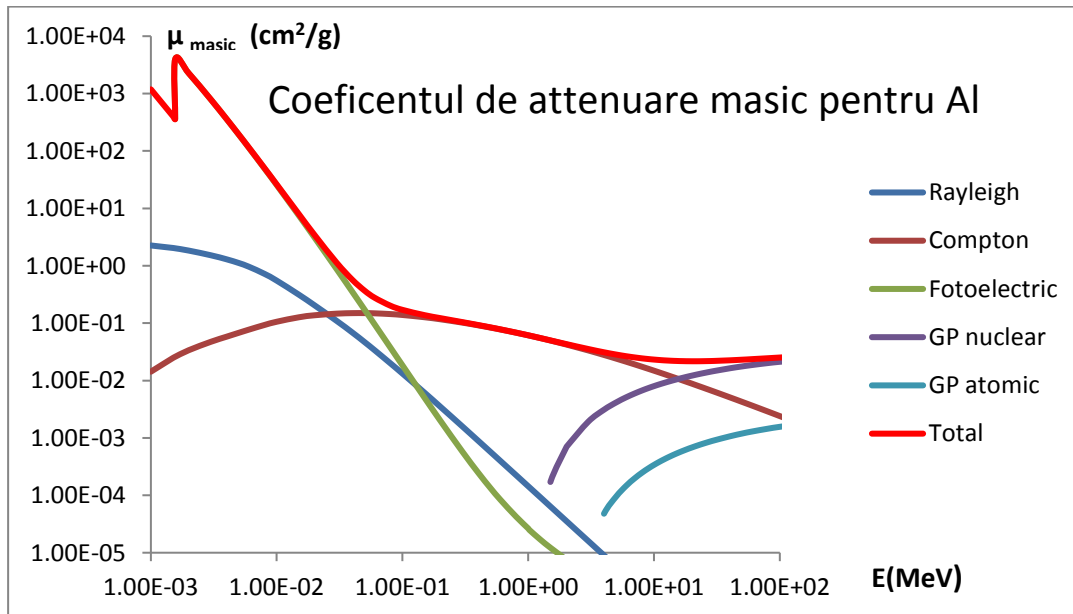


Figura 3.7.1: Reprezentarea curbelor μ_{masic} în funcție de energia fotonilor la Aluminium ($Z=23$).

Tabelul 3.7.2: Contribuția efectelor diferite la coeficientul masic de atenuare pentru Aluminium ($Z=23$) .

Energia MeV	Imprastiere		Fototelectric	Generare de perchi	
	Rayleigh	Compton		In camp nuclear	In camp electric
	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g	cm ² /g
5.00E-03	1.12E+00	6.79E-02	1.92E+02	0.00E+00	0.00E+00
6.00E-03	9.64E-01	7.70E-02	1.14E+02	0.00E+00	0.00E+00
8.00E-03	7.23E-01	9.29E-02	4.95E+01	0.00E+00	0.00E+00
1.00E-02	5.51E-01	1.06E-01	2.56E+01	0.00E+00	0.00E+00
1.50E-02	3.14E-01	1.27E-01	7.52E+00	0.00E+00	0.00E+00
2.00E-02	2.05E-01	1.37E-01	3.10E+00	0.00E+00	0.00E+00
3.00E-02	1.10E-01	1.46E-01	8.72E-01	0.00E+00	0.00E+00
4.00E-02	6.86E-02	1.49E-01	3.50E-01	0.00E+00	0.00E+00
5.00E-02	4.68E-02	1.50E-01	1.72E-01	0.00E+00	0.00E+00
6.00E-02	3.39E-02	1.48E-01	9.56E-02	0.00E+00	0.00E+00
8.00E-02	2.01E-02	1.44E-01	3.78E-02	0.00E+00	0.00E+00
1.00E-01	1.32E-02	1.39E-01	1.84E-02	0.00E+00	0.00E+00
1.50E-01	6.12E-03	1.27E-01	4.99E-03	0.00E+00	0.00E+00
2.00E-01	3.50E-03	1.17E-01	2.00E-03	0.00E+00	0.00E+00
3.00E-01	1.58E-03	1.02E-01	5.74E-04	0.00E+00	0.00E+00
4.00E-01	8.93E-04	9.16E-02	2.48E-04	0.00E+00	0.00E+00
5.00E-01	5.73E-04	8.37E-02	1.34E-04	0.00E+00	0.00E+00
6.00E-01	3.99E-04	7.75E-02	8.40E-05	0.00E+00	0.00E+00
8.00E-01	2.25E-04	6.81E-02	4.25E-05	0.00E+00	0.00E+00
1.00E+00	1.44E-04	6.13E-02	2.64E-05	0.00E+00	0.00E+00
1.02E+00	1.38E-04	6.06E-02	2.49E-05	0.00E+00	0.00E+00
1.25E+00	9.21E-05	5.48E-02	1.69E-05	3.13E-05	0.00E+00
1.50E+00	6.40E-05	4.98E-02	1.22E-05	1.71E-04	0.00E+00
2.00E+00	3.60E-05	4.25E-02	7.63E-06	6.75E-04	0.00E+00
2.04E+00	3.44E-05	4.20E-02	7.38E-06	7.27E-04	0.00E+00
3.00E+00	1.60E-05	3.35E-02	4.22E-06	1.92E-03	1.17E-05
4.00E+00	9.00E-06	2.79E-02	2.88E-06	3.10E-03	4.78E-05
5.00E+00	5.76E-06	2.41E-02	2.18E-06	4.15E-03	9.52E-05
6.00E+00	4.00E-06	2.13E-02	1.74E-06	5.10E-03	1.46E-04
7.00E+00	2.94E-06	1.92E-02	1.45E-06	5.94E-03	1.97E-04
8.00E+00	2.25E-06	1.74E-02	1.25E-06	6.69E-03	2.47E-04
9.00E+00	1.78E-06	1.60E-02	1.09E-06	7.38E-03	2.94E-04
1.00E+01	1.44E-06	1.48E-02	9.66E-07	8.00E-03	3.39E-04

În studiul nostru energia fotonilor incidenți va fi de sub 1 MeV, iar in acest domeniu generarea de perechi sau tripleți și fotoabsorbția nucleară sunt irelevante.

În figura 3.7.2 este reprezentat coeficientul de atenuare masic total, pentru mai multe materiale.

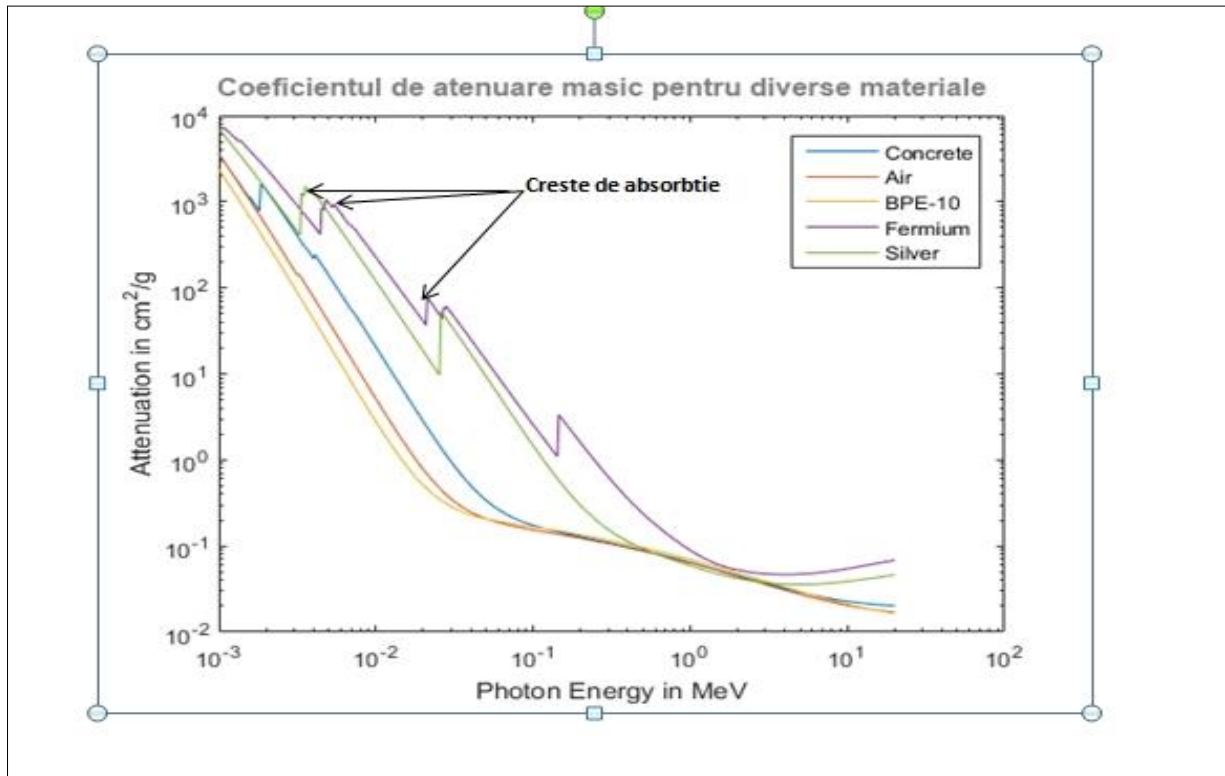


Figura 3.7.2: Reprezentarea curbelor μ_{masic} în funcție de energie pentru diverși atomi.

Sursa imagine: File Exchange – Matlab

https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/12092-photonattenuation-2/content/html/PhotonAttenuation_Tutorial.html

Variația atenuării în funcție de energie este diferită de la un material la altul, această diferență stând la baza metodelor de identificare a materialelor cu ajutorul transmisiei razelor X.

Pentru substanțe chimice compuse și amestecuri omogene coeficientul de atenuare se determină ca fiind media ponderată .

$$\frac{\mu}{\rho} = \sum_i w_i \frac{\mu_i}{\rho_i} \quad (3.7.4)$$

Unde w_i reprezintă fracția masică a elementului constituent i din substanța compusă studiată (NIST, 2016).

4. Metode de identificare a materialelor utilizând razele X

După cum am arătat în capitolul precedent, coeficientul de atenuare masic al razelor X depinde de energia fotonilor incidenți și de natura materialului.

Pentru substanțele elementale (alcătuite din elemente pure) dependența de material se exprimă prin dependența de numărul atomic Z .

Pentru substanțele compuse omogene coeficientul de atenuare masic este conform relației (3.7.4) media ponderată a coeficienților masici elementali.

Metodele existente de determinare a materialelor cu ajutorul razelor X se bazează pe analiza dependenței spectrale a coeficientului masic de atenuare.

4.1 Fluorescența cu raze X (X-Ray Fluorescence -XRF)

Această metodă utilizează surse de raze X de energii mici, identificând materialele cu ajutorul creștelor de absorbție (vezi figura 3.7.2). Datorită energiilor mici se detectează radiația împrăștiată înapoi la suprafața obiectului.

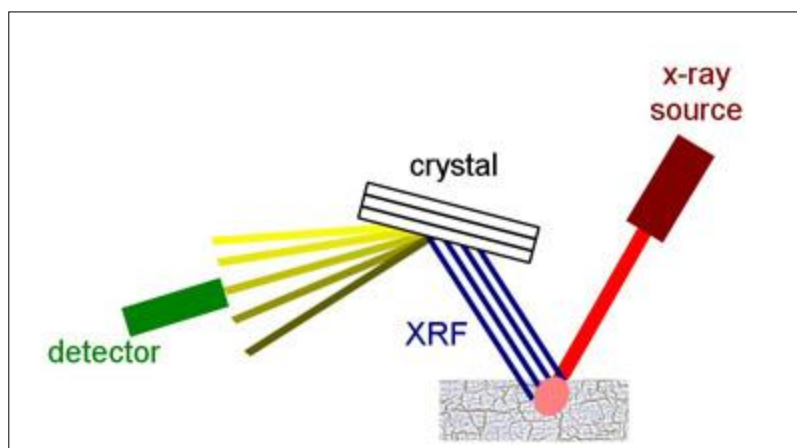


Figura 4.1.1: Schema dispozitivului de fluorescență cu raze X

Sursa imagine: <https://xos.com/technologies/xrf/>

Pentru detecție se folosește un detector spectroscopic sau un cristal difractor, care permite selecția canalului energetic prin selecția unghiului fascicolului împrăștiat. Energia creștelor de absorbție corespunde energiei straturilor energetice interioare, mai puternic legate (în general stratul K), aceasta fiind de ordinul keV, în domeniul razelor X moi. Informația legată de energia straturilor energetice ale atomilor este extrem de relevantă pentru identificarea atomilor, XRF fiind o tehnică cu rezultate precise similare spectroscopiei. Dezavantajul metodei este legat de energia joasă a razelor X, insuficientă pentru penetrarea materialelor. XRF este aplicată în general la scanările de suprafață (Beckhoff, 2006, Jenkins, 2000).

4.2 Difrakția cu raze X (XRD)

Această tehnică aplicată încă din 1913 de **W.H. Bragg** la studiul cristalelor, a cunoscut recent noi dezvoltări, fiind aplicată și pentru determinarea materialelor care nu au structură cristalină (materiale amorf).

Metoda se bazează pe caracterul ondulatoriu al razelor X.

Un fascicol colimat de raze X este direcționat către obiect. Intensitatea radiației reflectate este măsurată cu un detector spectroscopic în timp ce sursa și detectorul se rotesc.

Interferența constructivă se realizează când razele incidente satisfac ecuația Bragg:

$$n\lambda = 2 d \sin (\theta) \quad (4.2.1)$$

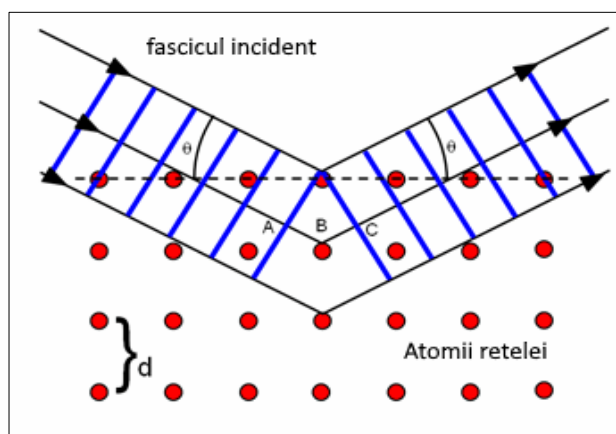


Figura 4.2.1: Difrakția razelor X – condiția Bragg $n\lambda = 2 d \sin (\theta)$

Spre deosebire de substanțele cristaline, spectrul de difracție al substanțelor amorf este continuu (Figura 4.2.2).

Pentru un gaz ideal sau un lichid ideal probabilitatea de a găsi o moleculă într-un interval de timp în unitatea de volum este constantă. Astfel aceste sisteme sunt considerate din punct de vedere macroscopic uniforme și izotrope. Orice ordonare locală a moleculelor se poate referi la molecule izolate și este strict legată de structura internă a moleculelor.

În realitate (cazul sistemelor neideale) se vor forma aranjamente dense și rigide de molecule în care poziția relativă a moleculelor apropiate e dictată de forțele dintre molecule. Aceste structuri vor dicta forma spectrului de difracție.

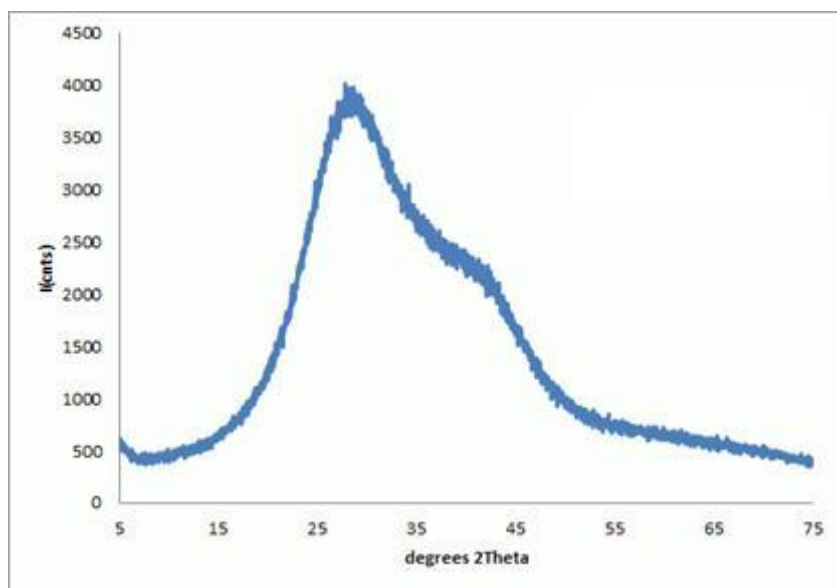


Figura 4.2.2: *Spectrul de difracție măsurat pentru o substanță - H₂O în stare lichidă*

Sursa imagine: <http://tricliniclabs.com/directory/solid-state-development-services/physical-and-analytical-chemistry/amorphous-materials-and-solid-dispersions-characterization-development.html>

4.3 Tehnici de analiză automata a imaginii

Obiectele periculoase din bagaje pot fi identificate după forma lor. Metoda tradițională de investigare constă în scanarea obiectelor cu ajutorul razelor X și analiza imaginilor de către un operator. Această metodă a fost elaborată în 1970. Treptat obiectele periculoase au devenit tot mai greu de identificat, implicând necesitatea introducerii unor tehnici mai avansate pentru detecție, care să permită detecția automata a obiectelor și materialelor periculoase.

Printre aceste tehnici se numără (Wilkie, Wood):

- Radiografia prin transmisie cu raze X
- Metode bazate pe împrăștierea înapoi (X-ray backscattering)
- Sisteme dual energy
- Tomografie computerizată

Sistemele tomografice cu raze X presupun mișcarea obiectului sau al ansamblului sursă-detector, obținându-se un număr mare de proiecții. Proiecțiile obținute sunt utilizate pentru reconstruirea imaginii secțiunii obiectului. Procesul de reconstrucție presupune utilizarea unor programe de calculator, existând mai mulți algoritmi pentru reconstrucție. În mare acești algoritmi se împart în următoarele familii:

- algoritmi analitici, care implică utilizarea unor funcții analitice de reconstrucție.
- algoritmi de reconstrucție algebrici, care implica rezolvarea sistemului de ecuații printr-un calcul matricial simplu
- algoritmi de reconstrucție iterativi, ce presupun minimizarea unei funcții depinzând de valorile proiecțiilor calculate la un pas al iterației și valorile proiecțiilor măsurate, printr-un proces iterativ convergent;

Procesul de reconstrucție are ca rezultat matricea coeficienților de atenuare liniari μ_{ij} asociată secțiunii obiectului scanat. Matricea coeficienților de atenuare poate fi reprezentată grafic cu nuanțe diferite de gri, obținându-se imaginea secțiunii.

Imaginile tomografice sunt interpretate în mod tradițional de un operator uman, dar dezvoltarea tehnicilor de analiză automată a imaginilor a permis înlocuirea operatorului uman cu programe informatice complexe capabile să distingă obiecte și texturi pe care ochiul uman nu le poate observa.

Astfel de tehnici sunt utilizate cu succes în medicină, microbiologie și geologie (Glasbey & Horgan 1995), dar și în sistemele de securitate.

În capitolul 8 vom prezenta în detaliu studiul realizat pentru caracterizarea materialelor investigând fragmente de roci extrase de la o adâncime 1844 m.

4.4 Determinarea numărului atomic efectiv - Z efectiv

După cum am explicat în capitolul 4, coeficientul de atenuare masică pentru o substanță elementală (substanța care are în compoziție un singur tip de atomi) depinde de numărul atomic Z și de energia fotonilor incidenți:

$$\mu_{masic}^a = f(Z, E) \quad (4.4.1)$$

În cazul unei substanțe compuse din mai mulți atomi coeficientul de atenuare masică depinde de energia fotonilor incidenți și de numărul atomic al fiecărui atom constituent, dar și de ponderea masică a fiecărui atom:

$$\mu_{masic}^{subst} = f(Z_1, Z_2 \dots Z_n, W_1, W_2, \dots, W_n, E) \quad (4.4.2)$$

Secțiunea eficace este:

$$\sigma_{subst} = \sum_{i=1}^n n_i \sigma_i \quad (4.4.3)$$

În acest caz este utilă definirea unui număr atomic efectiv **Z efectiv** care să caracterizeze proprietățile fundamentale ale substanței în termenii unei substanțe elementale.

Astfel, atomii unei molecule ar putea fi înlocuiți cu un număr egal de atomi identici, având numărul atomic în număr real (nu neapărat întreg) Z efectiv.

$$\sigma_{subst} = n\sigma_a = nZ_{eff} \sigma_e \quad (4.4.4)$$

Unde σ_a reprezintă secțiunea eficace atomică, iar σ_e secțiunea eficace electronică:

$$\sigma_a = \frac{1}{n} \sum_i n_i \sigma_i \quad (4.4.5)$$

$$\sigma_e = \frac{1}{n} \sum_i n_i \frac{\sigma_i}{Z_i} \quad (4.4.6)$$

σ_i reprezintă secțiunea eficace a fiecărui atom constituent, aceasta fiind legată de coeficientul de atenuare prin relația:

$$\sigma_i = \frac{A_i}{N_A} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i \quad (4.4.7)$$

Utilizând ecuațiile (4.4.7) și (4.4.5) obținem expresia numărului atomic efectiv:

$$Z_{eff} = \frac{\sum_i w_i A_i \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i}{\sum_j w_j \frac{A_j}{Z_j} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_i} \quad (4.4.8)$$

Unde w_i reprezintă fracția molară a constituentului i .

Astfel, legea atenuării pentru substanțele elementale ar putea fi aplicată și în cazul substanțelor compuse, înlocuind numărul atomic cu numărul atomic efectiv:

$$\mu_{masic}^{subst} = f(Z_{eff}, E) \quad (4.4.9)$$

Numărul atomic efectiv reprezintă un criteriu important pentru identificarea substanțelor ecuația 4.4.3 reduce substanțial numărul variabilelor în caracterizarea coeficientului de atenuare.

Există mai multe metode pentru evaluarea numărului atomic efectiv, una din cele mai populare parametrizări implică o simplă dependență de tip putere (Murty 1967):

$$Z = \sqrt[p]{\sum f_i Z_i^p} \quad (4.4.10)$$

Unde f_i sunt fracțiile electronice ale fiecărui element constituent, iar p este un număr real pozitiv. Mayneord a folosit valoarea 2,94 pentru exponentul p (Mayneord 1937).

Determinarea numărului atomic efectiv se bazează pe tehnici dual-energy și multi-energy, exploatând comportamentul spectral al coeficientului de atenuare.

Există două mari clase de sistemele dual-energy :

- sisteme care folosesc expunerea dublă;
- sisteme care folosesc o singură expunere și sisteme de detectori capabile să măsoare fluxul de fotoni în domenii de energii diferite.

Din clasa sistemelor cu expunere dublă fac parte sistemele care utilizează două surse cu spectre diferite și sistemele care utilizează un singur tub alimentat succesiv la tensiuni diferite (rapid kVp switching).

Din clasa sistemelor cu o singură expunere, cel mai simplu sistem de detecție constă din două straturi de detectori separate de un filtru. Astfel unul din straturile de detectori va înregistra fotonii din orice regiune a spectrului, iar celălalt strat va înregistra doar fotoni care reușesc să străbată filtrul – deci energia medie a radiației detectate de acest strat va fi mai mare (figura 4.4.1) . Acest efect se mai numește și întărirea radiației (*beam hardening effect*).

În ambele cazuri sunt utilizate două domenii energetice – domeniul energiilor joase (*LE*) și domeniul energiilor înalte (*HE*).

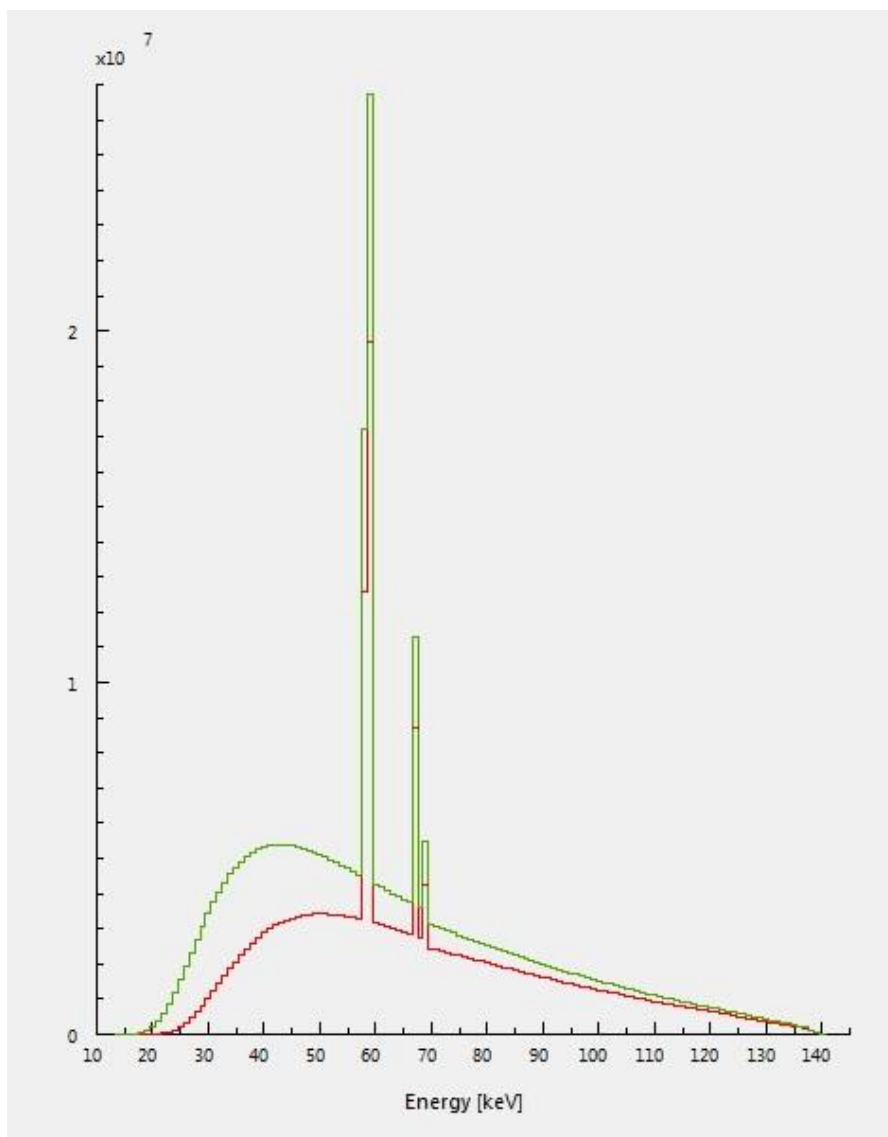


Figura 4.4.1: *Spectrul unui tub de raze X înainte (curba verde) și după (curba roșie) aplicarea unui filtru de aluminiu.*

Determinarea experimentală a numărului atomic efectiv Z presupune cunoașterea explicită a dependenței coeficientului de atenuare masiv de E și Z_{eff} , în ecuația (4.4.9). În majoritatea cazurilor se utilizează o expresie analitică care aproximează contribuția efectului fotoelectric și generarea de perechi, de exemplu:

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right) = \alpha(E)Z_{eff}^4 + \beta(E)Z_{eff} + \gamma(E)Z_{eff}^2 \quad (4.4.11)$$

Unde α , β și γ reprezintă contribuțiile individuale aduse de efectul fotoelectric, Compton și generare de perechi.

În cazul în care se folosesc surse cu energii mai joase de 1.2 MeV, contribuția efectului generare de perechi devine nula. In cazul surselor cu energii înalte ($E > 1.2 \text{ MeV}$) contribuția efectului fotoelectric este neglijabila.

Ecuția 4.4.11 poate fi scrisa individual pentru domeniile energetice **LE** si **HE**, rezultând un sistem de ecuații cu două necunoscute : ρ si Z_{eff} .

Densitatea poate fi eliminata imediat impartind cele doua ecuații:

$$\frac{\mu_{LE}}{\mu_{HE}} = \frac{\alpha_1 Z_{eff}^4 + \beta_1 Z_{eff} + \gamma_1 Z_{eff}^2}{\alpha_2 Z_{eff}^4 + \beta_2 Z_{eff} + \gamma_2 Z_{eff}^2} \quad (4.4.12)$$

Unde $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, \gamma_1, \gamma_2$ sunt valorile funcțiilor α, β, γ calculate in domeniul energiilor joase și al energiilor înalte.

Din expresia 4.4.12 se poate calcula numărul atomic efectiv după determinarea coeficientului linear de atenuare la energii joase și la energii înalte.

Această metodă permite atât determinarea numărului atomic efectiv cât și a densității substanței investigate (densitatea se obține înlocuind valoarea Z_{eff} in ecuația 4.4.11).

Perechea de variabile (ρ, Z_{eff}) este utilă pentru identificarea anumitor substanțe compuse, totuși există multe substanțe cu valori aproape identice atât ale densității cât și al numărului atomic efectiv.

În plus, variabilele Z si E nu pot fi separate în mod trivial în expresia coeficientului de atenuare, rezultând o dependență a numărului atomic efectiv ([Taylor, Smith, Dossing, Franich 2012](#)) Robust calculation of effective atomic numbers: The Auto-Zeff software, MEDICAL PHYSICS · APRIL 2012):

$$\mu_{masic}^{subst} = f(Z_{eff}(E), E) \quad (4.4.13)$$

Aplicatia AutoZeff ([Taylor et al 2012](#)) permite calculul rapid al numarului atomic efectiv, având la bază definia acestei cantități (ecuația 4.4.8).

In figura (4.4.2) este reprezentată dependența de energie a numarului atomic efectiv al apei calculat cu AutoZeff.

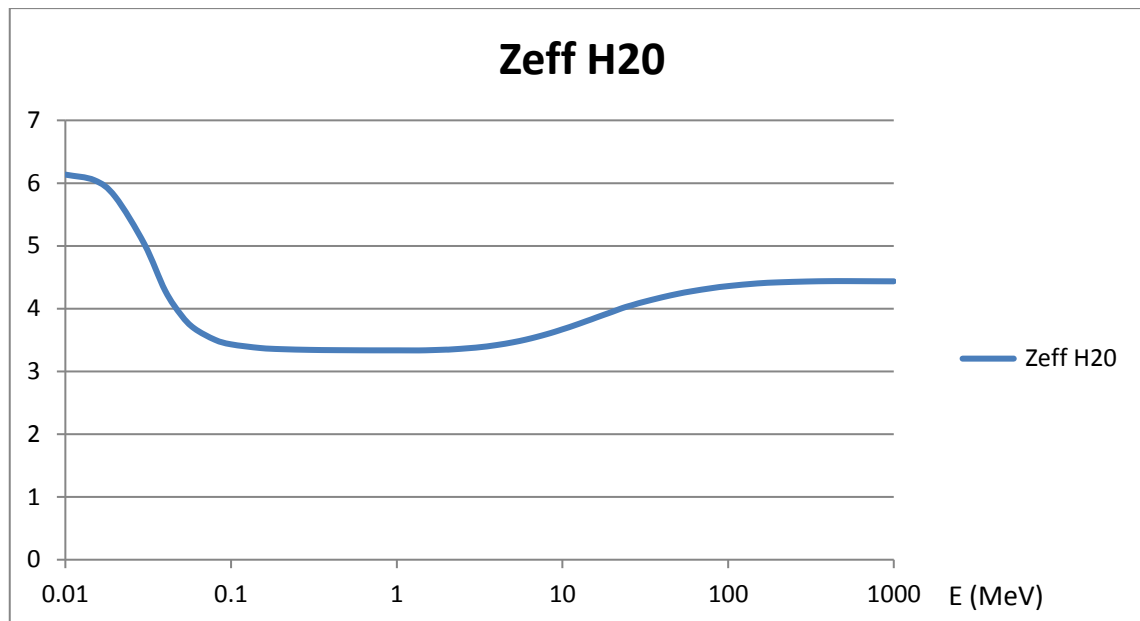


Figura 4.4.2: Variația numărului atomic efectiv al apei cu enegia, calculată cu *AutoZeff*.

Se poate constata ca deși Z efectiv nu este o constanta de material, există în general un domeniu energetic (0,5 - 5 MeV) în care Z efectiv variază foarte puțin cu energia.

În rezultatele experimentale enunțarea unei valori unice pentru Z efectiv este de fapt rezultatul medierii valorilor $Z_{eff}(E)$ cu ponderea spectrală a radiației incidente.

5. Analiza materialelor utilizând comportamentul spectral al transmisiei razelor X

În capitolul precedent am prezentat câteva metode pentru identificarea materialelor utilizând razele X. O proprietate importantă este caracterul spectral al atenuării, cu alte cuvinte dependența coeficientului de atenuare de energia fotonilor incidenți. Mai mult, această dependență diferă de la un material la altul, reprezentând un criteriu posibil pentru identificarea materialelor. Comportamentul spectral al atenuării stă la baza spectroscopiei de fluorescență cu raze X (XRF), dar și la baza metodelor care implică determinarea numărului atomic efectiv. Am amintit tehnica dual energy, care implică diverse dificultăți tehnice privind fie sursele de raze X fie sistemele de detecție. Dezvoltarea detectorilor spectroscopici de tip *Photon Counter* a deschis calea metodelor de analiză multi-energy. Un mare avantaj al acestor metode este faptul că tuburile clasice (descrise în capitolul 2.2) emit deja multi-energy. În cele mai multe cazuri tehnica multi-energy, este de fapt o extensie a metodelor dual-energy, prezentate în capitolul 4.4, utilizându-se parametrizări ale coeficienților de atenuare în funcție de energie. În acest capitol vom prezenta o metodă diferită, care implică formalismul algebrei lineare în determinarea materialelor.

5.1 Determinarea compoziției chimice pentru substanțe omogene

Considerăm cazul unui corp compus dintr-o substanță omogenă necunoscută.

Ne propunem ca prin experimente de transmisie a razelor X prin obiect să identificăm substanța necunoscută.

Pentru un fascicul de raze X la o energie dată, absorbția este descrisă de legea lui Beer așa cum a fost descris în capitolul 3:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad (5.1.1)$$

Unde s-au folosit următoarele notații:

I_0 – intensitatea fascicolului incident la o energie dată

I - intensitatea fascicolului emergent, după atenuarea selectivă prin obiectul investigat

x - grosimea materialului din care este făcut obiectul investigat

μ – coeficientul de atenuare linear al materialului din care este făcut obiectul investigat

După cum se știe, coeficientul de atenuare linear depinde de energie și de materialul străbătut de razele X.

Coeficientul de atenuare masic se definește ca fiind raportul dintre coeficientul de atenuare linear și densitatea ρ a substanței $\mu_{masic} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mu}{\rho}$.

Pentru o substanță compusă, la o energie dată, coeficientul de atenuare masic al acesteia este media ponderată a coeficienților de atenuare masici ai atomilor constituenți, cu ponderile $C_{element}$ egale cu procentul masic al fiecărui element chimic din materialul scanat:

$$\frac{\mu_{substanta}}{\rho_{substanta}} = \sum_{elemente} \left[C_{element} \frac{\mu_{element}}{\rho_{element}} \right] \quad (5.1.2)$$

$$\sum_{elemente} C_{element} = 1 \quad (5.1.3)$$

Putem generaliza ecuațiile (5.1.2) și (5.1.3) considerând ca sumarea se face peste toate elementele chimice cunoscute, cu ponderea masică nulă pentru elementele care nu fac parte din componența materialului:

$$C_i = 0 \text{ dacă elementul } i \text{ nu apare în componența materialului.}$$

Lista elementelor care pot alcătui materialul scanat poate fi diminuată, excluzând gazele nobile, elementele chimice rare și alte elemente a caror probabilitate să apară în compoziția materialelor scanate e scăzută. În continuare ne vom referi doar la elementele chimice a căror probabilitate de a fi detectate în materialul scanat este acceptabilă.

Prin măsurarea intensității radiației incidente și a celei emergente la o energie dată se poate determina din ecuația (5.1.1) produsul dintre coeficientul de atenuare și grosimea materialului.

$$\ln \left[\frac{I}{I_0} \right] = -\mu \cdot x \quad (5.1.4)$$

Înmulțind ecuațiile (5.1.2) și (5.1.3) cu densitatea substanței și grosimea materialului, și folosind notația $x\rho_{substanta}C_{element} \stackrel{\text{def}}{=} A_{element}$ obținem:

$$x \cdot \mu_{substanta} = \sum_{elemente} \left[A_{element} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{element} \right] \quad (5.1.5)$$

$$\sum_{elemente} A_{element} = x\rho_{substanta} \quad (5.1.6)$$

Sursa de raze X emite fotoni cu energii cuprinse în intervalul E_{\min} și E_{\max} (un spectru energetic tipic a fost prezentat în capitolul 2, în figura 2.2.3).

Detectorii spectroscopici au capacitatea de a raporta intensitatea radiațiilor pentru intervale predefinite de energie, divizând intervalul $[E_{\min}, E_{\max}]$ în intervale egale (canale) de lărgime ΔE denumite și binuri:

$$\begin{aligned} B_1 &= [E_{\min}, E_{\min} + \Delta E] \\ B_2 &= [E_{\min} + \Delta E, E_{\min} + 2\Delta E] \\ B_3 &= [E_{\min} + 2\Delta E, E_{\min} + 3\Delta E] \\ &\dots \\ B_n &= [E_{\min} + (n-1)\Delta E, E_{\max}] \end{aligned}$$

Intensitatea radiației incidente detectată în canalul B_n va fi notată $I_0(B_n)$ sau I_{0n} , iar intensitatea radiației emergente detectată în canalul B_n va fi notată $I(B_n)$ sau I_n .

Coefficienții lineari de atenuare depind de energie, deci vor avea valori diferite pentru fiecare canal, Vom nota cu μ_n coeficienții corespunzători canalului energetic B_n .

Ecuția (5.1.4) poate fi scrisă individual pentru fiecare canal energetic:

$$\begin{aligned} x\mu_{substanta,1} &= \sum_{elemente} \left[A_{element} \left(\frac{\mu_1}{\rho} \right)_{element} \right] \\ x\mu_{substanta,2} &= \sum_{elemente} \left[A_{element} \left(\frac{\mu_2}{\rho} \right)_{element} \right] \\ x\mu_{substanta,3} &= \sum_{elemente} \left[A_{element} \left(\frac{\mu_3}{\rho} \right)_{element} \right] \\ &\dots \\ x\mu_{substanta,n} &= \sum_{elemente} \left[A_{element} \left(\frac{\mu_n}{\rho} \right)_{element} \right] \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

Pentru fiecare element chimic, densitățile și coeficienții de atenuare la energii diferite sunt mărimi cunoscute, iar produsele ($x \cdot \mu_{substanta}$) sunt derivate din intensitățile măsurate conform ecuației (5.1.4) pentru fiecare canal energetic.

Considerând necunoscute cantitățile $A_{element}$, ecuațiile (5.1.7) alcătuiesc un sistem de ecuații linear, numărul ecuațiilor din sistem (numărul canalelor energetice) este în general mai mare decât numărul necunoscutelor $A_{element}$ (numărul de elemente posibile), sistemul astfel creat fiind supradeterminat.

Pentru găsirea soluțiilor se aplica metoda celor mai mici pătrate pentru valori pozitive (de exemplu metoda „*Non Negative Least Squares*”).

Rezolvarea sistemului de ecuații conduce la o soluție de forma $(A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, \dots)$ în care valorile $A_{element}$ nenule corespund elementelor chimice detectate în compoziția

materialului testat. Rapoartele $C_i = \frac{A_i}{\sum_j A_j}$ reprezintă procentul masic al acestor elemente, unde indicii i și j corespund valorilor nenule ale coeficienților $A_{element}$, deci sunt indicii corespunzători elementelor chimice detectate în materialul investigat. Înlocuind soluțiile sistemului (5.1.7) în ecuația (5.1.6) se determină produsul $\rho \cdot x$. După determinarea grosimii obiectului se determină densitatea materialului.

5.2 Investigarea corpurilor complexe (straturi de material)

Conform legii lui Beer:

$$\ln(I/I_0) = -\mu x \quad (5.2.1)$$

Considerând un ansamblu de N materiale omogene, pentru simplitate consideram o structură de tip sandwich.

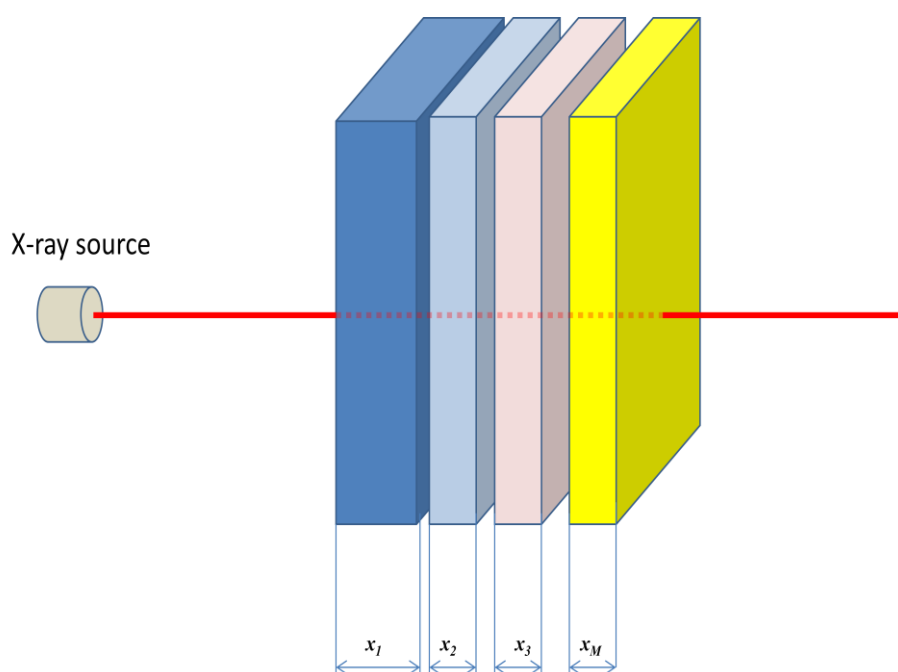


Figura 5.2: Sandwich de materiale omogene

Pentru acest corp, străbătut de un fascicul monocromatic de raze X putem scrie:

$$\ln(I/I_0) = \sum_i \mu_i x_i \quad (5.2.2)$$

unde indicii i corespund materialelor diferite, $i \leq N$.

Determinăm intensitățile radiației emergente pentru mai multe energii:

$$E_1, E_2, \dots, E_M$$

Considerând obiectul investigat ca fiind format dintr-un număr N de materiale posibile având coeficienții de atenuare cunoscuți, ecuația **5.2.2** se transforma într-un sistem de ecuații lineare în care necunoscutele sunt grosimile materialelor x_i . În mod evident cantitățile x_i sunt pozitive (pentru materialele existente) sau nule.

[illegible]

Dacă determinările se fac pentru un număr suficient de canale energetice ($M \geq N$) sistemul de ecuații va fi supradeterminat.

Rezolvarea sistemului de ecuații 5.2.3 conduce la o soluție de forma $(x_1, x_2, x_3, x_4, \dots)$ în care valorile $x_{substanta}$ nenule corespund grosimilor elementelor chimice detectate în compoziția obiectului testat (în compoziția sandwich-ului).

În mod evident pentru rezolvarea sistemului 5.2.3. pot fi aplicați aceiași algoritmi din capitolul 5.1, având în vedere că sistemul este un sistem de ecuații lineare, iar restricția soluțiilor nenegative $\mathbf{x}_i \geq 0$ rămâne valabilă.

6. Rezultate teoretice

6.1 Determinarea compoziției chimice

Un prim test al fezabilității metodei algebrice de determinare a compoziției chimice a fost realizat cu ajutorul datelor furnizate de NIST XCOM ([NIST 2016](#)) pentru coeficienții de atenuare ai substanțelor elementale și compuse. Am considerat următoarea listă de substanțe elementale ca fiind posibil constituenți ai substanțelor compuse testate:

$$Z \in \{1,6,7,8,9,11,12,13,14,15,16,17,19,20,26,27,28,29,30\}$$

Coeficienții de atenuare au fost studiați în intervalul energetic 18-140 keV.

În teste au fost analizate lărgimi diferite ale canalelor energetice (energy bins):

$$\Delta E = 1, 2, 4, 8 \text{ keV}$$

Pentru estimarea coeficientului de atenuare pe un interval de energie s-a aplicat o medie ponderată:

$$\langle \mu \rangle = \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \mu(E) dE \quad (6.1.1)$$

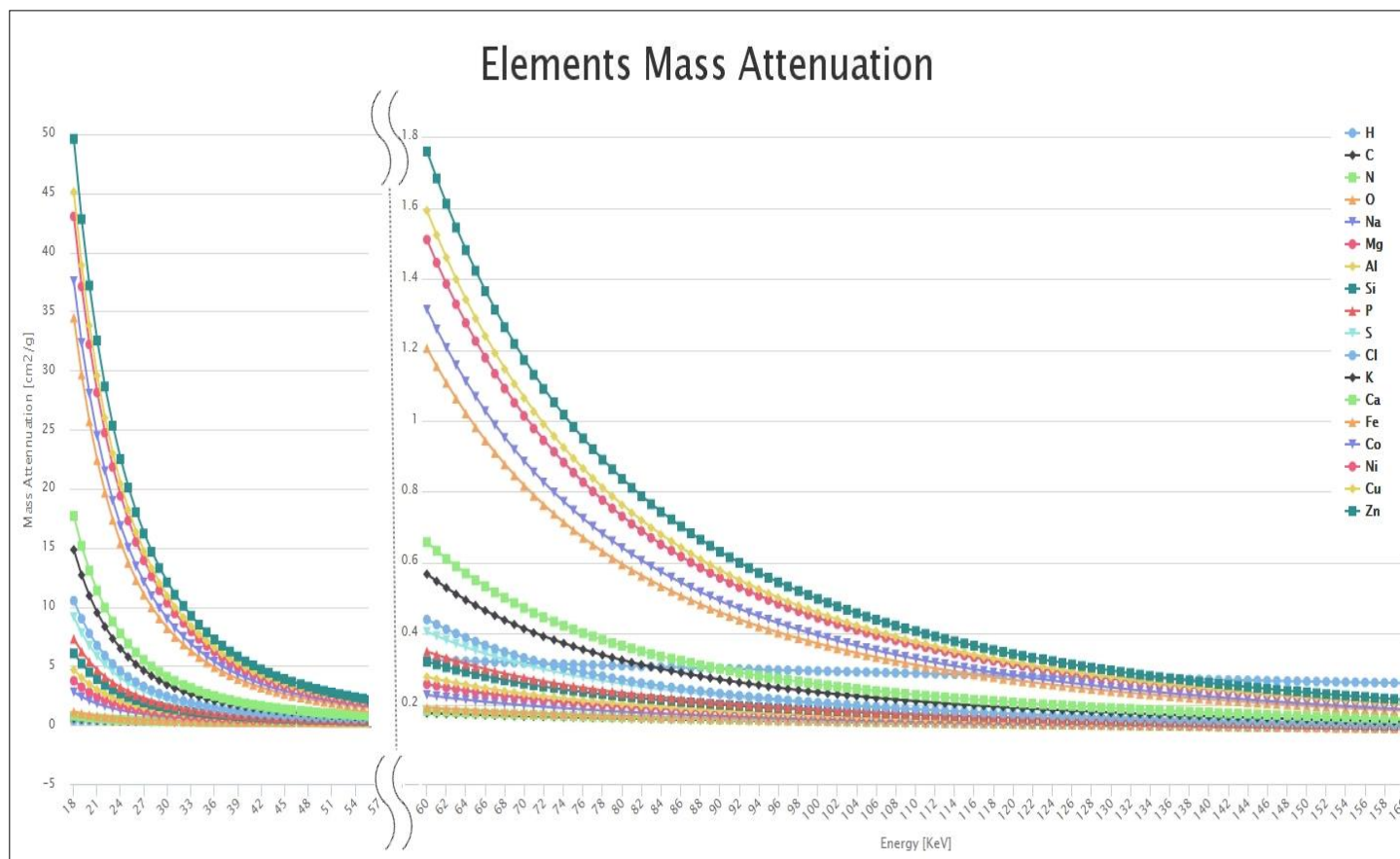


Figura 6.1.1: *Dependența coeficientului de atenuare masic al substanțelor elementale considerate constituenți posibili ai substanțelor compuse conform bazei de date NIST XCOM.*

Tabelul 6.1.1: Rezultatele teoretice obținute la determinarea compoziției chimice pentru canale energetice de 1,2,4,si 8 keV.

Substanta	Teoretic	1keV	2keV	4keV	8keV
Apa (H₂O)	H: 0.111898 O: 0.888102 $\rho=1.000\text{g/cm}^3$	H: 0.1118 O: 0.8882 $\rho=1.000\text{g/cm}^3$	H: 0.1119 O: 0.8858 $\rho=1.000\text{g/cm}^3$	H: 0.1116 O: 0.8876 $\rho=1.000\text{g/cm}^3$	H: 0.1118 O: 0.8852 $\rho=1.000\text{g/cm}^3$
Polietilena (C₂H₄)	H: 0.143716 C: 0.856284 $\rho=0.930\text{g/cm}^3$	H: 0.1437 C: 0.8562 $\rho=0.929\text{ g/cm}^3$	H: 0.1437 C: 0.8563 $\rho=0.930\text{g/cm}^3$	H: 0.1438 O: 0.8562 $\rho=0.930\text{g/cm}^3$	H: 0.1437 O: 0.8562 $\rho=0.930\text{ g/cm}^3$
Polistiren (C₈H₈)	H: 0.0799 C: 0.9512 $\rho=1.060\text{ g/cm}^3$	H: 0.0772 C: 0.9215 $\rho=1.058\text{g/cm}^3$	H: 0.0777 C: 0.9215 $\rho=1.0608\text{g/cm}^3$	H: 0.0777 C: 0.9216 $\rho=1.059\text{ g/cm}^3$	H: 0.0776 C: 0.9219 $\rho=1.059\text{g/cm}^3$
PMMA (C₅O₂H₈)	H: 0.0792 C: 0.6031 O: 0.3177 $\rho=1.180\text{ g/cm}^3$	H: 0.0804 C: 0.6008 O: 0.3181 $\rho: 1.182\text{g/cm}^3$	H: 0.0805 C: 0.5948 O: 0.3128 $\rho: 1.180\text{g/cm}^3$	H: 0.0805 C: 0.5963 O: 0.3136 $\rho: 1.180\text{g/cm}^3$	H: 0.0807 C: 0.5996 O: 0.3197 $\rho=1.180\text{g/cm}^3$
PET (C₁₀H₈O₄)	H: 0.041960 C: 0.625016 O: 0.333024 $\rho=1.380\text{ g/cm}^3$	H: 0.0425 C: 0.6246 O: 0.3318 $\rho=1.376\text{ g/cm}^3$	H: 0.0425 C: 0.6238 O: 0.3337 $\rho=1.379\text{ g/cm}^3$	H: 0.0425 C: 0.6237 O: 0.3338 $\rho: 1.379\text{g/cm}^3$	H: 0.0427 C: 0.6234 O: 0.3339 $\rho=1.379\text{g/cm}^3$
PTFE - Teflon (C₂F₄)	C: 0.240183 F: 0.759818 $\rho=2.250\text{ g/cm}^3$	C: 0.2328 F: 0.7554 $\rho=2.216\text{ g/cm}^3$	C: 0.2402 F: 0.7598 $\rho=2.250\text{g/cm}^3$	C: 0.2402 F: 0.7598 $\rho=2.250\text{ g/cm}^3$	C: 0.2364 F: 0.7586 $\rho=2.249\text{ g/cm}^3$
PVC (C₂H₃Cl)	H: 0.048382 C: 0.384361 Cl: 0.567257 $\rho=1.406\text{ g/cm}^3$	H: 0.0495 C: 0.3814 17: 0.5663 $\rho=1.404\text{g/cm}^3$	H: 0.0511 C: 0.3763 Cl: 0.5672 $\rho=1.403\text{ g/cm}^3$	H: 0.0498 C: 0.3801 Cl: 0.5673 $\rho=1.404\text{ g/cm}^3$	H: 0.2278 C: 0 Cl: 0 $\rho=1.405\text{ g/cm}^3$
CaSO₄	O: 0.470081 S: 0.235534 Ca: 0.294385 $\rho=2.960\text{ g/cm}^3$	8: 0.4672 S: 0.2342 20: 0.2946 $\rho=2.958\text{g/cm}^3$	O: 0.4605 S: 0.2359 Ca: 0.2937 $\rho=2.960\text{ g/cm}^3$	O: 0.4696 S: 0.2345 Ca: 0.2943 $\rho=2.960\text{ g/cm}^3$	O: 0.4638 S: 0.2333 Ca: 0.2951 $\rho=2.958\text{ g/cm}^3$
Alcool etilic (C₂H₆O)	H: 0.131273 C: 0.521435 O: 0.347292 $\rho=0.789\text{ g/cm}^3$	H: 0.1315 C: 0.5208 O: 0.3477 $\rho=0.789\text{g/cm}^3$	H: 0.1316 C: 0.5208 O: 0.3477 $\rho=0.789\text{g/cm}^3$	H: 0.1315 C: 0.5208 O: 0.3475 $\rho=0.789\text{ g/cm}^3$	H: 0.1314 C: 0.5211 O: 0.3475 $\rho=0.7889\text{ g/cm}^3$
Azotat de Amoniu (NH₄NO₃)	H: 0.050370 N: 0.349978 O: 0.599652 $\rho=1.725\text{ g/cm}^3$	H: 0.0506 N: 0.3507 O: 0.5974 $\rho=1.725\text{g/cm}^3$	H: 0.0505 N: 0.3447 O: 0.6021 $\rho=1.725\text{ g/cm}^3$	H: 0.0505 N: 0.3464 O: 0.6013 $\rho=1.725\text{ g/cm}^3$	H: 0.0504 N: 0.3497 O: 0.599 $\rho=1.725\text{g/cm}^3$
Nitroglicerina (C₃H₅N₃O₉)	H: 0.022193 C: 0.158675 N: 0.185040 O: 0.634093 $\rho=1.600\text{ g/cm}^3$	H: 0.0223 C: 0.1561 N: 0.1893 O: 0.6322 $\rho=1.600\text{g/cm}^3$	H: 0.0224 C: 0.1559 N: 0.1888 O: 0.6329 $\rho=1.6005\text{ g/cm}^3$	H: 0.0226 C: 0.1560 N: 0.1878 O: 0.6335 $\rho=1.600\text{g/cm}^3$	H: 0.0224 C: 0.1511 N: 0.1972 O: 0.6293 $\rho=1.600\text{g/cm}^3$

TNT (C7H5N3O6)	H: 0.022188	H: 0.0225	H: 0.0225	H: 0.0222	H: 0.0227
	C: 0.370166	C: 0.3668	C: 0.3658	C: 0.3668	C: 0.3532
	N: 0.185002	N: 0.1925	N: 0.1944	N: 0.1904	N: 0.2123
	O: 0.422643	O: 0.4156	O: 0.4145	O: 0.4205	O: 0.4118
	$\rho = 1.654 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.654 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.654 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.654 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.653 \text{ g/cm}^3$
RDX (C3H6N6O6)	H: 0.027227	H: 0.0273	H: 0.0273	H: 0.0274	H: 0.0272
	C: 0.162225	C: 0.1596	C: 0.1586	C: 0.1595	C: 0.1554
	N: 0.378360	N: 0.3825	N: 0.3843	N: 0.3825	N: 0.3904
	O: 0.432188	O: 0.4306	O: 0.4298	O: 0.4306	O: 0.4271
	$\rho = 1.820 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.898 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.820 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.820 \text{ g/cm}^3$	$\rho = 1.820 \text{ g/cm}^3$

6.2 Analiza stabilității metodei, simularea de zgomot statistic

Pentru determinarea stabilității metodei am aplicat diverse nivele de zgomot la coeficienții de atenuare ai substanțelor compuse.

$$\Delta(\mu) = \frac{1}{x} \sqrt{\left(\frac{\Delta I_0}{I_0}\right)^2 + \left(\frac{\Delta I}{I}\right)^2 + \left(\ln \frac{I}{I_0}\right)^2 \left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2} \quad (6.2.1)$$

În teste am considerat valori diferite de zgomot statistic pentru un canal energetic

$$\Delta E = 2keV$$

Deși pentru substanțele compuse au fost în general identificați corect atomii constituenți, s-a constatat o deteriorare semnificativă a preciziei determinării procentului masic al elementelor.

Tabelul 6.2.1: Rezultatele teoretice obținute la determinarea compoziției chimice pentru un canal energetic de 2 keV cu diferite nivele de zgomot statistic

Substanța	Teoretic	Zgomot 0.001%	Zgomot 0.01%	Zgomot 0.1%	Zgomot 1%
Apa (H ₂ O)	1: 0.111898 8: 0.888102 $\rho = 1.000 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1258 8: 0.8216 $\rho = 1.000 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1106 8: 0.8859 $\rho = 1.001 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1062 8: 0.8688 $\rho = 1.004 \text{ g/cm}^3$	1: 0.2006 8: 0.4657 $\rho = 0.948 \text{ g/cm}^3$
Polietilena (C ₂ H ₄)	1: 0.143716 6: 0.856284 $\rho = 0.930 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1447 6: 0.85560 $\rho = 0.930 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1464 6: 0.8512 $\rho = 0.928 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1469 6: 0.8503 $\rho = 0.927 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1959 6: 0.8032 $\rho = 0.860 \text{ g/cm}^3$
Polistiren (C ₈ H ₈)	1: 0.0799 6: 0.9512 $\rho = 1.060 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0776 6: 0.9219 $\rho = 1.060 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0808 6: 0.9149 $\rho = 1.057 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0812 6: 0.9187 $\rho = 1.053 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1000 6: 0.8995 $\rho = 0.8995 \text{ g/cm}^3$
PMMA (C ₅ O ₂ H ₈)	1: 0.0792 6: 0.6031 8: 0.3177 $\rho = 1.18 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0802 6: 0.5956 8: 0.3129 $\rho = 1.1802 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0828 6: 0.5893 8: 0.3122 $\rho = 1.1779 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0668 6: 0.5962 8: 0.2768 $\rho = 1.1932 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0434 6: 0.5890 8: 0.2032 $\rho = 1.2163 \text{ g/cm}^3$
PET (C ₁₀ H ₈ O ₄)	1: 0.041960 6: 0.625016 8: 0.333024 $\rho = 1.380 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0422 6: 0.6245 8: 0.3333 $\rho = 1.370 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0385 6: 0.6252 8: 0.3229 $\rho = 1.384 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0632 6: 0.5765 8: 0.3315 $\rho = 1.379 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1723 6: 0.3081 8: 0.3081 $\rho = 1.246 \text{ g/cm}^3$
PTFE - Teflon (C ₂ F ₄)	6: 0.240183 9: 0.759818 $\rho = 2.250 \text{ g/cm}^3$	6: 0.2390 9: 0.7605 $\rho = 2.249 \text{ g/cm}^3$	6: 0.1445 9: 0.7079 $\rho = 2.249 \text{ g/cm}^3$	6: 0.0585 9: 0.6578 $\rho = 2.233 \text{ g/cm}^3$	6: 0.0000 9: 0.8834 $v = 2.883 \text{ g/cm}^3$
PVC (C ₂ H ₃ Cl)	1: 0.048382 6: 0.384361 17: 0.567257 $\rho = 1.406 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0529 6: 0.3728 17: 0.5668 $\rho = 1.403 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0552 6: 0.0552 17: 0.5663 $\rho = 1.398 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0000 6: 0.0000 17: 0.4728 $\rho = 1.454 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0000 6: 0.0000 17: 0.5152 $\rho = 1.178 \text{ g/cm}^3$

CaSO₄	8 : 0.470081 16 : 0.235534 20 : 0.294385 $\rho = 2.960 \text{ g/cm}^3$	8: 0.4588 16: 0.2356 20: 0.2940 $\rho = 2.954 \text{ g/cm}^3$	8: 0.3687 16: 0.2561 20: 0.2938 $\rho = 2.868 \text{ g/cm}^3$	8: 0.3253 16: 0.2655 20: 0.2834 $\rho = 2.829 \text{ g/cm}^3$	8: 0.000 16: 0.000 20: 0.1521 $\rho = 2.7426 \text{ g/cm}^3$
Alcool etilic (C ₂ H ₆ O)	1 : 0.131273 6 : 0.521435 8 : 0.347292 $\rho = 0.789 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1322 6: 0.5193 8: 0.3485 $\rho = 0.788 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1276 6: 0.5225 8: 0.3375 $\rho = 0.791 \text{ g/cm}^3$	1: 0.1700 6: 0.4404 8: 0.3510 $\rho = 0.766 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0553 6: 0.5056 8: 0.1178 $\rho = 0.838 \text{ g/cm}^3$
Azotat de Amoniu (NH ₄ NO ₃)	1 : 0.050370 7 : 0.349978 8 : 0.599652 $\rho = 1.725 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0500 7: 0.3456 8: 0.6013 $\rho = 1.725 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0549 7: 0.3343 8: 0.6067 $\rho = 1.7190 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0407 7: 0.3865 8: 0.5683 $\rho = 1.739 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0000 7: 0.6096 8: 0.3897 $\rho = 1.747 \text{ g/cm}^3$
Nitroglicerina (C ₃ H ₅ N ₃ O ₉)	1 : 0.022193 6 : 0.158675 7 : 0.185040 8 : 0.634093 $\rho = 1.600 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0223 6: 0.1563 7: 0.1886 8: 0.6328 $\rho = 1.598 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0149 6: 0.1584 7: 0.2191 8: 0.6077 $\rho = 1.604 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0366 6: 0.1160 7: 0.2105 8: 0.6331 $\rho = 1.581 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0000 6: 0.0000 7: 0.6003 8: 0.3988 $\rho = 1.570 \text{ g/cm}^3$
TNT (C ₇ H ₅ N ₃ O ₆)	1 : 0.022188 6 : 0.370166 7 : 0.185002 8 : 0.422643 $\rho = 1.654 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0227 6: 0.3654 7: 0.1945 8: 0.4142 $\rho = 1.653 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0217 6: 0.3671 7: 0.1941 8: 0.4155 $\rho = 1.655 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0173 6: 0.3685 7: 0.2088 8: 0.4054 $\rho = 1.661 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0000 6: 0.0000 7: 0.9818 8: 0.0172 $\rho = 1.616 \text{ g/cm}^3$
RDX (C ₃ H ₆ N ₆ O ₆)	1 : 0.027227 6 : 0.162225 7 : 0.378360 8 : 0.432188 $\rho = 1.820 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0277 6: 0.1573 7: 0.3848 8: 0.4302 $\rho = 1.819 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0324 6: 0.1411 7: 0.3923 8: 0.4341 $\rho = 1.811 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0461 6: 0.1055 7: 0.4165 8: 0.4267 $\rho = 1.792 \text{ g/cm}^3$	1: 0.0000 6: 0.0000 7: 0.8190 8: 0.1803 $\rho = 1.804 \text{ g/cm}^3$

Algoritmul de rezolvare a sistemului linear de ecuații folosit este prezentat în Anexa 1, iar erorile obținute la determinarea densității și la determinarea procentului compoziției chimice obținute sunt prezentate în Anexa 2.

6.3 Concluzii

După cum se observa din datele prezentate în tabelele 6.1.1 și 6.2.1 metoda prezentată dă rezultate foarte bune, iar precizia metodei este slab influențată de lărgimea canalului energetic (până la 8 keV). Așa cum vom prezenta în capitolul următor, detectorii spectroscopici cu canale energetice de 8, respectiv 4 și chiar 2 keV sunt disponibili la ora actuală.

Totuși, așa cum reiese din datele prezentate în Tabelul 6.2.1 determinarea corectă a compoziției chimice necesită determinarea cu o înaltă precizie ($\varepsilon < 10^{-4}$) a coeficientului de atenuare pentru substanța investigată și pentru elementele constituențe.

Cunoașterea densității substanței investigate prin alte metode alternative, crește semnificativ precizia metodei.

În acest caz sistemul de ecuații devine (5.1.2 + 5.1.3), iar incertitudinea legată de coeficienții de atenuare ai substanțelor elementale este eliminată.

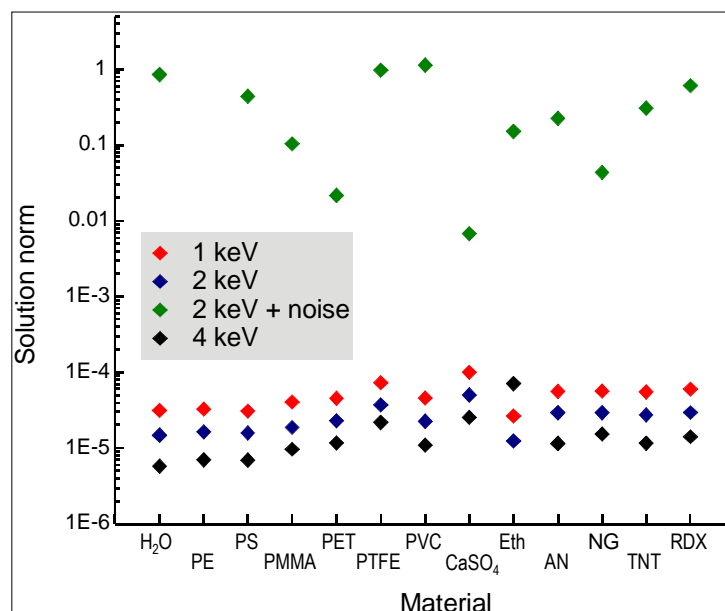


Figura 6.2.3: Norma soluției obținute la rezolvarea sistemului linear de ecuații $Ax=b$:
 $Norm=||Ax-b||$

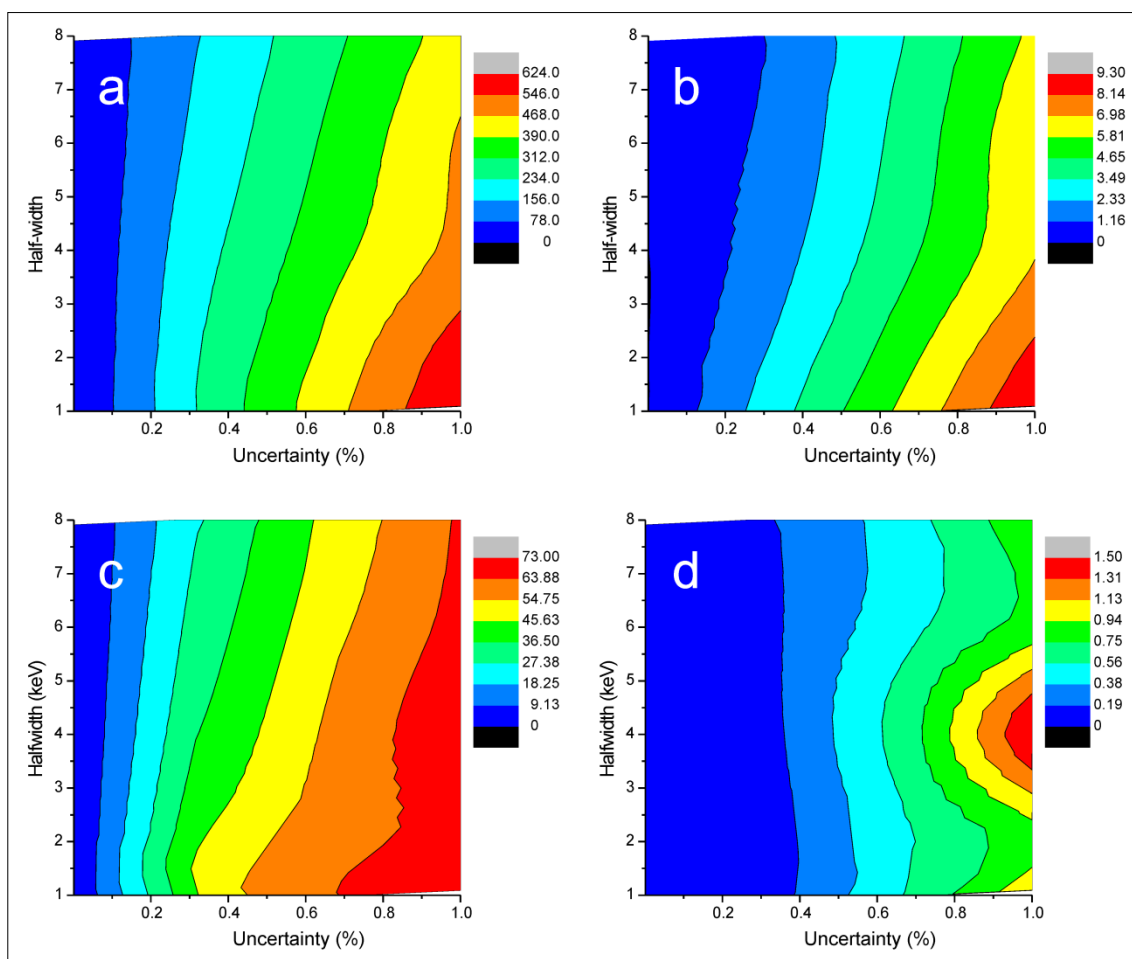


Figura 6.2.4: Incertitudinea la determinarea compoziției chimice (a și c) și densității (b și d) pentru TNT(a și b) și H₂O (c și d)

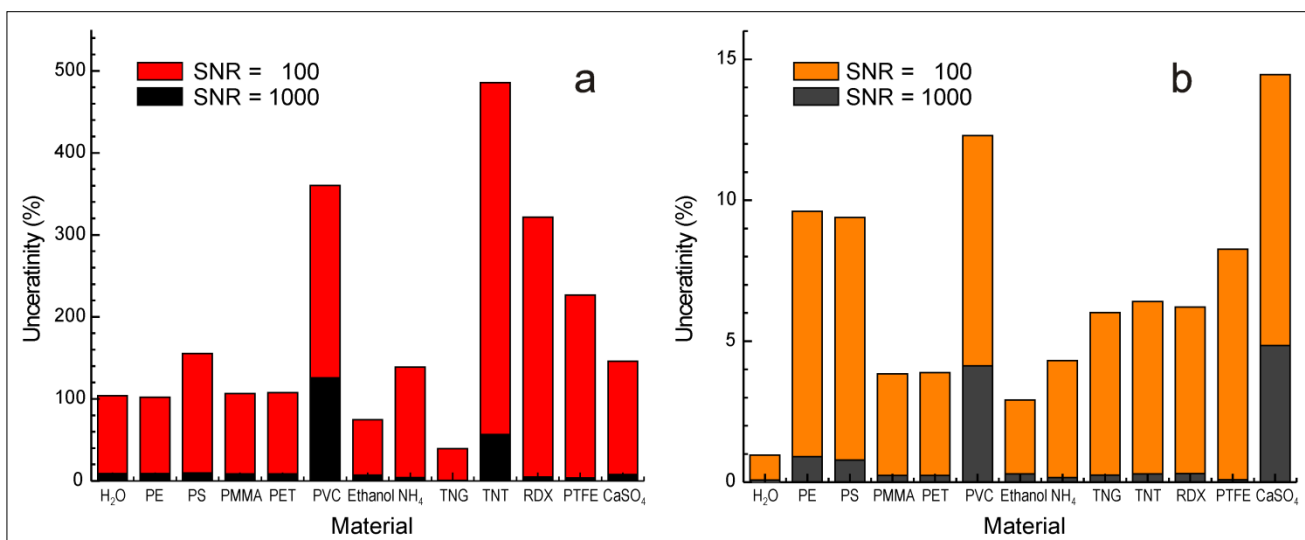


Figura 6.2.5: Incertitudinile în determinarea structurii chimice (a) și a densității (b) pentru toate materialele și pentru două valori diferite ale SNR, adică 100 și 1000.

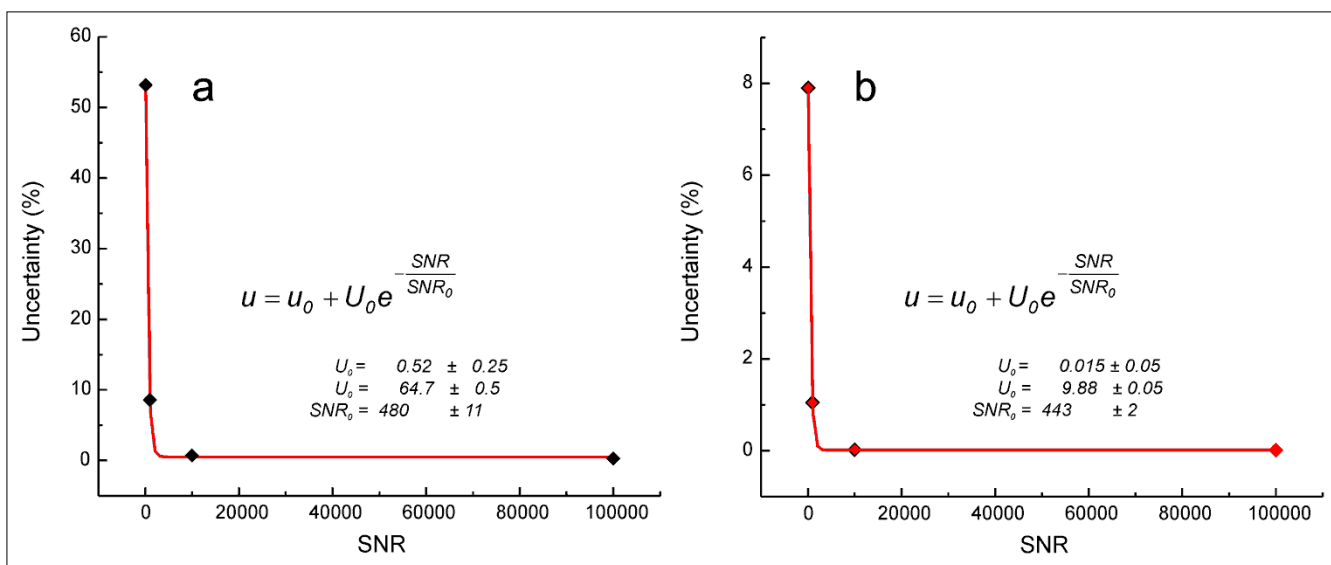


Figura 6.2.5: Degradarea preciziei la determinarea compoziției și densității pentru nitroglicerină

6.4 Descompunerea în valori singulare (Singular Value Decomposition - SVD) și stabilitatea soluției

O metoda alternativă pentru rezolvarea sistemului de ecuații lineare (5.1.7) este metoda descompunerii în valori singulare (SVD). Deși în SVD nu pot fi aplicate constrângeri suplimentare pentru soluții non-negative, metoda SVD este utilă la investigarea stabilității soluțiilor sistemului de ecuații.

Considerând un sistem de forma :

$$Ax=B \quad (6.4.1)$$

Matricea A de dimensiune $m \times n$ poate fi descompusă în mod unic sub forma:

$$A = U S V \quad (6.4.2)$$

unde U este o matrice ortogonală $m \times m$, V este o matrice ortogonală $n \times n$, iar S este o matrice diagonală $m \times n$ denumită matrice singulară.

$$S = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.4.3)$$

cu $\Sigma_1 = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r)$ (6.4.4)

unde valorile σ_i sunt valorile singulare nenule:

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0 \quad (6.4.5)$$

Numărul r , numărul valorilor singulare nenule ($r \leq n$) este rangul matricei A .

Valorile σ_i sunt rădăcinile pătrate ale valorilor proprii λ ale matricei $A^T A$.

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \quad (6.4.6)$$

SVD oferă o modalitate de a calcula inversa matricei A :

$$A^{-1} = V[\text{diag}(\sigma_1^{-1}, \sigma_1^{-1}, \sigma_2^{-1}, \dots, \sigma_n^{-1})]U^T \quad (6.4.7)$$

unde σ_i sunt elementele matricei S .

Soluția ecuației 6.4.1 poate fi scrisă sub forma:

$$x = V[diag(\sigma_1^{-1}\sigma_1^{-1}\sigma_2^{-1} \dots \sigma_n^{-1})(U^T b) \quad (6.4.8)$$

Dacă unul din elementele σ_i este zero sau apropiat de zero în limita erorii de măsurare, atunci matricea A este singulară. Când valoarea minimă $\min(\sigma_i)$ este mai mică decât limita erorilor, matricea A se numește **rău – condiționată (ill-conditioned)**, iar sistemul de ecuații (6.4.1) nu admite soluții exacte.

Chiar și în cazurile în care matricea A este singulară sau **rău – condiționată**, iar sistemul de ecuații 6.4.1 nu admite soluții exacte, pot fi găsite soluții aproximative, pentru care norma sistemului este suficient de mică:

$$\|Ax - B\| \leq \delta \quad (6.4.9)$$

În acest caz inversa matricei A , A^{-1} din relația 6.4.7 devine **pseudoinversă**. În expresiile 6.4.7 și 6.4.8 termenii σ_i^{-1} pentru care $\sigma_i = 0$ vor fi înlocuiți cu zero.

Putem defini gradul de singularitate al matricei A : cu cât există mai mulți termeni σ nuli cu atât matricea A este „mai singulară”.

Definim factorul numeric condițional **MCN** al matricei A raportul dintre cea mai mare valoare singulară și cea mai mică valoare singulară:

$$MCN = \frac{\max(\sigma_i)}{\min(\sigma_i)} \quad (6.4.10)$$

Factorul MCN estimează numărul maxim de zecimale care se pierd la rezolvarea sistemului de ecuații, cu alte cuvinte MCN indică pierdere preciziei în cel mai nefavorabil caz.

În cazul în care MCN este infinit sistemul de ecuații este singular.

În cazul în care MCN este mare, $\log(MCN) \geq \varepsilon$, unde ε reprezintă precizia măsurării coeficienților B , sistemul de ecuații este rău-condiționat.

Conform teoriei **SVD**, soluția x_0 este stabilă dacă în urma unor variații mici ale vectorului B (datorate incertitudinilor la măsurare) se vor produce variații mici ale normei $\|Ax_0 - B\|$.

Cu alte cuvinte vectorul x_0 rămâne în continuare o soluție bună a sistemului de ecuații 6.4.1 în urma unor variații mici ale coeficienților B determinați experimental.

Astfel condiția ca sistemul de ecuații 6.4.1 să admită soluții stabile este ca acesta să nu fie rău-condiționat, adică:

$$\varepsilon > \log(MCN) \quad (6.4.11)$$

Aplicând analiza SVD pentru sistemul de ecuații 5.1.7 obținem limita erorilor (prezentate în Tabelul 6.4.3) pentru determinarea unor soluții stabile cu matricea A construită cu ajutorul elementelor cu numărul atomic

$$Z \in \{1,6,7,8,9,11,12,13,14,15,16,17,19,20,26,27,28,29,30\}.$$

Tabelul 6.4.3: *Factorul numeric condițional (MCN) pentru lărgimi diferite ale canalelor energice în domeniul 18-160 KeV*

ΔE (keV)	MCN
$\Delta E=1\text{keV}$	$\text{MCN} \sim 10^4$
$\Delta E=2\text{keV}$	$\text{MCN} \sim 10^6$
$\Delta E=4\text{keV}$	$\text{MCN} \sim 10^5$
$\Delta E=8\text{keV}$	$\text{MCN} \sim 10^6$

7. Rezultate experimentale

7.1 Descrierea experimentului

Metoda descrisă în capitolul 5 a fost testată experimental.

Sursa utilizată a fost un tub de raze X de putere 300 W cu energia maximă 160 keV.

Spectrul măsurat al sursei este prezentat în figura 7.1.2.

Fascicolul a fost filtrat utilizându-se un filtru de aluminiu de 3 mm grosime.

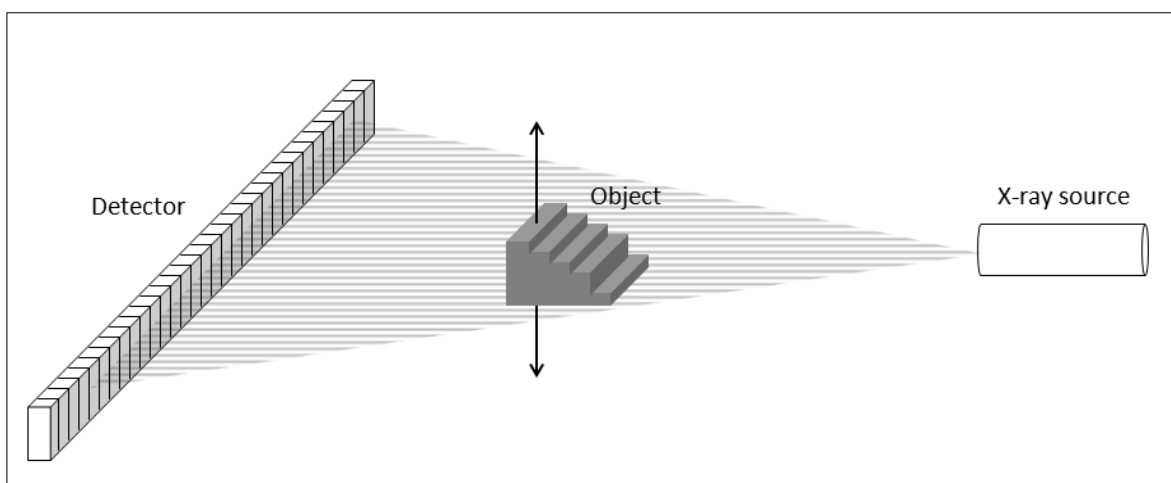


Figura 7.1.1: Set-up-ul experimental pentru măsurarea coeficienților de atenuare

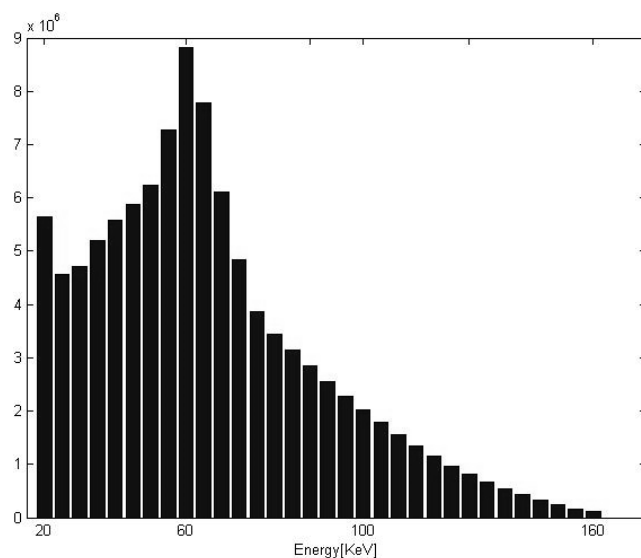


Figura 7.1.2: Spectrul de raze X măsurat experimental

Parametrii detector

Pentru detecție s-a utilizat un sistem de detectori spectroscopici (photon counter) *CdTe*, utilizând 32 de canale energetice (energy bin) de la 20keV pana la 160 KeV.

Astfel lărgimea canalului energetic a fost:

$$\Delta E \cong 4.4 \text{ keV}$$

Obiecte testate

S-au scanat obiecte etalon din substanțe omogene cunoscute sub forma unor trepte (Figura 7.1.1). Obiectele s-au deplasat in plan vertical cu viteză constantă permițând astfel determinări ale coeficientului de atenuare la grosimi diferite.

Materialele studiate au fost:

- Al,
- PE (C₂H₄),
- PET (C₁₀H₈O₄),
- PTFE(C₂F₄),
- PVC(C₂H₃Cl) .

7.2 Rezultate experimentale

Figura 7.2.1 reprezintă valorile intensităților radiației emergente măsurate pe un singur canal de detecție.

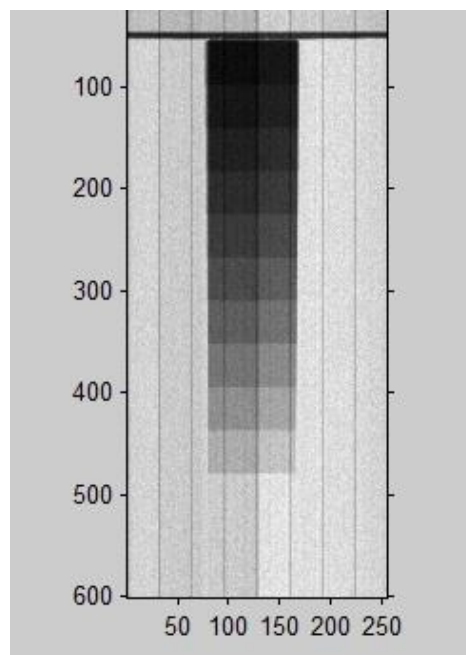


Figura 7.2.1: *Intensitatea radiației pentru un obiect în forma de trepte pe un singur canal energetic*

Valorile măsurate pentru atenuarea lineară au fost comparate cu valorile teoretice publicate în baza de date NIST.

În figura 7.2.2 sunt prezentate valorile teoretice (NIST) și experimentale ale coeficienților de atenuare masici în funcție de energie.

Pentru a elimina efectele la energii joase și la energii înalte a fost luată în considerare numai zona energetică marcată în figură.

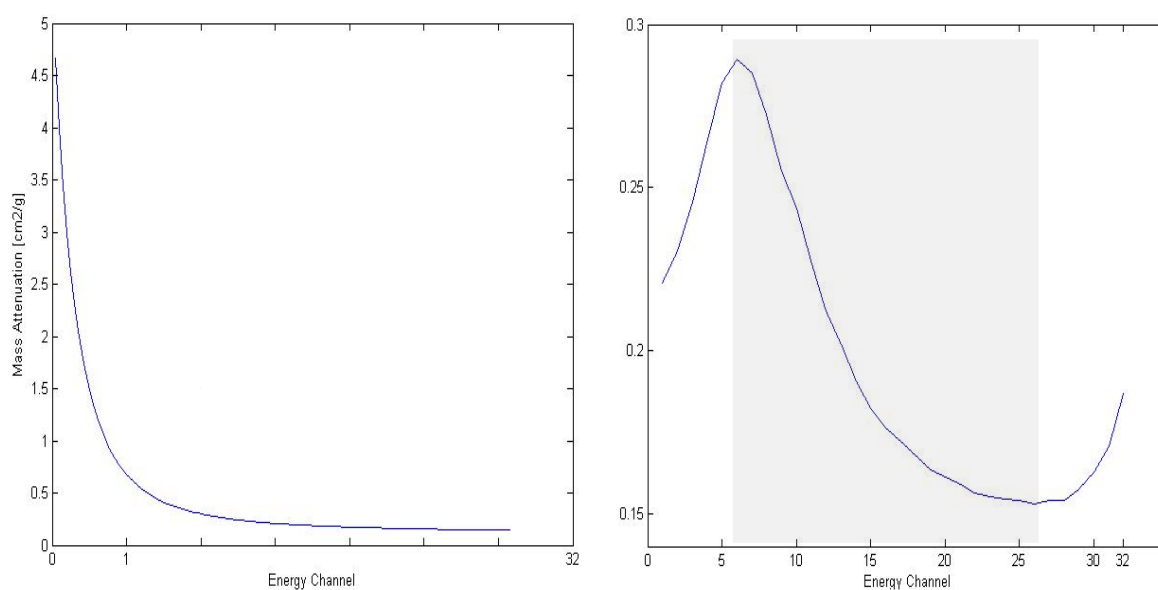


Figura 7.2.2: . Coeficientul de atenuare masic calculat(stânga) versus experimental(dreapta) în funcție de canalul energetic ($\Delta E=20\text{KeV}$, $E_{\max}=160\text{keV}$)

Pentru a compensa efectele detectorilor, a fost introdus un factor de corecție linear, dependent de energie mediat pentru materialele studiate.

$$\alpha(E) = \mu_{\text{teoretic}} / \mu_{\text{experimental}} \quad (7.2.1)$$

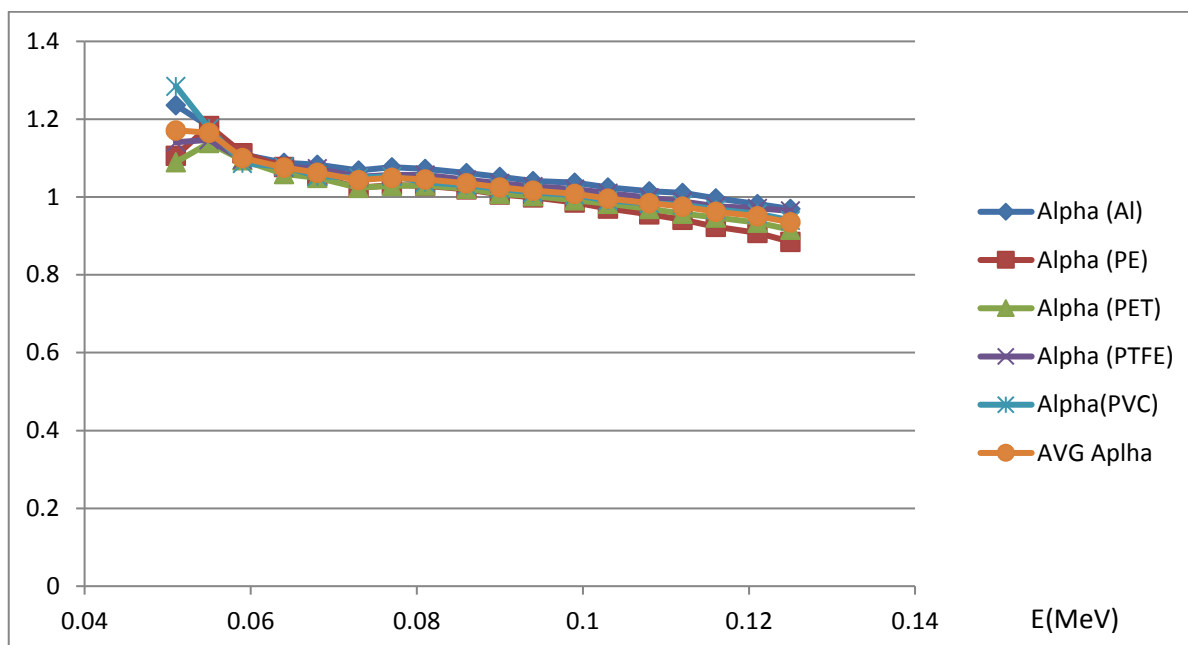


Figura 7.2.3: Factorul de corecție lineară $\alpha(E) = (\mu_{teoretic} / \mu_{experimental})$

Candidați pentru elementele constitutive au fost materialele cu numărul atomic :

$$Z \in \{1, 6, 7, 8, 9, 13, 14, 15, 16, 17\}$$

Rezultatele obținute în urma aplicării algoritmului descris în capitolul 5.1 sunt prezentate în tabelul 7.2.4.

Tabelul 7.2.4: Rezultatele obținute pentru determinarea experimentală a elementelor constitutive

Substanța	Constituenți cunoscuți (fracția masică)	Constituenți determinați experimental
Al	Z=13	Z=13 Norma soluției= 1.6199e-009
PE (C2H4)	Z=1 : 0.143715 Z=6 : 0.856285	Z=1 : 0.1714 Z=6 : 0.8284 Norma soluției =0.0146
PTFE(C2F4)	Z=6 : 0.240183 Z=9 : 0.759817	Z=6 : 0.0820 Z=9 : 0.9147 Norma soluției = 0.0072
PVC (C2H3Cl)	Z=1 : 0.048382 Z=6 : 0.384361 Z=17 : 0.567257	Z=1 : 0.0824 Z=6 : 0.4206 Z=17 : 0.4970 Norma soluției = 0.0257

După cum se observă, pentru obiectele testate au fost detectate corect elementele constitutive, iar procentul masic calculat este apropiat de cel real.

Acest studiu experimental ne îndreptățește să afirmăm că metoda propusă în capitolul 5.1 pentru identificarea compoziției chimice a substanțelor poate fi aplicată în practică, un studiu experimental mai amplu, implicând un număr mare de materiale studiate fiind necesar pentru a perfecția calibrarea detectorilor și optimizarea corecțiilor la determinarea coeficienților de atenuare.

8. Analiza automată a imaginilor, funcția de distribuție a orientării (ODF)

În cadrul cercetării expuse în această lucrare am efectuat un studiu pentru analiza materialelor utilizând tehnici de prelucrare automată a imaginilor investigând fragmente de rocă extrase de la mare adâncime.

Probele analizate au fost sub forma de discuri cu diametrul de 3 cm și grosimea de 3 cm, extrase din zona Outokumpu, Finlanda de la o adâncime de 1844.5 m.

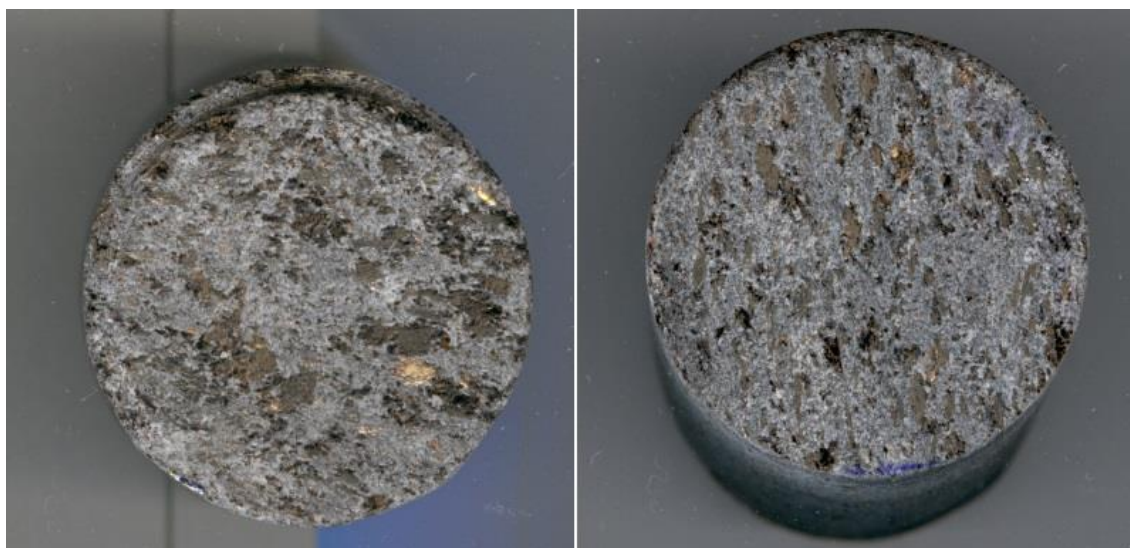


Figura 8.1: *Fragmentele de rocă extrase la Outokumpu*

Ca sursă pentru analiza automată a imaginilor s-au folosit:

- Fotografii directe ale probelor, realizate la o rezoluție de 2400 dpi (fig. 8.1)
- Imagini obținute prin tomografie realizată cu un tub de raze X Microfocus la o tensiune de 135 kV și un curent de 0.1 mA, utilizând un filtru de Cu de 0,1 mm (fig. 8.2).
- Imagini ale unor secțiuni subțiri realizate cu ajutorul unui

microscop optic cu lumina polarizată Nikon Eclipse LV100Pol (fig. 8.3).

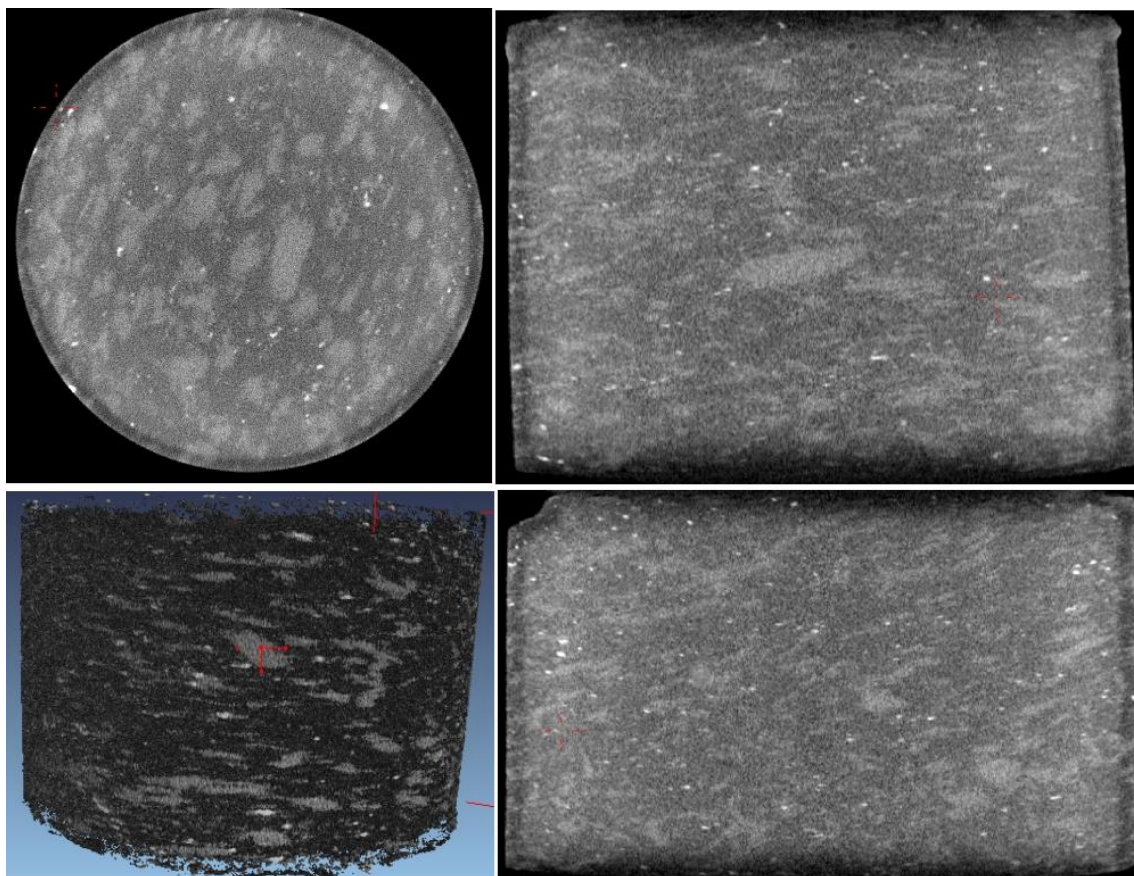


Figura 8.2: *Imagini ale probelor de la Outokumpu obținute prin tomografie*

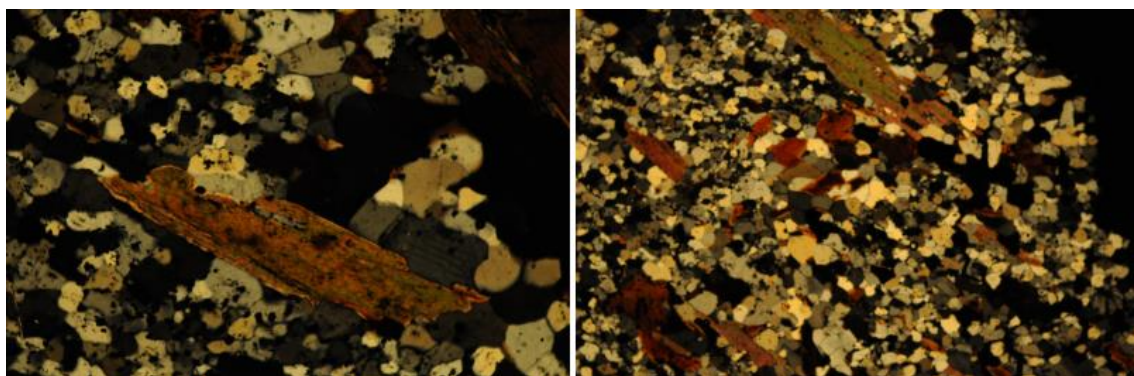


Figura 8.3 *Imagini ale unor secțiuni subțiri ale probelor de la Outokumpu obținute cu microscopul de lumina polarizată*

8.1 Etapele prelucrării cantitative a imaginilor

Fazele principale în analiza cantitativă a imaginilor sunt:

1. Pre-procesarea imaginilor:
 - a. Scalarea;
 - b. Îmbunătățirea contrastului, a luminozității și (daca e cazul) a culorilor
 - c. Aplicarea unor corecții de background și eliminarea zgomotului.
 - d. Segmentarea - identificarea segmentelor care reprezintă obiecte relevante. Aceasta operațiune consta în:
 - i. Separarea materialelor diferite utilizând filtre grafice;
 - ii. Furnizarea unor imagini care sa izoleze materialele (imagini separate pentru fiecare material).
2. Analiza cantitativă
 - a. Aproximarea obiectelor cu forme geometrice simple (de exemplu elipse) în imaginile obținute în urma etapei de segmentare;
 - b. Analiza cantitativă a obiectelor approximate, studiul dimensiunilor obiectelor , al distribuției spațiale, al dimensiunilor obiectelor, densităților și al distribuției orientării.

Pentru vizualizare, filtrare și segmentare și analiza cantitativă a datelor a fost folosit pachetul de aplicații software **Image SXM** (<http://www.liv.ac.uk/~sdb/ImageSXM/>, Heilbronner & Barrett 2014).

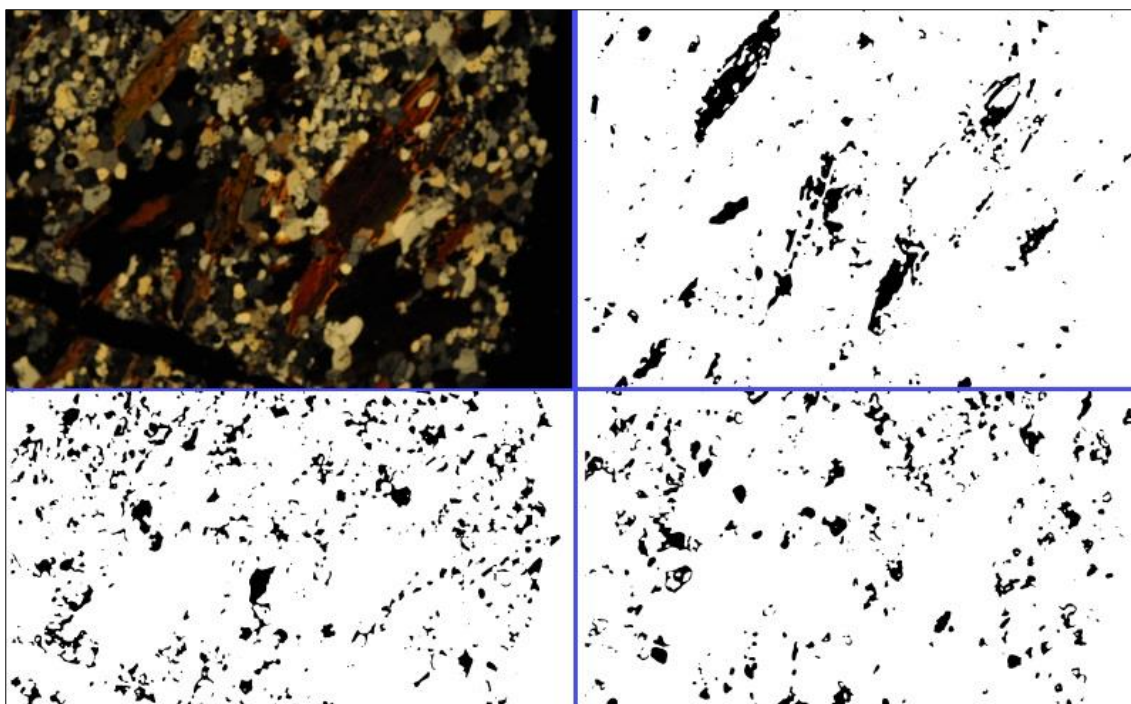


Figura 8.4 *Ilustrare a procesului de segmentare - izolarea fiecărui material în imagini separate*

8.2 Rezultatele studiului

Structura mineralogică a probelor studiate, constând în general din mică sub forma de muscovit sau biotit, cuarț și feldspat cu mici cantități de andaluzit, granate, silimanit, cianit sau staurolite.

Studiul efectuat a evidențiat o orientare preferențială a cristalelor de biotit și a magnetitului.

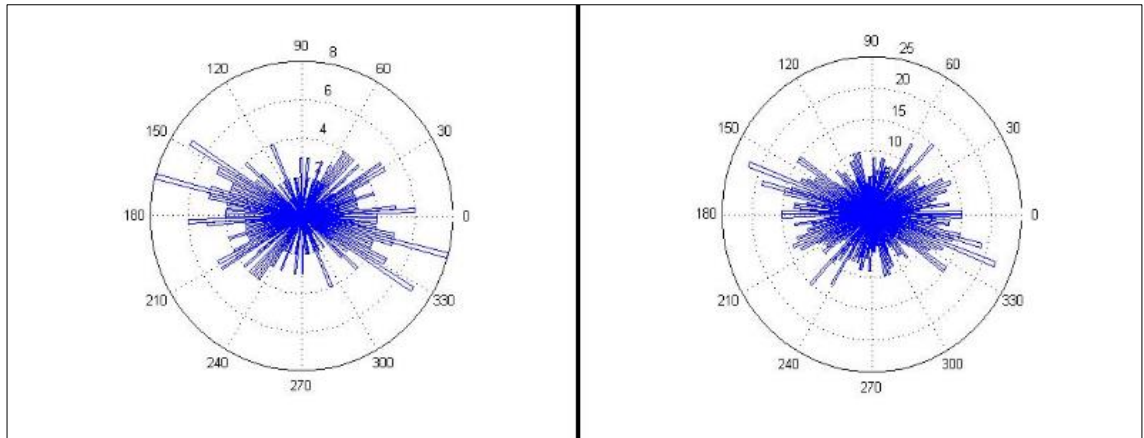


Figura 8.5 *Funcția de distribuție a orientării (ODF) pentru biotit si magnetit în secțiune transversală*

8.3 Concluzii

Scopul studiului a fost de a identifica și caracteriza posibilele neuniformități în structura rocilor complexe. Pentru aceasta s-au folosit tehnici de analiză automată a imaginii. Rezultatele studiului au evidențiat faptul ca tehnicile de analiză a imaginilor au furnizat informații relevante despre structura rocilor. Funcția de distribuție a orientării (ODF) s-a dovedit a fi cel mai bun descriptor cantitativ, fiind în măsură să caracterizeze fără echivoc orientarea preferențială a diversilor constituenți ai rocilor studiate .

9. Concluzii generale

Conform rezultatelor studiilor efectuate pe datele simulate cu ajutorul bazei de date NIST XCOM prezentate în capitolul 6 și rezultatele studiului experimental prezentat în capitolul 7, pentru materialele testate atât densitatea cât și compoziția chimică au fost corect determinate.

Metoda implică utilizarea unei surse standard de raze X, bazându-se pe spectrul continuu al radiației *Bremsstrahlung* și a detectorilor spectroscopici de tip *photon-counter* cu rezoluție înaltă, care sunt disponibili la ora actuală.

Astfel ne considerăm îndreptățiți să afirmăm că metoda propusă, bazată pe analiza comportamentului spectral al coeficientului de atenuare al razelor X poate fi aplicată în practică.

După cum s-a demonstrat în capitolul 5.4 metoda este puternic afectată de precizia determinării coeficienților de atenuare, fiind necesară o precizie de 10^{-5} pentru a asigura detecția corectă a compoziției chimice. Precizia poate fi îmbunătățită prin creșterea intensității radiației incidente și a preciziei detectorilor spectroscopici.

$$\Delta(\mu) = \frac{I}{x} \sqrt{\left(\frac{\Delta I_0}{I_0}\right)^2 + \left(\frac{\Delta I}{I}\right)^2 + \left(\ln \frac{I}{I_0}\right)^2 \left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2} \quad (8.1)$$

$$\Delta(I) \sim \sqrt{\frac{1}{I}} \quad (8.2)$$

Se impune un studiu experimental amplu, care să implice un număr mare de materiale studiate pentru a perfecția calibrarea detectorilor și optimizarea corecțiilor la determinarea coeficienților de atenuare.

Bibliografie

Alvarez, R.E., Macovski, A. (1976) Energy-selective reconstructions in X-ray computerized tomography, *Physics in Medicine and Biology*, 21,733–744.

Bahaa E. A. Saleh, Malvin Carl Teich (1991) *Fundamentals of Photonics* Chapter 17. Med. 6 (4) (1976) 325–336.

Barrett Steve (2016) *Image SXM*,(2016); [<https://www.liverpool.ac.uk/sdb/ImageSXM/>]

Becker Wolfgang, Bergmann Axel (2016)- *Detectors for High-Speed Photon Counting*

Beckhoff, B., Kanngießer, B., Langhoff, N., Wedell, R., Wolff, H. (2006) *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*, Springer, 2006

Bordovitsyn Vladimir A. (1999) *Synchrotron Radiation in Astrophysics* , *Synchrotron Radiation Theory and Its Development*

Dierickx, B., Yao, Q., Witvrouwen, N., et al. (2016) X-ray Photon Counting and Two-Color X-ray Imaging Using Indirect Detection, *Sensors* (2016), 16, 764; doi:10.3390/s16060764.

Glasbey C A , Horgan G W (1995) *Image Analysis For The Biological Sciences* - John Wiley & Sons, Inc. New York, NY, USA ©1995

Heilbronner Rene´e, Barrett Steve (2014) *Image Analysis in Earth Sciences- Microstructures and Textures of Earth Materials*-Springer Heidelberg New York Dordrecht London (2014).

Hirayama H. (2000) Lecture Note on Photon interactions and Cross Sections- November 2000.

Hubbel J H, Gimm H.A, Overbo I – Pair, Triplet and Total Atomic Cross Sections (and Mass Attenuation) for 1Mev-100GeV Photons in Elements Z=1 to 100 – J of Physics and Chemistry, vol 9 n. 4 , 1980.

Hubbell J H (1999) Review of photon interaction cross section data in the medical and biological context - Phys. Med. Biol. 44 (1999) R1–R22. Printed in the UK.

Hubbell J H (2000) Lecture Note on Photon interactions and Cross Sections - KEK Internal 2000-10 November 2000.

Hubbell J.H., Seltzer S.M. (2016) Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients from 1 keV to 20 MeV for Elements Z = 1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest .

Hubbell, J.H., Gimm, H.A. and Overbo, I. (1980), Pair, Triplet, and Total Atomic Cross Sections (and Mass Attenuation Coefficients) for 1 MeV-100 GeV Photons in Elements Z = 1 to 100, J. Phys, Chem. Ref. Data 9, 1023-1147.

Hugh, T., Philipp, H.T., Tate, M.W., Purohit, P. et al. (2016) High-speed X-ray imaging pixel array detector for synchrotron bunch isolation, Journal of Synchrotron Radiation, 23, 395–403, <http://dx.doi.org/10.1107/S1600577515022754>.

Jenkins Ron (2000) X-Ray Fluorescence Spectrometry” Volume 152, Second Edition 2000.

Johns H.E., Cunningham J.R. (1983) The physics of radiology”, 4th edition 1983.

Kang, D., Lee, D., Cho, M. et al. et al., (2015) High speed photon counting readout ASIC for spectral computed tomography detectors, Proc. 2015 IEEE International Conference on Consumer Electronics (ICCE), Las Vegas, NV, 2015, pp. 614-615, doi: 10.1109/ICCE.2015.7066550 50.

Kissick Michael W, Kissick Sharareh Fakhraei (2016) Lectures on Radiation Dosimetry Physics: A Deeper Look into the Foundations of Clinical Protocols - November 2016.

Mayneord W, The significance of the Rontgen, *Acta—Unio Internationalis Contra Cancrum* 2, 271–282 (1937).

McCollough C.H., Leng, S., Yu, L., et al. (2015) Dual- and Multi-Energy CT: Principles, Technical Approaches, and Clinical Applications, *Radiology*, 276, 637-353, doi: 10.1148/radiol.2015142631, <http://pubs.rsna.org/doi/pdf/10.1148/radiol.2015142631> (accessed 10.07.2016).

Midgley, S.M. (2005) Materials analysis using x-ray linear attenuation coefficient measurements at four photon energies, *Physics in Medicine and Biology*, 50, 4139–4157, doi:10.1088/0031-9155/50/17/016.

Murty R. C. (1965) Effective atomic numbers of heterogeneous materials", *Nature* 207, 398-399 (24 July 1965).

Nagaychenko V.I., Sanin V.M., Yegorov A.M., Shchagin A.V., (2003) Spectra of pyroelectric X-ray generator", *Instrumentation and Detectors (physics.ins-det)* NIST - <http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/chap2.html>.

Rosenman G., Shur D., Krasik Ya.E., Dunaevsky A., J. (2000). *Appl. Phys.* 88, 6109 .

Saversky, A., Dinca, D-C., Rommel, J.M (2015) Cargo and Container X-Ray Inspection with Intra-Pulse Multi-Energy Method for Material Discrimination, *Physics Procedia*, 66, 232-241, doi:10.1016/j.phpro.2015.05.030 .

Scofield, J.H. (1973), Theoretical Photoionization Cross Sections from 1 to 1500 keV, Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-51326.

SidneyY (2006) Applied Nuclear Physics - Lecture 20 Gamma Interactions: Photoelectric Effect and Pair Production, MIT Course Number 22.101 (<https://ocw.mit.edu/courses/nuclear-engineering/22-101-applied-nuclear-physics-fall-2006/lecture-notes/lec20.pdf>).

Smith J. A., Martz H. E., Kallman J. S. (2011) Case for an Improved Effective-Atomic-Number for the Electronic Baggage Scanning Program, Lawrence Livermore National Laboratory Livermore, CA 94551, November 21, 2011.

Taylor M. L., Smith R. L., Dossing F., Franich R. D. (2012) Robust calculation of effective atomic numbers: The Auto-Zeff software, Medical Physics · April 2012

Verger L., Bonnefoy JP., Glasser F., Ouvrier-Buffet P. (1997) New developments in CdTe and CdZnTe detectors for X and gamma-ray applications, Journal of electronic materials, vol 26, no. 6, pp 738-44, 1997.

Wait, J.M.S., Cody, D., Jones, A.K., et al. (2015) Performance Evaluation of Material Decomposition With Rapid-Kilovoltage-Switching Dual-Energy CT and Implications for Assessing Bone Mineral Density, American Journal of Roentgenology, 204:1234–1241, doi:10.2214/AJR.14.13093.

Wells, K., Bradley, D.A.B. (2012) A review of X-ray explosives detection techniques for checked baggage, Applied Radiation and Isotopes 70, 1729–1746 .

Wilke, C.A. (2005), Leveraging technology to improve aviation security, Part II, US Congress Hearing, Committee on Homeland Security, Subcommittee on Economic Security, Infrastructure Protection, and Cybersecurity, July 19 2005.

Wood, J.W. (2005). Leveraging technology to improve aviation security, Part II, US Congress Hearing, Committee on Homeland Security, Subcommittee on Economic Security, Infrastructure Protection, and Cybersecurity, July 19 2005.

Lista contribuțiilor proprii

10.1 Lucrări publicate în reviste

10.1.1 Reviste cotate ISI

1. O. G. Dului, T. I. Ivankina, Edward Herman, C. Richman, I. Tiseanu
Orientation distribution function of biotite platelets based on optical, thin
sections and μ -CT image analysis in an Outokumpu (Finland) biotite gneiss:
Comparison with neutron diffraction texture analysis
Russian Journal of Earth Sciences, vol 16, no. 3, 2016
2. Edward Hermann, Octavian G. Dului, Mihai Iovea
Romanian Reports in Physics – submitted in February 2017

10.2 Lucrări prezentate la conferințe

10.2.1 Conferințe internaționale

1. Violeta Iancu, Gabriel Suliman, V Turturica, Edward Hermann, Mihai Iovea,
Dimiter L. Balabanski, Hideaki Ohgaki, Calin A. Ur
Nondestructive material inspections using brilliant quasi-monoenergetic gamma
beams at ELI-NP
The 2017 International Conference on Applications of Nuclear Techniques
Creta – Grecia, 11- 17 iunie 2017, <http://www.creteconf.org>

ANEXE

A1. Medierea coeficientului de atenuare

```
load PVC_NIST.csv

%Start from 20 KeV

Elem_Mass_Atten=PVC_NIST(1:143,2)
delta=8
[m,n] = size(Elem_Mass_Atten)
max=m-delta+1

i=1
for j=1:delta:max

    %area(i)=j
    Elem_Mass_AttenEff(i) =trapz(Elem_Mass_Atten(j:j+delta-1))/(delta-1)
    i=i+1
end
MiuM=Elem_Mass_AttenEff'
```

A.2. Calculul compoziției chimice și a densității

```
load Elem_Mass_Atte_Eff_2.csv
Elem_Mass_Atten=Elem_Mass_Atte_Eff_2
Elem_Mass_Atten(72,:)=1

%Initial guess
x0(1:30)=0
x0=x0'
x0(1)=0.1
x0(6)=0.2

Elem_Mass_Atten(72,:)=1

for j=1:30
    if j~=1 && j~=6 && j~=7 && j~=8 && j~=9 && j~=11 && j~=12 && j~=13 &&
j~=14 && j~=15 && j~=16 && j~=17 && j~=19 && j~=20 && j<26
        Elem_Mass_Atten(1:71,j)=0
    end
end

load RDX_NIST_EFF_2.csv
XSubst=RDX_NIST_EFF_2(1:71,1)
Rho=1.654

Elem_Mass_Atten(72,:)=0
XSubst(72,:)=0
XSubst(1:72,:)=XSubst(1:72,:)*Rho

addpath('g:/Matlab')
optnew = optimset('TolX',1e-9);

%x1=nnls(Elem_Mass_Atten,XSubst,struct('Accy',9))
x=lsqnonneg(Elem_Mass_Atten,XSubst,optnew)

RhoCalc=sum(x)
NormCalc=norm(Elem_Mass_Atten*x-XSubst)
x=x/RhoCalc
```

A.3. Determinarea compoziției chimice în cazul zgnotului statistic

```
clear all
XTeor=load (,TeorSubs.csv')

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

absNoise=10^-2
XSubst=load (\Subst\RDX_NIST_Eff2.csv')
isubst=13

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
XSubst= XSubst(:,1);
xTeor=XTeor(:,isubst);
Rho=xTeor(31,1);

load
F:\MaterialDetectionUsingXRayAttenuation\ver2016_06_30\Data2016_06\Elements\El
em_Mass_Atte_Eff_2.csv
Elem_Mass_Atten=Elem_Mass_Atte_Eff_2

Elem_Mass_Atten(72,:)=1
for j=1:30
    if j~=1 && j~=6 && j~=7 && j~=8 && j~=9 && j~=11 && j~=12 && j~=13 &&
j~=14 && j~=15 && j~=16 && j~=17 && j~=19 && j~=20 && j<26
        Elem_Mass_Atten(1:71,j)=0
    end
end

Elem_Mass_Atten(72,:)=0
XSubst(72,:)=0
XSubst(1:72,:)=XSubst(1:72,:)*Rho

iter=1000

for k=1:iter

    x = zeros(30)
```

```

Noise=-absNoise/2 +(absNoise)*rand(72,1)
avgNoise=mean(abs(Noise))

XSubst1=XSubst+(XSubst*Noise)

optnew = optimset('TolX',1e-9);

x=lsqnonneg(Elem_Mass_Atten,XSubst1,optnew)

RhoCalc=sum(x)
%NormCalc=norm(Elem_Mass_Atten*x-XSubst1)
x=x/RhoCalc

Rhi(k)=RhoCalc;
xi(:,k)=x;
end

Rhof=mean(Rhi);
for i=1:30
    xf(i)=mean(xi(i,:))
end
xf=xf'

%ERROR CALC
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
xError=0

for i=1:30
    if xTeor(i)>0
        xError=xError+((xTeor(i)-xf(i))/xTeor(i))^2

        disp(i)
        disp(xError)
    end
end

xError=sqrt(xError)
rhoError=abs(Rhof-Rho)/Rho

```

```

%Display
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

disp(' ');
for i=1:30
    if xTeor(i,1)>0
        szStr=[num2str(i) ': ' num2str(xf(i))];
        disp(szStr);
    end

end

szStr=['Density=' num2str(Rhof) ' g/cm3'];
disp(szStr);

szStr=['CompErr=' num2str(xError)];
disp(szStr);
szStr=['DensErr=' num2str(rhoError)];
disp(szStr);

```

A4. Rezultatele complete si incertitudinile obtinute la determinarea compoziției chimice și a densității pentru substanțe omogene

Subst	Teor	1keV	2keV	4keV	6keV	8keV
Water	1: 0.111898 8: 0.888102 Density=1.0000 g/cm3	1: 0.111828 8: 0.888171 Density=1.000038 CompErr=6.258e-04 DensErr=3.8063e-05	1: 0.11187 8: 0.88594 Density=1.00008 CompErr=0.00244 DensErr=7.96229e-05	1: 0.11189 8: 0.88650 Density=1.00005 CompErr=0.00180 DensErr=5.4772823e-05	1: 0.11192 8: 0.88807 Density=0.99998 CompErr=2.51629e-04 DensErr=2.305753e-05	1: 0.11179 8: 0.88731 Density=1.00011 CompErr=0.001325 DensErr=1.14225e-04
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.11194 8: 0.88764 Density=0.99996 g/cm3 CompErr=6.55e-04 DensErr=3.60e-05	1: 0.11189 8: 0.88579 Density=1.0002 g/cm3 CompErr=0.0026 DensErr=7.07634e-05	1: 0.11190 8: 0.88642 Density=1.00005 CompErr=0.001889 DensErr=4.925499e-05	1: 0.111816 8: 0.887739 Density=1.00008 CompErr=8.4000e-04 DensErr=7.6178e-05	1: 0.111802 8: 0.887369 Density=1.00010 CompErr=0.0011854 DensErr=1.002658e-04
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.1131 8: 0.8736 Density=0.9922 CompErr=0.01961 DensErr=6.645e-04	1: 0.112237 8: 0.873186 Density=0.99774 CompErr=0.01706 DensErr=9.2366e-05	1: 0.112302 8: 0.877999 Density=0.99993 CompErr=0.01196 DensErr=6.7667e-05	1: 0.112204 8: 0.880839 Density=0.99996 CompErr=0.008624 DensErr=3.8792e-05	1: 0.111980 8: 0.882115 Density=1.00009 CompErr=0.006780 DensErr=9.3403e-05
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.1170 8: 0.0965 Density=1.0072 CompErr=0.2295 DensErr=0.00190	1: 0.117989 8: 0.735313 Density=0.999727 CompErr=0.18044 DensErr=2.7284e-04	1: 0.11530 8: 0.77168 Density=1.00034 CompErr=0.13458 DensErr=3.40134e-04	1: 0.11562 8: 0.79133 Density=0.99953 CompErr=0.11393 DensErr=4.68089e-04	1: 0.115350 8: 0.810348 Density=0.9992 CompErr=0.09282 DensErr=7.3250e-04
Noise 1%		1: 0.1460 8: 0.2985 Density=1.0800 CompErr=0.7301 DensErr=0.0111	1: 0.13717 8: 0.32740 Density=0.9966 CompErr=0.67054 DensErr=0.0034	1: 0.15066 8: 0.33587 Density=0.98945 CompErr=0.71177 DensErr=0.01055	1: 0.147037 8: 0.361817 Density=0.99173 CompErr=0.67066 DensErr=0.00826	1: 0.146378 8: 0.380766 Density=0.991018 CompErr=0.64906 DensErr=0.00898
PE	1: 0.143716 6: 0.856284 Density=0.9300 g/cm3	1: 0.144701 6: 0.852666 Density=0.92921 g/cm3 CompErr=0.0080 DensErr=8.45099e-04	1: 0.143710 6: 0.856282 Density=0.929999/cm3 CompErr=8.0497e-06 DensErr=1.4625e-06	1: 0.14385 6: 0.85614 Density=0.92989g/cm3 CompErr=9.42050e-04 DensErr=1.16434e-04	1: 0.14380 6: 0.85609 Density=0.92992 g/cm3 CompErr=6.65483e-04 DensErr=8.0160e-05	1: 0.143839 6: 0.855877 Density=0.92999g/cm3 CompErr=9.7966e-04 DensErr=1.08504e-04

Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.144715 6: 0.852619 Density= 0.92920g/cm3 CompErr=0.008 17 DensErr=8.555 22e-04	1: 0.143870 6: 0.855940 Density= 0.92988g/cm3 CompErr=0.001 144 DensErr=1.3201 1e-04	1: 0.14392 6: 0.85600 Density= 0.92983g/cm3 CompErr=0.001 47 DensErr=1.780 60e-04	1: 0.143831 6: 0.856047 Density= 0.92990g/cm3 CompErr=8.4747 5e-04 DensErr=1.02004 1e-04	1: 0.143878 6: 0.855776 Density= 0.929867g/cm3 CompErr=0.00127 DensErr=1.42839e-04
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.1460156 6: 0.8486526 Density= 0.929845g/cm 3 CompErr=0.018 3178 DensErr=0.001 97139	1: 0.145340 6: 0.853274 Density= 0.92872g/cm3 CompErr=0.011 838 DensErr= 0.001378	1: 0.145077 6: 0.853556 Density= 0.928929g/cm 3 CompErr=0.009 99 DensErr=0.001 150	1: 0.14487 6: 0.85417 Density= 0.92908g/cm3 CompErr=0.0084 DensErr=9.7910e -04	1: 0.144896 6: 0.852999 Density=0.929067g/cm3 CompErr=0.00906 DensErr= 0.00100
Noise 0.1%		1: 0.1697866 6: 0.7857479 Density= 0.925210g/cm 3 CompErr=0.199 230 DensErr=0.020 8281	1: 0.160331 6: 0.827486 Density= g/cm3 CompErr=0.120 400 DensErr= 0.013647	1: 0.156755 6: 0.819930 Density= 0.91975g/cm3 CompErr=0.100 17 DensErr= 0.01102	1: 0.15410 6: 0.84265 Density=0.92191 g/cm3 CompErr=0.0740 DensErr= 0.00869	1: 0.154889 6: 0.826259 Density= 0.92875g/cm3 CompErr=0.08529 DensErr=0.00934
Noise 1%		1: 0.38350 6: 0.48662 Density=0.8843 3g/cm3 CompErr=1.723 47 DensErr=0.148 104	1: 0.33210 6: 0.57576 Density= g/cm3 CompErr=1.351 1 DensErr= 0.1200	1: 0.30744 6: 0.52992 Density= 0.83025g/cm3 CompErr=1.201 18 DensErr=0.107 257	1: 0.27756 6: 0.58443 Density= 0.84548g/cm3 CompErr=0.9838 7 DensErr=0.09088	1: 0.27053 6: 0.60938 Density= 0.84897g/cm3 CompErr=0.92834 DensErr=0.08713
Polystyrene	1 : 0.0799 6 : 0.9512 Density =1.060 g/cm3	1: 0.079880 6: 0.915211 Density=1.0576 78 g/cm3 CompErr=0.037 84 DensErr=0.002 190	1: 0.077733 6: 0.921425 Density= 1.05970g/cm3 CompErr=0.041 38 DensErr=2.8327 e-04	1: 0.07780 6: 0.92121 Density= 1.05964g/cm3 CompErr=0.041 0 DensErr=3.348 6e-04	1: 0.07780 6: 0.92178 Density= 1.05964g/cm3 CompErr=0.0405 9 DensErr=3.40494 e-04	1:0.077698 6:0.92157 Density=1.0597 CompErr=0.041592 DensErr=0.00024764
Noise 0.001%		1: 0.079899 6: 0.915149 Density= 1.05766g/cm3 CompErr=0.037 90 DensErr= 0.00220	1: 0.07774 6: 0.92140 Density=1.0597 0 g/cm3 CompErr=0.041 34 DensErr=2.9023 40e-04	1: 0.077807 6: 0.921169 Density=1.0596 g/cm3 CompErr=0.041 02 DensErr=3.452 125e-04	1: 0.07780 6: 0.92179 Density=1.05964 4g/cm3 CompErr=0.0406 30 DensErr=3.3514e -04	1 :0.077693 6: 0.92159 Density=1.0597g/cm3 CompErr=0.041619 DensErr=0.00024382
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.08118 6: 0.91124 Density=1.0564 43 g/cm3 CompErr=0.044 95 DensErr=0.003 355	1: 0.078971 6: 0.919134 Density= 1.05851g/cm3 CompErr=0.035 657 DensErr=0.0014 00	1: 0.078565 6: 0.918813 Density=1.0589 1 g/cm3 CompErr=0.037 92 DensErr= 0.00103	1: 0.07847 6: 0.92073 Density=1.0591 g/cm3 CompErr=0.0370 2 DensErr=8.8426e -04	1: 0.078279 6: 0.92018 Density=1.0592g/cm3 CompErr=0.038406 DensErr=0.00076776

Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.102280 6: 0.846965 Density= 1.037311 g/cm3 CompErr=0.300 77 DensErr= 0.02140	1: 0.0929567 6: 0.8938935 Density=1.0455 5 g/cm3 CompErr=0.174 165 DensErr=0.0136 3	1: 0.08969 6: 0.88564 Density= 1.04852g/cm3 CompErr=0.140 583 DensErr=0.010 835	1: 0.08747 6: 0.90888 Density=1.05057 g/cm3 CompErr=0.1047 1 DensErr=0.00890	1: 0.086392 6: 0.90518 Density=1.0515 g/cm3 CompErr=0.094562 DensErr=0.007993
Noise 1%		1: 0.312074 6: 0.52249 Density= 0.89844g/cm3 CompErr=2.940 548 DensErr=0.152 4153	1: 0.26366 6: 0.63388 Density=0.9279 6g/cm3 CompErr=2.323 96 DensErr=0.1245 6	1: 0.205271 6: 0.633208 Density=0.9618 86 g/cm3 CompErr=1.604 32 DensErr=0.092 560	1: 0.2275 6: 0.59593 Density=0.94837 g/cm3 CompErr=1.8847 DensErr=0.10531	1: 0.19455 6: 0.67334 Density=0.969 g/cm3 CompErr=1.4643 DensErr=0.085848 >>
PMMA	1 : 0.0792 6 : 0.6031 8 : 0.3177 Density=1.18 g/cm3	1: 0.077997 6: 0.49049 8: 0.23167 Density=1.1826 g/cm3 CompErr=0.329 28 DensErr=0.002 2396	1: 0.080482 6: 0.59452 8: 0.31233 Density=1.1801 g/cm3 CompErr=0.027 394 DensErr=7.5244 e-005	1: 0.080684 6: 0.59538 8: 0.30825 Density=1.1801 g/cm3 CompErr=0.037 413 DensErr=5.990 1e-005	1: 0.080336 6: 0.60054 8: 0.31911 Density=1.1802 g/cm3 CompErr=0.0156 03 DensErr=0.00018 421	1: 0.080837 6: 0.59943 8: 0.31973 Density=1.1797 g/cm3 CompErr=0.022469 DensErr=0.00027046
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.077961 6: 0.49058 8: 0.23162 Density=1.1827 g/cm3 CompErr=0.329 33 DensErr=0.002 2696	1: 0.080483 6: 0.59452 8: 0.31233 Density=1.1801 g/cm3 CompErr=0.027 399 DensErr=7.491e -005	1: 0.080641 6: 0.59685 8: 0.31153 Density=1.18 g/cm3 CompErr=0.028 561 DensErr=3.882 e-005	1: 0.080336 6: 0.60054 8: 0.31911 Density=1.1802 g/cm3 CompErr=0.0156 08 DensErr=0.00018 396	1: 0.080836 6: 0.59943 8: 0.31973 Density=1.1797 g/cm3 CompErr=0.022459 DensErr=0.0002698
Noise 0.01%		1: 0.078083 6: 0.49027 8: 0.23177 Density=1.1826 g/cm3 CompErr=0.329 16 DensErr=0.002 1866	1: 0.080434 6: 0.59311 8: 0.31042 Density=1.1801 g/cm3 CompErr=0.032 293 DensErr=0.0001 2131	1: 0.080862 6: 0.59397 8: 0.31039 Density=1.1798 g/cm3 CompErr=0.034 635 DensErr=0.000 16404	1: 0.080533 6: 0.60064 8: 0.31858 Density=1.18 g/cm3 CompErr=0.0175 34 DensErr=1.5199e -005	1: 0.081013 6: 0.59907 8: 0.31991 Density=1.1795 g/cm3 CompErr=0.02485 DensErr=0.00042074
Noise 0.1%		1: 0.083529 6: 0.46651 8: 0.19783 Density=1.1797 g/cm3 CompErr=0.443 43 DensErr=0.000 25109	1: 0.08365 6: 0.55549 8: 0.27168 Density=1.178 g/cm3 CompErr=0.174 26 DensErr=0.0016 549	1: 0.084057 6: 0.54215 8: 0.26766 Density=1.1771 g/cm3 CompErr=0.196 93 DensErr=0.002 4374	1: 0.082665 6: 0.56554 8: 0.28481 Density=1.1783 g/cm3 CompErr=0.1285 DensErr=0.00146 29	1: 0.083564 6: 0.57399 8: 0.30316 Density=1.1772 g/cm3 CompErr=0.086366 DensErr=0.002397

Noise 1%		1: 0.20396 6: 0.32347 8: 0.055679 Density=1.0943 g/cm3 CompErr=1.8375 DensErr=0.072649	1: 0.19227 6: 0.33644 8: 0.11528 Density=1.1011 g/cm3 CompErr=1.6247 DensErr=0.066894	1: 0.16529 6: 0.33262 8: 0.074449 Density=1.1222 g/cm3 CompErr=1.4031 DensErr=0.049019	1: 0.15472 6: 0.35083 8: 0.12919 Density=1.1277 g/cm3 CompErr=1.1985 DensErr=0.044301	1: 0.14205 6: 0.38389 8: 0.17561 Density=1.1369 g/cm3 CompErr=0.98077 DensErr=0.036495
PET	1 : 0.041960 6 : 0.625016 8 : 0.333024 Density= 1.38 g/cm3	1: 0.041681 6: 0.50009 8: 0.24228 Density=1.3803 g/cm3 CompErr=0.33799 DensErr=0.00024	1: 0.042513 6: 0.62373 8: 0.33375 Density=1.3793 g/cm3 CompErr=0.013525 DensErr=0.00051666	1: 0.04255 6: 0.62364 8: 0.33381 Density=1.3792 g/cm3 CompErr=0.014426 DensErr=0.00055084	1: 0.04288 6: 0.623 8: 0.33411 Density=1.3788 g/cm3 CompErr=0.022406 DensErr=0.00086065	1: 0.042987 6: 0.62281 8: 0.3342 Density=1.3787 g/cm3 CompErr=0.024977 DensErr=0.00096149
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.041652 6: 0.50016 8: 0.24225 Density=1.3804 g/cm3 CompErr=0.33802 DensErr=0.00026423	1: 0.042521 6: 0.62372 8: 0.33376 Density=1.3793 g/cm3 CompErr=0.013712 DensErr=0.00052309	1: 0.042544 6: 0.62365 8: 0.33381 Density=1.3792 g/cm3 CompErr=0.014286 DensErr=0.00054595	1: 0.042892 6: 0.62297 8: 0.33413 Density=1.3788 g/cm3 CompErr=0.022702 DensErr=0.00087096	1: 0.042987 6: 0.62281 8: 0.3342 Density=1.3787 g/cm3 CompErr=0.024985 DensErr=0.00096174
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.041898 6: 0.49937 8: 0.24205 Density=1.3801 g/cm3 CompErr=0.33916 DensErr=8.098e-005	1: 0.042767 6: 0.62047 8: 0.33182 Density=1.379 g/cm3 CompErr=0.02088 DensErr=0.00073971	1: 0.042764 6: 0.62199 8: 0.33316 Density=1.379 g/cm3 CompErr=0.019775 DensErr=0.0007464	1: 0.042967 6: 0.62285 8: 0.33418 Density=1.3787 g/cm3 CompErr=0.024504 DensErr=0.00093982	1: 0.043096 6: 0.62259 8: 0.33431 Density=1.3785 g/cm3 CompErr=0.02763 DensErr=0.0010582
Noise 0.1%		1: 0.04649 6: 0.46822 8: 0.20035 Density=1.3764 g/cm3 CompErr=0.48303 DensErr=0.0026001	1: 0.047789 6: 0.57759 8: 0.29217 Density=1.3741 g/cm3 CompErr=0.20025 DensErr=0.0042673	1: 0.046878 6: 0.55904 8: 0.29321 Density=1.3746 g/cm3 CompErr=0.19792 DensErr=0.0039318	1: 0.044344 6: 0.59267 8: 0.30205 Density=1.3774 g/cm3 CompErr=0.12066 DensErr=0.001858	1: 0.044751 6: 0.59352 8: 0.31375 Density=1.3767 g/cm3 CompErr=0.10156 DensErr=0.0023578

Noise 1%		1: 0.16461 6: 0.28705 8: 0.058827 Density=1.2654 g/cm3 CompErr=3.0846 DensErr=0.083067	1: 0.16419 6: 0.29355 8: 0.11455 Density=1.268 g/cm3 CompErr=3.0328 DensErr=0.081139	1: 0.1399 6: 0.27764 8: 0.080848 Density=1.2913 g/cm3 CompErr=2.516 DensErr=0.064307	1: 0.12326 6: 0.32417 8: 0.13739 Density=1.3028 g/cm3 CompErr=2.0812 DensErr=0.055965	1: 0.12068 6: 0.33774 8: 0.19074 Density=1.3049 g/cm3 CompErr=1.9783 DensErr=0.054417
PTFE	6: 0.240183 9: 0.759818 Density= 2.250 g/cm3	6: 0.23277 9: 0.75539 Density=2.2495 g/cm3 CompErr=0.031412 DensErr=0.00021054	6: 0.24018 9: 0.75982 Density=2.25 g/cm3 CompErr=1.9122e-006 DensErr=2.4188e-007	6: 0.24021 9: 0.75979 Density=2.25 g/cm3 CompErr=9.8228e-005 DensErr=1.9999e-006	6: 0.24019 9: 0.75981 Density=2.25 g/cm3 CompErr=2.0973e-005 DensErr=6.536e-007	6: 0.2402 9: 0.7598 Density=2.25 g/cm3 CompErr=8.2909e-005 DensErr=1.9495e-006
Noise 0.001%		6: 0.23109 9: 0.75564 Density=2.2491 g/cm3 CompErr=0.038266 DensErr=0.00040844	6: 0.23796 9: 0.75929 Density=2.2497 g/cm3 CompErr=0.0092787 DensErr=0.00013796	6: 0.24007 9: 0.75986 Density=2.2499 g/cm3 CompErr=0.00047387 DensErr=6.2336e-005	6: 0.24007 9: 0.75987 Density=2.2499 g/cm3 CompErr=0.00049005 DensErr=5.0136e-005	6: 0.24017 9: 0.75981 Density=2.25 g/cm3 CompErr=5.2037e-005 DensErr=1.5944e-005
Noise 0.01%		6: 0.21375 9: 0.75117 Density=2.2435 g/cm3 CompErr=0.11066 DensErr=0.0028693	6: 0.21382 9: 0.74971 Density=2.2451 g/cm3 CompErr=0.11056 DensErr=0.002195	6: 0.21996 9: 0.75542 Density=2.2464 g/cm3 CompErr=0.084387 DensErr=0.0016101	6: 0.22733 9: 0.75297 Density=2.2469 g/cm3 CompErr=0.054248 DensErr=0.0013683	6: 0.23133 9: 0.75726 Density=2.2479 g/cm3 CompErr=0.037001 DensErr=0.0009186
Noise 0.1%		6: 0.093857 9: 0.72714 Density=2.1908 g/cm3 CompErr=0.61074 DensErr=0.026319	6: 0.090632 9: 0.68732 Density=2.2006 g/cm3 CompErr=0.62992 DensErr=0.021952	6: 0.082379 9: 0.69979 Density=2.2099 g/cm3 CompErr=0.66175 DensErr=0.017807	6: 0.1072 9: 0.68082 Density=2.2165 g/cm3 CompErr=0.56337 DensErr=0.014902	6: 0.11519 9: 0.69357 Density=2.2209 g/cm3 CompErr=0.52766 DensErr=0.012935

Noise 1%		6: 0.0097262 9: 0.66601 Density=2.1085 g/cm3 CompErr=0.96742 DensErr=0.06288	6: 0.010653 9: 0.64864 Density=2.1174 g/cm3 CompErr=0.96678 DensErr=0.058926	6: 0.0089541 9: 0.63514 Density=2.1138 g/cm3 CompErr=0.9766 DensErr=0.060512	6: 0.014818 9: 0.59689 Density=2.1042 g/cm3 CompErr=0.96249 DensErr=0.064779	6: 0.012379 9: 0.53801 Density=2.0817 g/cm3 CompErr=0.99237 DensErr=0.074788
PVC	1 : 0.048382 6 : 0.384361 17 : 0.567257 Density=1.406 g/cm3	1: 0.049522 6: 0.38143 17: 0.56628 Density=1.4045 g/cm3 CompErr=0.024815 DensErr=0.0010379	1: 0.051326 6: 0.37578 17: 0.56719 Density=1.4023 g/cm3 CompErr=0.064829 DensErr=0.002597	1: 0.051057 6: 0.3766 17: 0.56721 Density=1.4027 g/cm3 CompErr=0.058871 DensErr=0.0023618	1: 0.053337 6: 0.36996 17: 0.56706 Density=1.3999 g/cm3 CompErr=0.10906 DensErr=0.0043507	1: 0.052361 6: 0.37275 17: 0.56708 Density=1.4011 g/cm3 CompErr=0.087604 DensErr=0.0034953
Noise 0.001%		1: 0.050264 6: 0.37967 17: 0.56592 Density=1.4036 g/cm3 CompErr=0.040841 DensErr=0.0017408	1: 0.051607 6: 0.37534 17: 0.56653 Density=1.402 g/cm3 CompErr=0.070685 DensErr=0.002857	1: 0.051405 6: 0.37574 17: 0.56719 Density=1.4023 g/cm3 CompErr=0.066388 DensErr=0.0026567	1: 0.053173 6: 0.37043 17: 0.56705 Density=1.4001 g/cm3 CompErr=0.10545 DensErr=0.0042015	1: 0.05235 6: 0.37278 17: 0.56708 Density=1.4011 g/cm3 CompErr=0.087365 DensErr=0.0034809
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.064983 6: 0.34738 17: 0.56267 Density=1.3863 g/cm3 CompErr=0.35644 DensErr=0.014008	1: 0.060843 6: 0.35596 17: 0.56197 Density=1.3906 g/cm3 CompErr=0.26811 DensErr=0.010955	1: 0.05622 6: 0.36613 17: 0.56175 Density=1.396 g/cm3 CompErr=0.16908 DensErr=0.0070785	1: 0.054174 6: 0.37061 17: 0.56205 Density=1.3988 g/cm3 CompErr=0.12527 DensErr=0.0051522	1: 0.055058 6: 0.36776 17: 0.5638 Density=1.3978 g/cm3 CompErr=0.14472 DensErr=0.0058448
Noise 0.1%		1: 0.12177 6: 0.11524 17: 0.52476 Density=1.3295 g/cm3 CompErr=1.6724 DensErr=0.054432	1: 0.11122 6: 0.15671 17: 0.52983 Density=1.3408 g/cm3 CompErr=1.429 DensErr=0.046338	1: 0.11104 6: 0.18451 17: 0.52326 Density=1.3379 g/cm3 CompErr=1.3978 DensErr=0.048441	1: 0.10969 6: 0.20312 17: 0.51276 Density=1.3426 g/cm3 CompErr=1.3555 DensErr=0.045124	1: 0.10526 6: 0.21466 17: 0.52788 Density=1.3481 g/cm3 CompErr=1.2577 DensErr=0.041202

Noise 1%		1: 0.15118 6: 0.010683 17: 0.15305 Density=1.2557 g/cm3 CompErr=2.4481 DensErr=0.1069	1: 0.14009 6: 0.019285 17: 0.20425 Density=1.2662 g/cm3 CompErr=2.2146 DensErr=0.099452	1: 0.14442 6: 0.020254 17: 0.26691 Density=1.28 g/cm3 CompErr=2.2623 DensErr=0.089621	1: 0.13966 6: 0.025047 17: 0.27734 Density=1.2911 g/cm3 CompErr=2.1667 DensErr=0.08173	1: 0.14982 6: 0.022717 17: 0.30668 Density=1.2911 g/cm3 CompErr=2.3435 DensErr=0.081702
CaSO4	8 : 0.470081 16 : 0.235534 20 : 0.294385 Density= 2.96 g/cm3	8: 0.46721 16: 0.23424 20: 0.29457 Density=2.9582 g/cm3 CompErr=0.0082225 DensErr=0.00061938	8: 0.46295 16: 0.23597 20: 0.29363 Density=2.9602 g/cm3 CompErr=0.015493 DensErr=5.1028e-00	8: 0.47013 16: 0.23483 20: 0.29427 Density=2.9601 g/cm3 CompErr=0.0030024 DensErr=2.9846e-005	16: 0.23206 20: 0.29507 Density=2.9573 g/cm3 CompErr=0.02497 DensErr=0.00090485	8: 0.46363 16: 0.23321 20: 0.29509 Density=2.9584 g/cm3 CompErr=0.017083 DensErr=0.00053945
Noise 0.001%		8: 0.46399 16: 0.2339 20: 0.2944 Density=2.9558 g/cm3 CompErr=0.014698 DensErr=0.0014073	8: 0.46203 16: 0.23613 20: 0.29306 Density=2.9581 g/cm3 CompErr=0.017879 DensErr=0.00063547	8: 0.46737 16: 0.23381 20: 0.29383 Density=2.959 g/cm3 CompErr=0.0095104 DensErr=0.00032116	8: 0.46247 16: 0.23169 20: 0.29493 Density=2.9583 g/cm3 CompErr=0.023059 DensErr=0.00056271	8: 0.46278 16: 0.23291 20: 0.29518 Density=2.9582 g/cm3 CompErr=0.019309 DensErr=0.00061467
Noise 0.01%		8: 0.4139 16: 0.23317 20: 0.28955 Density=2.9229 g/cm3 CompErr=0.12106 DensErr=0.012531	8: 0.40247 16: 0.24256 20: 0.28308 Density=2.9299 g/cm3 CompErr=0.15182 DensErr=0.010153	8: 0.42983 16: 0.21601 20: 0.29018 Density=2.9395 g/cm3 CompErr=0.12002 DensErr=0.0069199	8: 0.43428 16: 0.23065 20: 0.28757 Density=2.946 g/cm3 CompErr=0.08224 DensErr=0.0047206	8: 0.43125 16: 0.23126 20: 0.29469 Density=2.9438 g/cm3 CompErr=0.084587 DensErr=0.0054792
Noise 0.1%		8: 0.13455 16: 0.20517 20: 0.23104 Density=2.7651 g/cm3 CompErr=0.75657 DensErr=0.065847	8: 0.092953 16: 0.28936 20: 0.19897 Density=2.7847 g/cm3 CompErr=0.89492 DensErr=0.059207	8: 0.14728 16: 0.23788 20: 0.21569 Density=2.7996 g/cm3 CompErr=0.73696 DensErr=0.054181	8: 0.14266 16: 0.26317 20: 0.18968 Density=2.8165 g/cm3 CompErr=0.79082 DensErr=0.048483	8: 0.13205 16: 0.25801 20: 0.21134 Density=2.8151 g/cm3 CompErr=0.77831 DensErr=0.048941

Noise 1%		8: 0.013316 16: 0.15807 20: 0.11109 Density=2.5769 g/cm3 CompErr=1.2 DensErr=0.129 43	8: 0.010335 16: 0.17166 20: 0.090897 Density=2.6217 g/cm3 CompErr=1.227 9 DensErr=0.1142 8	8: 0.017998 16: 0.13276 20: 0.0999 Density=2.6556 g/cm3 CompErr=1.245 7 DensErr=0.102 84	8: 0.015028 16: 0.086499 20: 0.099598 Density=2.6711 g/cm3 CompErr=1.3324 DensErr=0.09758 8	8: 0.012583 16: 0.065931 20: 0.098017 Density=2.6748 g/cm3 CompErr=1.3823 DensErr=0.096361
ETHANOL	1 : 0.131273 6 : 0.521435 8 : 0.347292 Density=0.7890 g/cm3	1: 0.13154 6: 0.52081 8: 0.34765 Density=0.7888 2 g/cm3 CompErr=0.002 5689 DensErr=0.000 22795	1: 0.13156 6: 0.52076 8: 0.34768 Density=0.7888 1 g/cm3 CompErr=0.002 7823 DensErr=0.0002 4671	1: 0.13152 6: 0.52086 8: 0.34762 Density=0.7888 4 g/cm3 CompErr=0.002 3521 DensErr=0.000 20858	1: 0.13146 6: 0.52101 8: 0.34754 Density=0.78888 g/cm3 CompErr=0.0017 658 DensErr=0.00015 645	1: 0.13149 6: 0.52091 8: 0.34759 Density=0.78885 g/cm3 CompErr=0.0021453 DensErr=0.00019038
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.13155 6: 0.52086 8: 0.34756 Density=0.7888 1 g/cm3 CompErr=0.002 5222 DensErr=0.000 24141	1: 0.13157 6: 0.52074 8: 0.34769 Density=0.7888 g/cm3 CompErr=0.002 879 DensErr=0.0002 5509	1: 0.13152 6: 0.52085 8: 0.34763 Density=0.7888 3 g/cm3 CompErr=0.002 4056 DensErr=0.000 21351	1: 0.13145 6: 0.52102 8: 0.34753 Density=0.78888 g/cm3 CompErr=0.0017 025 DensErr=0.00015 135	1: 0.13149 6: 0.52092 8: 0.34759 Density=0.78885 g/cm3 CompErr=0.002099 DensErr=0.00018675
Noise 0.01%	Noise 0.01%	1: 0.13184 6: 0.51939 8: 0.34501 Density=0.7886 4 g/cm3 CompErr=0.008 8097 DensErr=0.000 45887	1: 0.13177 6: 0.51869 8: 0.34545 Density=0.7886 8 g/cm3 CompErr=0.008 3757 DensErr=0.0004 1153	1: 0.13176 6: 0.51996 8: 0.34754 Density=0.7886 7 g/cm3 CompErr=0.004 7229 DensErr=0.000 42138	1: 0.13172 6: 0.52048 8: 0.3478 Density=0.7887 g/cm3 CompErr=0.0041 494 DensErr=0.00038 299	1: 0.13183 6: 0.52025 8: 0.34792 Density=0.78863 g/cm3 CompErr=0.0051423 DensErr=0.00047307
Noise 0.1%		1: 0.13487 6: 0.49281 8: 0.29532 Density=0.7885 g/cm3 CompErr=0.161 74 DensErr=0.000 63594	1: 0.13429 6: 0.48258 8: 0.30565 Density=0.7879 g/cm3 CompErr=0.143 03 DensErr=0.0013 951	1: 0.13372 6: 0.47619 8: 0.31288 Density=0.7877 3 g/cm3 CompErr=0.133 02 DensErr=0.001 6124	1: 0.13349 6: 0.49113 8: 0.32136 Density=0.78779 g/cm3 CompErr=0.0961 15 DensErr=0.00153 44	1: 0.13513 6: 0.49385 8: 0.33505 Density=0.78665 g/cm3 CompErr=0.070031 DensErr=0.0029769

Noise 1%		1: 0.23094 6: 0.35106 8: 0.081185 Density=0.7511 7 g/cm3 CompErr=1.127 1 DensErr=0.047 951	1: 0.21165 6: 0.34644 8: 0.1116 Density=0.7590 4 g/cm3 CompErr=0.973 69 DensErr=0.0379 7	1: 0.19643 6: 0.3158 8: 0.092962 Density=0.7648 8 g/cm3 CompErr=0.968 59 DensErr=0.030 57	1: 0.1934 6: 0.33181 8: 0.13922 Density=0.76612 g/cm3 CompErr=0.8456 8 DensErr=0.02899 9	1: 0.18662 6: 0.36464 8: 0.19699 Density=0.76836 g/cm3 CompErr=0.67491 DensErr=0.026164
AMMONIUM NITRATE	1 : 0.050370 7 : 0.349978 8 : 0.599652 Density= 1.725 g/cm3	1: 0.050573 7: 0.35072 8: 0.59741 Density=1.7248 g/cm3 CompErr=0.005 9006 DensErr=0.000 12232	1: 0.050495 7: 0.34497 8: 0.60195 Density=1.7248 g/cm3 CompErr=0.015 017 DensErr=0.0001 1344	1: 0.050476 7: 0.34968 8: 0.5998 Density=1.7248 g/cm3 CompErr=0.002 2858 DensErr=9.555 8e-005	1: 0.050447 7: 0.34972 8: 0.59982 Density=1.7249 g/cm3 CompErr=0.0017 116 DensErr=6.9341e -005	1: 0.05064 7: 0.34944 8: 0.59982 Density=1.7246 g/cm3 CompErr=0.0055778 DensErr=0.00024768
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.050553 7: 0.3497 8: 0.59792 Density=1.7248 g/cm3 CompErr=0.004 7068 DensErr=0.000 10542	1: 0.050496 7: 0.34514 8: 0.6018 Density=1.7248 g/cm3 CompErr=0.014 501 DensErr=0.0001 1205	1: 0.050475 7: 0.34962 8: 0.59985 Density=1.7248 g/cm3 CompErr=0.002 3355 DensErr=9.480 9e-005	1: 0.050457 7: 0.3497 8: 0.59983 Density=1.7249 g/cm3 CompErr=0.0019 242 DensErr=7.8304e -005	1: 0.050634 7: 0.34935 8: 0.59994 Density=1.7246 g/cm3 CompErr=0.0055569 DensErr=0.0002423
Noise 0.01%	Noise 0.01%	1: 0.050804 7: 0.34711 8: 0.59724 Density=1.7246 g/cm3 CompErr=0.012 555 DensErr=0.000 24776	1: 0.050475 7: 0.34824 8: 0.59807 Density=1.725 g/cm3 CompErr=0.005 9868 DensErr=2.7964 e-005	1: 0.050641 7: 0.35035 8: 0.59781 Density=1.7247 g/cm3 CompErr=0.006 2863 DensErr=0.000 18243	1: 0.050608 7: 0.34973 8: 0.59955 Density=1.7246 g/cm3 CompErr=0.0047 71 DensErr=0.00021 028	1: 0.050745 7: 0.34946 8: 0.59966 Density=1.7244 g/cm3 CompErr=0.0075844 DensErr=0.00033984
Noise 0.1%		1: 0.058899 7: 0.3205 8: 0.5861 Density=1.7163 g/cm3 CompErr=0.190 47 DensErr=0.005 0685	1: 0.055745 7: 0.336 8: 0.5918 Density=1.7195 g/cm3 CompErr=0.114 69 DensErr=0.0031 7	1: 0.052988 7: 0.35566 8: 0.57664 Density=1.7231 g/cm3 CompErr=0.066 612 DensErr=0.001 0985	1: 0.051452 7: 0.36054 8: 0.5768 Density=1.7247 g/cm3 CompErr=0.0531 43 DensErr=0.00018 326	1: 0.052507 7: 0.35044 8: 0.5958 Density=1.7222 g/cm3 CompErr=0.042937 DensErr=0.0016504

Noise 1%		1: 0.13851 7: 0.32212 8: 0.27404 Density=1.6273 g/cm3 CompErr=1.8338 DensErr=0.056662	1: 0.1412 7: 0.30183 8: 0.28488 Density=1.6283 g/cm3 CompErr=1.8832 DensErr=0.056076	1: 0.12968 7: 0.30018 8: 0.33083 Density=1.6408 g/cm3 CompErr=1.6432 DensErr=0.048823	1: 0.11948 7: 0.31854 8: 0.34731 Density=1.6521 g/cm3 CompErr=1.4379 DensErr=0.04225	1: 0.11615 7: 0.31324 8: 0.40798 Density=1.6536 g/cm3 CompErr=1.3485 DensErr=0.04141
NITROGLYCERIN	1 : 0.022193 6 : 0.158675 7 : 0.185040 8 : 0.634093 Density=1.6 g/cm3	1: 0.022313 6: 0.15612 7: 0.18928 8: 0.63222 Density=1.5998 g/cm3 CompErr=0.028704 DensErr=0.0001119	1: 0.02254 6: 0.15531 7: 0.1893 8: 0.63285 Density=1.5995 g/cm3 CompErr=0.035066 DensErr=0.00032977	1: 0.022585 6: 0.15853 7: 0.18355 8: 0.63533 Density=1.5994 g/cm3 CompErr=0.019532 DensErr=0.00037142	1: 0.022937 6: 0.14855 7: 0.19939 8: 0.62911 Density=1.5989 g/cm3 CompErr=0.10615 DensErr=0.00070999	1: 0.022652 6: 0.15082 7: 0.19657 8: 0.62995 Density=1.5993 g/cm3 CompErr=0.082486 DensErr=0.00043858
Noise 0.001%		1: 0.022322 6: 0.15602 7: 0.18947 8: 0.63213 Density=1.5998 g/cm3 CompErr=0.029935 DensErr=0.00011906	1: 0.022534 6: 0.15532 7: 0.1893 8: 0.63284 Density=1.5995 g/cm3 CompErr=0.034898 DensErr=0.00032411	1: 0.022595 6: 0.15845 7: 0.18364 8: 0.63531 Density=1.5994 g/cm3 CompErr=0.019763 DensErr=0.00037994	1: 0.02294 6: 0.14855 7: 0.19938 8: 0.62913 Density=1.5989 g/cm3 CompErr=0.10617 DensErr=0.0007129	1: 0.022659 6: 0.1508 7: 0.19659 8: 0.62995 Density=1.5993 g/cm3 CompErr=0.082741 DensErr=0.00044504
Noise 0.01%		1: 0.022463 6: 0.15303 7: 0.19633 8: 0.62698 Density=1.5997 g/cm3 CompErr=0.072528 DensErr=0.00018934	1: 0.022589 6: 0.15171 7: 0.19621 8: 0.62936 Density=1.5994 g/cm3 CompErr=0.077102 DensErr=0.00037418	1: 0.022793 6: 0.15279 7: 0.19264 8: 0.63177 Density=1.5991 g/cm3 CompErr=0.061701 DensErr=0.00057154	1: 0.023169 6: 0.14603 7: 0.20272 8: 0.62807 Density=1.5985 g/cm3 CompErr=0.13231 DensErr=0.00091604	1: 0.022775 6: 0.14773 7: 0.20143 8: 0.62805 Density=1.5991 g/cm3 CompErr=0.11569 DensErr=0.00055571
Noise 0.1%		1: 0.035466 6: 0.093295 7: 0.26916 8: 0.58267 Density=1.5832 g/cm3 CompErr=0.86064 DensErr=0.010525	: 0.092192 7: 0.27517 8: 0.5945 Density=1.5866 g/cm3 CompErr=0.79232 DensErr=0.0083648	1: 0.027706 6: 0.090203 7: 0.29044 8: 0.58661 Density=1.5927 g/cm3 CompErr=0.76024 DensErr=0.0045922	1: 0.025158 6: 0.10062 7: 0.28274 8: 0.59006 Density=1.5959 g/cm3 CompErr=0.65977 DensErr=0.0025736	1: 0.024998 6: 0.10232 7: 0.27471 8: 0.59754 Density=1.5961 g/cm3 CompErr=0.61667 DensErr=0.0024607

Noise 1%		1: 0.13689 6: 0.012065 7: 0.29624 8: 0.28208 Density=1.4736 g/cm3 CompErr=5.3137 DensErr=0.078975	1: 0.12021 6: 0.011939 7: 0.30668 8: 0.33057 Density=1.4907 g/cm3 CompErr=4.5852 DensErr=0.068304	1: 0.10669 6: 0.011133 7: 0.32473 8: 0.35549 Density=1.5048 g/cm3 CompErr=4.0154 DensErr=0.059491	1: 0.10008 6: 0.012994 7: 0.32671 8: 0.39142 Density=1.512 g/cm3 CompErr=3.72739s DensErr=0.054979s	1: 0.10373 6: 0.01337 7: 0.31368 8: 0.43435 Density=1.5079 g/cm3 CompErr=3.8626 DensErr=0.057549
TNT	1 : 0.022188 6 : 0.370166 7 : 0.185002 8 : 0.422643 Density=1.654 g/cm3	1: 0.02249 6: 0.36685 7: 0.19245 8: 0.41563 Density=1.6537 g/cm3 CompErr=0.046518 DensErr=0.00015763	1: 0.022486 6: 0.36589 7: 0.1943 8: 0.4146 Density=1.6538 g/cm3 CompErr=0.056571 DensErr=0.00014574	1: 0.022179 6: 0.36504 7: 0.1938 8: 0.41898 Density=1.654 g/cm3 CompErr=0.050292 DensErr=3.7643e-006	1: 0.022346 6: 0.36271 7: 0.19723 8: 0.41772 Density=1.6537 g/cm3 CompErr=0.070444 DensErr=0.0001561	1: 0.022334 6: 0.35728 7: 0.20704 8: 0.41333 Density=1.6538 g/cm3 CompErr=0.12625 DensErr=0.00014631
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.022481 6: 0.36686 7: 0.19246 8: 0.41563 Density=1.6538 g/cm3 CompErr=0.04639 DensErr=0.00015012	1: 0.022504 6: 0.36586 7: 0.1943 8: 0.41458 Density=1.6537 g/cm3 CompErr=0.056821 DensErr=0.00015944	1: 0.022206 6: 0.3645 7: 0.19465 8: 0.41864 Density=1.654 g/cm3 CompErr=0.0552 DensErr=2.1874e-005	1: 0.022347 6: 0.3627 7: 0.19724 8: 0.41771 Density=1.6537 g/cm3 CompErr=0.07048 DensErr=0.00015697	1: 0.022342 6: 0.35725 7: 0.20706 8: 0.41333 Density=1.6537 g/cm3 CompErr=0.12636 DensErr=0.00015253
Noise 0.01%	Noise 0.01%	1: 0.022676 6: 0.36556 7: 0.19581 8: 0.4118 Density=1.6536 g/cm3 CompErr=0.068646 DensErr=0.00023338	1: 0.02251 6: 0.36415 7: 0.19802 8: 0.41228 Density=1.6537 g/cm3 CompErr=0.077628 DensErr=0.00015221	1: 0.022361 6: 0.35955 7: 0.20428 8: 0.41357 Density=1.6537 g/cm3 CompErr=0.11045 DensErr=0.00015981	1: 0.022632 6: 0.35828 7: 0.20378 8: 0.41531 Density=1.6533 g/cm3 CompErr=0.10971 DensErr=0.00041807	1: 0.022479 6: 0.3543 7: 0.21149 8: 0.41172 Density=1.6535 g/cm3 CompErr=0.15222 DensErr=0.00028457
Noise 0.1%		1: 0.035414 6: 0.29996 7: 0.28347 8: 0.36033 Density=1.6369 g/cm3 CompErr=0.83444 DensErr=0.01031	1: 0.029608 6: 0.29086 7: 0.31075 8: 0.3645 Density=1.6437 g/cm3 CompErr=0.79916 DensErr=0.0062408	1: 0.027495 6: 0.29313 7: 0.311 8: 0.36593 Density=1.6466 g/cm3 CompErr=0.76313 DensErr=0.0044689	1: 0.025047 6: 0.31231 7: 0.28812 8: 0.37243 Density=1.65 g/cm3 CompErr=0.60486 DensErr=0.0024078	1: 0.025726 6: 0.3131 7: 0.27999 8: 0.38004 Density=1.6491 g/cm3 CompErr=0.56831 DensErr=0.0029679

Noise 1%		1: 0.15366 6: 0.056366 7: 0.47042 8: 0.1103 Density=1.5008 g/cm3 CompErr=6.2251 DensErr=0.092648	1: 0.14596 6: 0.042908 7: 0.48726 8: 0.14355 Density=1.5136 g/cm3 CompErr=5.9163 DensErr=0.084887	1: 0.11889 6: 0.043739 7: 0.55579 8: 0.13508 Density=1.5414 g/cm3 CompErr=4.9245 DensErr=0.068078	1: 0.11718 6: 0.055037 7: 0.53186 8: 0.20664 Density=1.5409 g/cm3 CompErr=4.7781 DensErr=0.0684	1: 0.1059 6: 0.071317 7: 0.52341 8: 0.24891 Density=1.5534 g/cm3 CompErr=4.2898 DensErr=0.060842
RDX	1 : 0.027227 6 : 0.162225 7 : 0.378360 8 : 0.432188 Density=1.82 g/cm3	1: 0.027332 6: 0.15959 7: 0.38249 8: 0.43059 Density=1.8198 g/cm3 CompErr=0.020289 DensErr=0.00010075	1: 0.027283 6: 0.15973 7: 0.38244 8: 0.43055 Density=1.8199 g/cm3 CompErr=0.019264 DensErr=5.3446e-005	1: 0.027223 6: 0.16121 7: 0.38013 8: 0.43143 Density=1.82 g/cm3 CompErr=0.0079932 DensErr=4.0871e-006	1: 0.027194 6: 0.15782 7: 0.3861 8: 0.42888 Density=1.8201 g/cm3 CompErr=0.03485 DensErr=3.0305e-005	1: 0.027166 6: 0.15554 7: 0.39006 8: 0.42723 Density=1.8201 g/cm3 CompErr=0.052813 DensErr=5.6665e-005
Noise 0.001%	Noise 0.001%	1: 0.027342 6: 0.15951 7: 0.38258 8: 0.43057 Density=1.8198 g/cm3 CompErr=0.020916 DensErr=0.00010971	1: 0.027288 6: 0.1596 7: 0.38264 8: 0.43047 Density=1.8199 g/cm3 CompErr=0.020254 DensErr=5.8921e-005	1: 0.027256 6: 0.16068 7: 0.38093 8: 0.43114 Density=1.82 g/cm3 CompErr=0.011995 DensErr=2.6438e-005	1: 0.027201 6: 0.15764 7: 0.38639 8: 0.42877 Density=1.82 g/cm3 CompErr=0.036241 DensErr=2.3144e-005	1: 0.027176 6: 0.15557 7: 0.38997 8: 0.42728 Density=1.8201 g/cm3 CompErr=0.052509 DensErr=4.8278e-005
Noise 0.01%	Noise 0.01%	1: 0.027351 6: 0.15653 7: 0.38895 8: 0.42691 Density=1.8198 g/cm3 CompErr=0.046761 DensErr=0.00011134	1: 0.027632 6: 0.15477 7: 0.38989 8: 0.42767 Density=1.8193 g/cm3 CompErr=0.058079 DensErr=0.00036542	1: 0.027684 6: 0.15393 7: 0.39087 8: 0.42751 Density=1.8192 g/cm3 CompErr=0.064076 DensErr=0.0004171	1: 0.027425 6: 0.15213 7: 0.39505 8: 0.42538 Density=1.8197 g/cm3 CompErr=0.07821 DensErr=0.00018907	1: 0.027344 6: 0.15171 7: 0.39599 8: 0.42495 Density=1.8198 g/cm3 CompErr=0.081663 DensErr=0.00011093
Noise 0.1%		1: 0.041794 6: 0.10035 7: 0.45354 8: 0.38595 Density=1.7996 g/cm3 CompErr=0.69471 DensErr=0.011185	1: 0.034142 6: 0.10181 7: 0.47191 8: 0.38753 Density=1.81 g/cm3 CompErr=0.52444 DensErr=0.0055192	1: 0.031138 6: 0.098765 7: 0.48076 8: 0.38676 Density=1.8142 g/cm3 CompErr=0.50789 DensErr=0.0031915	1: 0.031515 6: 0.099382 7: 0.47429 8: 0.39411 Density=1.8135 g/cm3 CompErr=0.4969 DensErr=0.0035871	1: 0.030933 6: 0.10225 7: 0.46818 8: 0.3985 Density=1.8143 g/cm3 CompErr=0.46649 DensErr=0.0031353

Noise 1%	Noise 1%	1: 0.14537 6: 0.012043 7: 0.45001 8: 0.16198 Density=1.6675 g/cm3 CompErr=4.4848 DensErr=0.083807	1: 0.13537 6: 0.013225 7: 0.43478 8: 0.21961 Density=1.6851 g/cm3 CompErr=4.1091 DensErr=0.074145	1: 0.1135 6: 0.014838 7: 0.48722 8: 0.21194 Density=1.7107 g/cm3 CompErr=3.348 DensErr=0.060029	1: 0.11099 6: 0.015941 7: 0.46867 8: 0.2822 Density=1.7132 g/cm3 CompErr=3.2334 DensErr=0.0587	1: 0.10933 6: 0.014141 7: 0.47769 8: 0.31471 Density=1.7129 g/cm3 CompErr=3.1731 DensErr=0.058831
----------	----------	---	---	---	--	---

A5. Rutina de calcul pentru determinarea gradului singularității matricei A prin SVD

```
load Elements.csv
Elem_Mass_Atten=Elements

for j=1:20
    if (j~=1 && j~=6 && j~=7 && j~=8 && j~=9 && j~=11 && j~=12 && j~=13
    && j~=14 && j~=15 && j~=16 && j~=17 && j~=19 && j~=20) || j>20
        Elem_Mass_Atten(:,j)=0
    end
end

Elem_Mass_Atten_C=Elem_Mass_Atten(:,any(Elem_Mass_Atten))

%%%%%%
Elem_Mass_Atten_E=Elem_Mass_Atten_C

n=size(Elem_Mass_Atten_C,2);

% Compute the SVD:
%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%

[U,S,V]=svd(Elem_Mass_Atten_E,0);
s = diag(S);

% Determine the effective rank r of A using singular values
r = 1;
%while( r < size(Elem_Mass_Atten_E,2) & s(r+1) >=
max(size(Elem_Mass_Atten_E))*eps*s(1) )
while( r < size(Elem_Mass_Atten_E,2) & s(r+1) >=
max(size(Elem_Mass_Atten_E))*eps*s(1) )
    r = r+1;
end

MCN=s(1)/s(r)
SING=1/(MCN*eps)
```