
Analytische Simulation und Aufnahmeplanung für die industrielle Röntgencomputertomographie

Dissertation zur Erlangung des
naturwissenschaftlichen Doktorgrades
der

JULIUS-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT WÜRZBURG

vorgelegt von
Richard SCHIELEIN
aus Chemnitz

Würzburg, 2018

Eingereicht am 19. Februar 2018

bei der Fakultät für Physik und Astronomie.

1. Gutachter: Prof. Dr. Randolph Hanke

2. Gutachter: Prof. Dr. Haye Hinrichsen

der Dissertation.

Vorsitzender: Prof. Dr. Werner Porod

1. Prüfer: Prof. Dr. Randolph Hanke

2. Prüfer: Prof. Dr. Haye Hinrichsen

3. Prüfer: Prof. Dr. Matthias Kadler

im Promotionkolloquium.

Tag des Promotionskolloquiums: 5. Oktober 2018

Doktorurkunde ausgehändigt am: _____

Abstract

Industrial X-ray computed tomography (CT) can be applied to a large variety of different specimens. The result of a CT measurement is a three-dimensional image containing the position-dependent attenuation coefficient of the specimen. For an optimal imaging CT-measurement parameters depend on both the properties of the CT-System and the specimen. To predict such an optimal parameterization both the physical interactions with X-rays of the CT-System and the specimen, must be taken into account. This thesis sets out to address the modelling of the interactions as well as the automatization of the parameter finding. The latter is based on a figure of merit for CT-measurements. Aim is a simulation-based, automatic parameter optimization method which includes the object-dependency on distinct specimens.

The currently existing X-ray simulation methods are enhanced with respect to accuracy and efficiency. Therefore a method for the calibration of the simulation to a real CT-system is presented. Additionally, a model for second order X-ray scattering is developed in order to calculate the specimen-scattered radiation. This is done using an analytical ansatz and no Monte-Carlo method has to be applied.

So far, no universal definition of a figure of merit for CT-results has been given in literature. Using Shannon's information theory such a definition is developed.

The improvements of the simulation method and the application of the figure of merit for simulation-based parameter optimization are used in examples or are validated using reference methods.

Zusammenfassung

Röntgencomputertomographie (CT) hat in ihrer industriellen Anwendung ein sehr breites Spektrum möglicher Prüfobjekte. Ziel einer CT-Messung sind dreidimensionale Abbilder der Verteilung des Schwächungskoeffizienten der Objekte mit möglichst großer Genauigkeit. Die Parametrierung eines CT-Systems für ein optimales Messergebnis hängt stark vom zu untersuchenden Objekt ab. Eine Vorhersage der optimalen Parameter muss die physikalischen Wechselwirkungen mit Röntgenstrahlung des Objektes und des CT-Systems berücksichtigen. Die vorliegende Arbeit befasst sich damit, diese Wechselwirkungen zu modellieren und mit der Möglichkeit den Prozess zur Parametrierung anhand von Gütemaßen zu automatisieren. Ziel ist eine simulationsgetriebene, automatische Parameteroptimierungsmethode, welche die Objektabhängigkeit berücksichtigt.

Hinsichtlich der Genauigkeit und der Effizienz wird die bestehende Röntgensimulationsmethodik erweitert. Es wird ein Ansatz verfolgt, der es ermöglicht, die Simulation eines CT-Systems auf reale Systeme zu kalibrieren. Darüber hinaus wird ein Modell vorgestellt, welches zur Berechnung der zweiten Ordnung der Streustrahlung im Objekt dient. Wegen des analytischen Ansatzes kann dabei auf eine Monte-Carlo Methode verzichtet werden. Es gibt in der Literatur bisher keine eindeutige Definition für die Güte eines CT-Messergebnisses. Eine solche Definition wird, basierend auf der Informationstheorie von Shannon, entwickelt.

Die Verbesserungen der Simulationsmethodik sowie die Anwendung des Gütemaßes zur simulationsgetriebenen Parameteroptimierung werden in Beispielen erfolgreich angewendet beziehungsweise mittels Referenzmethoden validiert.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung und Motivation	1
1.1	Industrielle Röntgencomputertomographie	2
1.2	Aktuelle Herausforderungen der industriellen CT	4
2	Röntgenphysik, Mathematik und Simulation der Computertomographie	9
2.1	Röntgenphysik	9
2.1.1	Entstehung von Röntgenstrahlung in Röntgenröhren	9
2.1.2	Extinktion von Röntgenstrahlung	12
2.1.3	Absorption von Röntgenstrahlung	14
2.1.4	Streuung von Röntgenstrahlung	14
2.1.5	Paarbildung und Annihilationsstrahlung	19
2.1.6	Detektion und Bilderzeugung in Kegelstrahlgeometrie	21
2.2	Tomographische Rekonstruktion und Signalverarbeitung	24
2.2.1	Tomographische Aufnahme- und Rekonstruktionsverfahren	25
2.2.2	Artefakte	29
2.3	Gebäuchliche Bildgütemaße für die Computertomographie	31
2.4	Simulation der Röntgenbildgebung	32
2.4.1	Definition wichtiger Begrifflichkeiten	32
2.4.2	Deterministische bzw. analytische Röntgensimulation	33
2.4.3	Monte-Carlo Röntgensimulation	35
3	Aufnahmeplanungsproblem und simulationsgestützter Lösungsansatz	37
3.1	Definition des Aufnahmeplanungsproblems	37
3.1.1	Optimales Tomogramm	37
3.1.2	CT-Parametersatz	40
3.2	Stand der Technik: Verfahren zur Aufnahmeplanung	44
3.3	Eigener Ansatz: simulationsgestützte Optimierung	46
3.4	Herausfordernde Beispiele zur Aufnahmeplanung	52
3.4.1	Ungenügende Positionierung komplex geformter Objekte	52

3.4.2	Artefakte bei Multimaterialobjekten durch mangelhafte Wahl des Röntgenspektrums	54
4	Kalibrationsspektren für die analytische Röntgensimulation	57
4.1	Das Spektrenschätzproblem für Systemspektren	58
4.2	Lösungsverfahren für das Spektrenschätzproblem	61
4.3	Wahl geeigneter Parameter und Durchführung von Transmissionsexperimenten	64
4.4	Ergebnisse und Durchführung einer kalibrierten analytischen Simulation . .	86
5	Entwicklung eines analytischen Streumodells	93
5.1	Bestandsaufnahme der Methoden zur Simulation von Röntgenstreuung . . .	95
5.2	Approximationen und Konstruktionsidee für die Entwicklung des Streumodelles	97
5.3	Modellierung der ersten Streuordnung	104
5.4	Modellierung der zweiten Streuordnung	107
5.5	Algorithmus zur Berechnung von Streuprojektionen	115
5.6	Ergebnisse der analytischen Streusimulation	118
5.7	Validierung des analytischen Modells mittels Monte-Carlo Simulation	128
5.8	Korrektur und Diskussion der Modellfehler und Limitierungen	134
6	Bildgütemaß für die automatisierte Optimierung der Aufnahmeparameter	147
6.1	Neue Entropie-basierte Bildgütemaße für die Computertomographie	147
6.1.1	Informationstheoretische Sicht auf den CT-Aufnahmeprozess	147
6.1.2	Shannon-Entropie und abgeleitete Entropiemaße	151
6.1.3	Definition der CT-Bildgüte	160
6.1.4	Berechnung histogrammbasierter Maße für Tomogramme	164
6.2	Vergleich entropiebasierter Maße mit klassischen Bildbewertungsmaßen . . .	165
7	Anwendung des Optimierungsverfahrens, Ergebnisse und Diskussion	173
7.1	Beispiele für automatische Aufnahmeplanung	173
7.1.1	Optimale Positionierung eines historischen Blechblasinstruments . .	173
7.1.2	Optimierung der verwendeten Röntgenspektren bei Multimaterialobjekten	175
7.2	Diskussion des entropiebasierten Optimierungsverfahrens	187
8	Zusammenfassung und Ausblick	189
8.1	Zusammenfassung	189
8.2	Ausblick auf weitere Anwendungen und Aufnahmeplanungsverfahren	191

Literaturverzeichnis	195
Abbildungsverzeichnis	208
Tabellenverzeichnis	211
Liste der verwendeten Symbole	212
Liste verwendeter Abkürzungen	213
A Codeausschnitte	215
A.1 Python Code: Fibonacci-Gitter	215
B Ergänzende Abbildungen und Tabellen	217
B.1 Zu Kapitel 2	217
B.2 Zu Kapitel 4	218
B.3 Zu Kapitel 5	223
B.4 Zu Kapitel 6	227

1. Einführung und Motivation

Röntgencomputertomographie (CT) ist ein fester Bestandteil des Methodenapparates zur zerstörungsfreien dreidimensionalen Bildgebung. Die dreidimensionale, also tiefen aufgelöste Information wird in zwei Schritten gewonnen. Im ersten Schritt wird die Röntgentransmission eines Prüfobjektes aus verschiedenen Richtungen gemessen. Im zweiten Schritt wird mittels numerischer Verfahren das dreidimensionale Abbild des Prüflings errechnet. Diesen Schritt nennt man Rekonstruktion. Ergebnis der Rekonstruktion und damit Messgröße der CT ist der Röntgenschwächungskoeffizient als Funktion des Ortes.

Bei der Messung der Röntgentransmissionen und im Zusammenspiel zwischen Transmissionsmessung und Rekonstruktion ergeben sich einige physikalische Unzulänglichkeiten, welche zu fehlerhaften Rekonstruktionen führen. Allgemein gilt, dass die Bildqualität der CT sowohl von der Messapparatur bzw. deren Parametrierung als auch von den Eigenschaften des Prüflings selbst abhängt. Der letztgenannte Umstand ist in der Nichtlinearität der Röntgentransmission als Funktion der Energie und Prüflingsdicke begründet. Hinzu kommt, dass CT auf Kegelstrahlgeometrie angewiesen ist, wenn die Dauer einer Messung kurz gehalten werden soll. In dieser Geometrie kann die Streuung der Röntgenphotonen einen weiteren, vom Prüfling abhängigen Fehler in der Messung der Röntgentransmission induzieren, der sich negativ auf die CT-Ergebnisse auswirkt.

In Summe führen diese Eigenschaften der CT dazu, dass eine Minimierung der Fehler nur dann gelingen kann, wenn die Parameter der Messapparatur als Funktion des Objektes optimiert werden. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich damit, die nötigen Bestandteile für eine Parameteroptimierung der CT zur Verfügung zu stellen und bezüglich ihrer Güte zu untersuchen. Eine solche Parameteroptimierung bezüglich eines bestimmten Prüflings wird im Folgenden als *Aufnahmeplanung* bezeichnet. Mittels einer realitätsnahen und hinreichend schnellen Computersimulation kann der Parameterraum der CT abgetastet werden. Mit der sogenannten *analytischen Simulationsmethode* gibt es bereits ein Verfahren, welches mit relativ geringem numerischen Aufwand CT-Aufnahmen simulieren kann (siehe die Ref. [36, 55] und die Ausführungen in Kapitel 2).

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit erweitere ich dieses Verfahren um zwei Funktionalitäten.

Zum einen zeige ich eine Methode, mit der die Simulation auf eine reale Messapparatur kalibriert werden kann. Dazu bediene ich mich der Methode der sogenannten *Spektrenschätzung*. Zum anderen erweitere ich die Simulationsmethode um ein Streumodell, das Rayleigh- und Comptonstreuung bis zur zweiten Ordnung berücksichtigt. Dazu greife ich ein bestehendes Modell der ersten Ordnung auf und verbessere es algorithmisch. Mit ähnlichem Ansatz konnte ich daraus ein neuartiges analytisches Modell für die zweite Ordnung Röntgenstreuung entwickeln.

Damit eine Aufnahmeplanung funktionieren kann bedarf es einer Quantifizierung der CT-Bildgüte. Bisher fehlt sowohl eine klare Abgrenzung des Begriffes Aufnahmeplanung als auch eine klare Definition von CT-Bildgüte. Beide Begrifflichkeiten definiere ich in dieser Arbeit und stelle sie in den Kontext der vorhandenen Literatur, welche interdisziplinär geprägt und deshalb vielfältig ist. Aus der Definition für die Bildgüte leite ich Vorschläge für Bildgütemaße ab und untersuche deren Eignung als Optimalitätskriterium. Dazu stütze ich mich auf einen informationstheoretischen Ansatz und empfehle Maße, die auf der Shannon-Entropie (SE) basieren. Die Zusammenfassung der Simulationsmethode mit den SE-basierten Maßen garantiert schließlich, dass mindestens ein Brute-Force-Verfahren (Exhaustionsmethode) zur Optimierung möglich wird. Damit ist eine neuartige Methode für eine simulationsgestützte, automatisierbare Aufnahmeplanung gefunden.

Die Relevanz dieser Arbeit ergibt sich im Besonderen, wenn die Prüflinge vielfältig sind, also dann, wenn die objektabhängigkeit der CT-Bildqualität zu tragen kommt. Dies ist besonders dann der Fall, wenn CT im industriellen Umfeld betrieben wird. Der Begriff *industrielle CT* wird im folgenden Abschnitt eingehend beschrieben und von der medizinischen CT abgegrenzt.

1.1. Industrielle Röntgencomputertomographie

Neben der medizinischen Anwendung der CT zur Diagnostik gibt es ein breites Spektrum von nichtmedizinischen Anwendungen. Dieses reicht von der Materialcharakterisierung, etwa die Strukturuntersuchung von Metallschäumen, Faserverbundwerkstoffen oder der Analyse von Naturwerkstoffen wie z.B. Holz, bis hin zur Messtechnik, also der Prüfung industriell gefertigter Objekte auf Maßhaltigkeit. Einen allgemeinen Überblick über Anwendungen der CT außerhalb der Medizintechnik erhält man in Ref. [17]. Es gibt auch viele Anwendungen, welche noch näher an der Forschung und Entwicklung liegen, z.B. die Untersuchung von Pflanzenwurzeln im Substrat [75] oder die Analyse von geologischen Proben [20]. Die industrielle stellt CT eine wichtige Methode zur zerstörungsfreien Prüfung

bzw. zum zerstörungsfreien Überwachen von industriellen Erzeugnissen dar¹, auch in der Serienfertigung [76].

Für die Zwecke dieser Arbeit soll der Begriff *industrielle CT* dadurch abgegrenzt sein, dass es sich dabei um sämtliche CT-Verfahren handelt, die mit laborfähigen Röntgenquellen durchgeführt werden können und keine Menschen oder lebenden Tiere als Untersuchungsgegenstand haben.

Um den Kontext für diese Arbeit bereits an dieser Stelle zu setzen, seien folgende Begriffe definiert:

Röntgenquelle bezeichnet das Gerät, welches Röntgenstrahlen erzeugt. Im Allgemeinen eine Röntgenröhre oder eine Quelle, die auf einem Linearbeschleuniger (LINAC) basiert²; also Röntgenquellen, die durch Elektronenbeschuss eines Targetmaterials funktionieren. Synchrotrone³ und freie Elektronenlaser werden nicht betrachtet. Diese Arbeit beschäftigt sich also mit polychromatischen Röntgenquellen deren Spektrum aus einem *Bremsspektrum* und der *charakteristischen Strahlung* des Targetmaterials besteht.

Detektor bezeichnet das Gerät, welches Röntgenstrahlung in ein digitales Signal wandelt, sodass es computernumerisch weiterverarbeitet werden kann. Soweit nicht explizit darauf hingewiesen wird, werden indirekt konvertierende Flächendetektoren angewendet. Näheres findet sich in Kap. 2.1.6.

Objekt, Prüfling, Phantom bezeichnet den Gegenstand, welcher untersucht werden soll. Es kann auch nur ein Ausschnitt des Phantoms untersucht werden. Die Objekte werden im Regelfall, im industriellen Kontext, aus wenigen verschiedenen homogenen Materialien bestehen. Das bedeutet, dass die Objekte, im Rahmen einer vorab definierten Ortsauflösung, durch scharf abgegrenzte Volumina modelliert werden können.⁴

Trajektorie bezeichnet die Abfolge von Quellpunkt- und Detektormittelpunktpositionen während einer CT-Aufnahme. Die am häufigsten angewendete Trajektorie ist die *Standard Kreistrajektorie*, bei der sich Quellpunkt und Detektormittelpunkt im

¹ Ebenfalls zerstörungsfreie Verfahren (mit Tiefenauflösung) sind beispielsweise Thermographie und Ultraschall.

² Solche Quellen können auch im Labor Röntgenenergien im MeV-Regime erzeugen.

³ Röntgenstrahlung wird dort in periodischen Magnetstrukturen (Undulatoren) oder Ablenkmagneten erzeugt.

⁴ Insbesondere betrachte ich keine Fälle bei denen ein Gradient im Schwächungskoeffizient zu modellieren ist.

Ruhekoordinatensystem des Objektes auf Kreisbahnen bewegen. Sofern nicht explizit angegeben, soll diese Trajektorie der Standardfall sein.

Gegenstand dieser Arbeit ist die Parameteroptimierung der industriellen CT. Der Ansatz, den ich gewählt habe, basiert auf Computersimulationen, weshalb die analytische Simulationsmethode einen wesentlichen Bestandteil dieser Arbeit darstellt. Die Methoden dieser Arbeit werden mit Blickwinkel auf die hier abgegrenzten Fälle diskutiert, obgleich die Methoden teilweise ein noch breiteres Anwendungsfeld zulassen.

1.2. Aktuelle Herausforderungen der industriellen CT

Die Motivation zu dieser Arbeit lässt sich aus der großen Vielfalt der Aufgabenstellungen für die industrielle CT herleiten. Dazu wird hier zunächst ein knapper Überblick über die Aufgabenstellungen verschafft. Aus diesem lässt sich ableiten, dass die Vielfalt in den Aufgabenstellungen zu einer ähnlichen großen Vielfalt an experimentellen Bedingungen führt, die nötig sind, um den Aufgabenstellungen gerecht zu werden. Daraus und aus der Tatsache, dass es bislang keinen generischen Ansatz gibt, die experimentellen Bedingungen festzulegen ergibt sich die Relevanz für die Methoden, die mit dieser Arbeit bereitgestellt werden.

Die Computertomographie kennt außerhalb der Medizin durch ihre Anwendung als zerstörungsfreies Mess- und Prüfverfahren eine sehr große Bandbreite verschiedener Prüflinge. Eine knappe Zusammenstellung von industriell gefertigten Objekten, die mittels CT untersucht werden können, dient dazu diese Bandbreite zu verdeutlichen. Als Grenze der kleinsten Objekte mit höchster Anforderung an Ortsauflösung, sei die Anwendung Materialcharakterisierung von Legierungen genannt wie in Ref. [46] beschrieben. Die Grenze derzeitig verfügbarer CT Systeme für besonders große Prüfobjekte liegt bei Prüflingen wie z.B. endmontierte Automobile.

Um die Menge relevanter Objekte physikalisch grob zu klassifizieren, kann man die Eigenschaften maximale Ausdehnung, maximal durchstrahlte Weglänge und das Material bezüglich dessen Röntgenschwächung auftritt betrachten. Demgegenüber sind die Anforderungen an eine Röntgenprüfung gestellt: nötige Ortsauflösung sowie nötige Röntgenenergie zur Durchstrahlung. In Tabelle 1.1 sind diese Eigenschaften für einige industriell relevante Objekte zusammengetragen und werden den entsprechenden Eigenschaften des menschlichen Körpers gegenüber gestellt. In Abb. 1.1 sind die Daten aus Tabelle 1.1 graphisch dargestellt.

Tab. 1.1.: Es werden einige typische Objekte gelistet, die für die industrielle Computertomographie von Bedeutung sind. Zusätzlich werden deren Eigenschaften bezüglich Durchstrahlung mittels Röntgenstrahlen genannt und mit den entsprechenden Eigenschaften des Menschen, der das „Prüfobjekt“ für die Medizinische CT darstellt, verglichen.

Objekt	größte Länge m	größte durchstrahlte Länge m	μ bei 150 keV cm^{-1}	Energie bei 10% Transmission keV	Strukturgröße m
Mensch (Weichteile)	2,00	$2,00 \cdot 10^{-1}$	$1,50 \cdot 10^{-1}$	314	$2,40 \cdot 10^{-4}$
Mensch (Knochen)	2,00	$5,00 \cdot 10^{-2}$	$1,20 \cdot 10^{-1}$	50	$2,40 \cdot 10^{-4}$
Motor Kolben	$4,00 \cdot 10^{-1}$	$1,00 \cdot 10^{-1}$	$3,70 \cdot 10^{-1}$	487	$3,30 \cdot 10^{-4}$
Pflanzenwurzeln in Substrat	$4,00 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-1}$	$1,90 \cdot 10^{-1}$	101	$1,20 \cdot 10^{-4}$
Gesamtfahrzeug	7,00	$4,00 \cdot 10^{-1}$	$3,70 \cdot 10^{-1}$	2000	$4,00 \cdot 10^{-4}$
Motorblock (Gussbauteile)	$5,00 \cdot 10^{-1}$	$4,00 \cdot 10^{-1}$	$3,70 \cdot 10^{-1}$	2000	$4,00 \cdot 10^{-4}$
Elektromotor	$3,00 \cdot 10^{-1}$	$2,00 \cdot 10^{-1}$	1,80	8000	$5,00 \cdot 10^{-4}$
Aluminiumlegierung zur Materialcharakterisierung	$1,00 \cdot 10^{-3}$	$5,00 \cdot 10^{-4}$	$3,80 \cdot 10^{-1}$	12	$8,00 \cdot 10^{-8}$
Leichtbauteile aus Faserverbundwerkstoffen	3,00	$5,00 \cdot 10^{-2}$	$2,80 \cdot 10^{-1}$	59	$1,00 \cdot 10^{-5}$
Elektronik (Platinenprüfung)	$1,00 \cdot 10^{-1}$	$5,00 \cdot 10^{-3}$	$3,40 \cdot 10^{-2}$	12	$3,00 \cdot 10^{-5}$

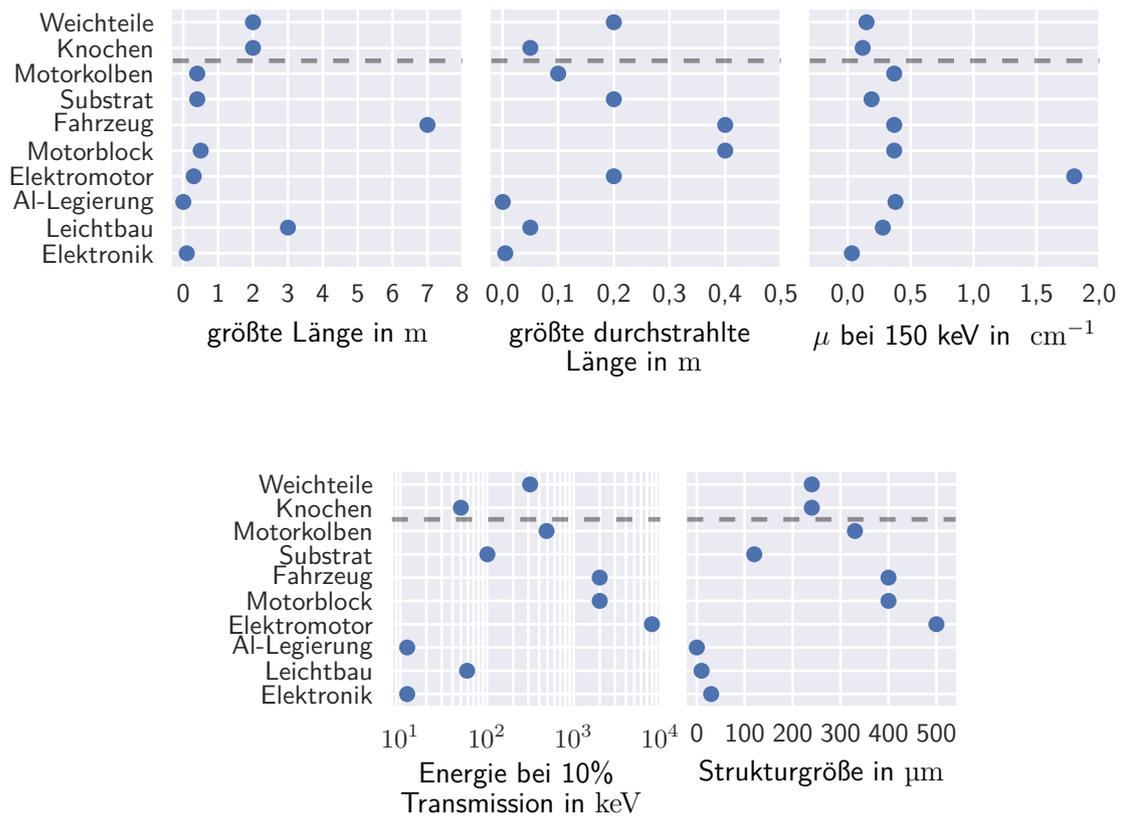


Abb. 1.1.: In den Graphen sind die Daten aus Tab. 1.1 dargestellt. Oberhalb der gestrichelten Linie sind, zum Vergleich mit den industriellen Objekten, die Daten für medizinische Anwendungen dargestellt. Die für industrielle Fragestellungen interessanten Objekte decken in fast allen hier dargestellten Kategorien ein wesentlich breiteres Spektrum ab. Diese Variabilität der Objekte spiegelt sich in den Anforderungen an CT-Anlagen wieder.

Aus den Daten von Tabelle 1.1 kann man einige grundsätzliche physikalische Eigenschaften ablesen, denen man Rechnung tragen muss, wenn man CT-Messungen durchführen möchte.

Zunächst eine Bemerkung zu den Röntgenenergien, welche für 10 % Transmission berechnet sind: 10 % Transmission ist hier beispielhaft zu verstehen⁵. Diese Wahl dient ausschließlich dazu, eine Vergleichsbasis zu schaffen, um verschiedenen Materialien und Objektdicken Röntgenenergien zuzuordnen. In der technischen Anwendung werden oftmals deutlich kleinere Transmissionen verwendet, weil die entsprechenden Röntgenenergien, insbesondere bei Röntgenquellen mit einem Bremsspektrum, nicht erreichbar sind. Für die medizinische CT werden polychromatische Röntgenspektren mit Maximalenergien zwischen 30 keV und 140 keV eingesetzt⁶.

Die industrielle Anwendung der CT erstreckt sich bezogen auf die Größe der zu untersuchenden Objekte verglichen mit der maximal erreichbaren Strukturauflösung über acht Größenordnungen. Dabei ist selbstverständlich, dass eine CT-Apparatur, welche in der Lage ist ein vollständiges Automobil zu durchstrahlen völlig anders aufgebaut und parametriert sein muss, als ein so genanntes Röntgenmikroskop, welches sich zur Materialcharakterisierung eignet. Auf Seite der Röntgenquelle besteht ein Unterschied von drei Größenordnungen bzgl. der Energie der Röntgenphotonen und ein Unterschied von drei Größenordnungen bezogen auf den Durchmesser des Brennflecks, welcher maßgeblichen Einfluss auf die Ortsauflösung eines CT-Systems hat. Die verwendete Bandbreite an Röntgenenergien hat einen weitreichenden Einfluss auf die Ergebnisse, welche mittels CT erreicht werden können. Während bei Röntgenenergien bis 50 keV der Photoeffekt der dominierende Effekt zur Abschwächung der Röntgenstrahlung ist, so gewinnt mit zunehmender Energie der Comptoneffekt an Einfluss. Spätestens bei Röntgenenergien über 450 keV kann man davon ausgehen, dass der Comptoneffekt die dominierende Art der Wechselwirkung ist. Unter Verwendung von Energien im MeV-Regime sind schließlich die Schwächungskoeffizienten der Materialien untereinander nicht mehr so stark von der Atomzahl abhängig. Das wirkt sich entsprechend auf die Kontrastverhältnisse in den CT-Aufnahmen aus.

Zu diesen Aspekten tritt die Beobachtung, dass das Untersuchungsobjekt selbst einen Einfluss auf die Qualität der Ergebnisse hat. Diese Beobachtung ist bereits Gegenstand von Richtlinien zur Anwendung der CT wie beispielsweise Ref. [100].

Die Objektabhängigkeit der CT-Messungen führt dazu, dass die Wahl der Parameter für

⁵ Die Festlegung 10 % ist mit der Norm EN 16016-2:2011 [30] motiviert. Weiteres findet sich in Kap. 3.2.

⁶ In der medizinischen Anwendung steht das Gebot minimaler Dosis im Vordergrund aller Optimierungsbemühungen.

eine optimale CT-Messung ebenfalls objektabhängig erfolgen muss.

Die große industrielle Anwendungsbandbreite, welche von zusätzlichen Anforderungen wie höherer Ortsauflösung und kürzeren Messzeiten begleitet wird, steht der Objektabhängigkeit, welche technologisch bedingt ist, gegenüber. Es müssen also Ansätze gefunden, die CT-Parameter objektspezifisch zu optimieren.

2. Röntgenphysik, Mathematik und Simulation der Computertomographie

2.1. Röntgenphysik

Im Rahmen dieser Arbeit wird auf verschiedene Aspekte der Röntgenphysik zurückgegriffen. Im Folgenden werden nur jene Teile der Röntgenphysik betrachtet, die zum Verständnis der angewandten Methoden notwendig sind. Der Teil der Röntgenphysik, den ich im Folgenden darstelle, ist in verschiedener Ausführlichkeit in diversen Lehrbüchern dargestellt. Es sei auf die Referenzen [11, 71] für die Beschreibung der allgemeinen Röntgenphysik verwiesen. Darüber hinaus verwende ich die spezifischeren und näher am Anwendungsgebiet dieser Arbeit liegenden Lehrbücher [10, 15, 49]. Letztgenannte Referenzen sind aus dem Blickwinkel der Radiologie beziehungsweise der medizinischen CT geschrieben.

2.1.1. Entstehung von Röntgenstrahlung in Röntgenröhren

Unter der *Röntgenintensität* oder *Intensität* einer Röntgenquelle versteht man allgemein eine physikalische Größe, die die Menge der Röntgenstrahlung quantifiziert. Je nach Kontext findet man verschiedene konkrete Definitionen dieser Größe. Hier soll die Röntgenintensität mit der Dimension Energie versehen werden. Man definiert, ähnlich wie Blochin in Ref. [11]: *Die Röntgenintensität ist diejenige Energiemenge, die in einem Röntgenstrahl pro Zeiteinheit durch eine Flächeneinheit hindurchtritt.* Es sei an dieser Stelle explizit darauf hingewiesen, dass in der Literatur oftmals Größen, die proportional zu dieser sind, als Intensität bezeichnet werden. Das gilt insbesondere bei der Betrachtung von Detektorbildern, wobei man davon ausgeht, dass ein Pixelwert proportional zur Intensität ist. Dann wird die Intensität meist als dimensionslose Größe behandelt.

Röntgenintensitäten werden mit dem Buchstaben I bezeichnet. Für den Fall, dass I nur bei einer bestimmten Energie E betrachtet wird bzw. die Abhängigkeit von der Energie explizit untersucht werden soll, schreibt man $I(E)$ und spricht auch von einem Spektrum oder Röntgenspektrum. Wenn von „dem Spektrum“ einer Röntgenquelle die Rede ist, ist

die energieabhängige Intensität gemeint, welche die Quelle pro Zeiteinheit emittiert. Die (Gesamt-)Intensität einer Quelle ist

$$I = \int_0^{\infty} I(E) \, dE. \quad (2.1)$$

Aus praktischen Gründen sei noch eine weitere Größe definiert, welche die Photonenzahl in einem Röntgenstrahl betrachtet: Für die Anzahl der Röntgenquanten n , die pro Zeiteinheit dT durch eine Flächeneinheit dA hindurchtreten, schreibt man den (Photonenzahl-) Fluss

$$\Phi = \frac{d^2n}{dAdT}. \quad (2.2)$$

Für den Fluss sei ebenfalls die energieabhängige Variante $\Phi(E)$ definiert; $\Phi(E)$ betrachtet entsprechend der obigen Definition für die Intensität nur die Zahl der Photonen einer bestimmten Energie E . Man nennt den so definierten spektralen Fluss $\Phi(E)$ auch *spektrale Photonendichte*. Für die Herleitung der Röntgensimulationsmodelle wird häufig Gebrauch von isotrop strahlenden, punktförmigen Röntgenquellen gemacht. Für den Fluss, den diese in einem Abstand r erzeugen, gilt das quadratische Abstandsgesetz

$$\Phi(r) = \frac{r_0^2}{r^2} \Phi_0, \quad (2.3)$$

wobei Φ_0 der Fluss im Abstand r_0 ist. Entsprechendes gilt für I . Des Weiteren gilt der Zusammenhang

$$I(E) = \Phi(E) \cdot E. \quad (2.4)$$

In der industriellen CT sind fast ausschließlich Röntgenröhren als primäre Röntgenquellen in Verwendung, also Quellen, bei denen ein Elektronenstrahl auf ein Targetmaterial geschossen wird. Deshalb wird auf die Diskussion anderer Röntgenquellen, wie z.B. radioaktiver Isotope, Undulatoren und Wiggler sowie laserbasierter Verfahren verzichtet. In Abb. 2.1 sind die beiden wichtigsten Röntgenröhrentypen schematisch dargestellt. Der Unterschied ergibt sich im Wesentlichen durch die verwendete Targetdicke: In Transmissionsgeometrie ist das Target ein dünner Metallfilm, während in Reflexionsgeometrie ein „unendlich“ dickes Target Verwendung findet. Wolfram ist ein häufig eingesetztes Material für Röntgentargets. Mittels eines Transmissionstargets lassen sich kleinere Brennflecke, so nennt man das Raumgebiet, dem die Röntgenstrahlung entspringt, erreichen. Im Gegenzug können auf

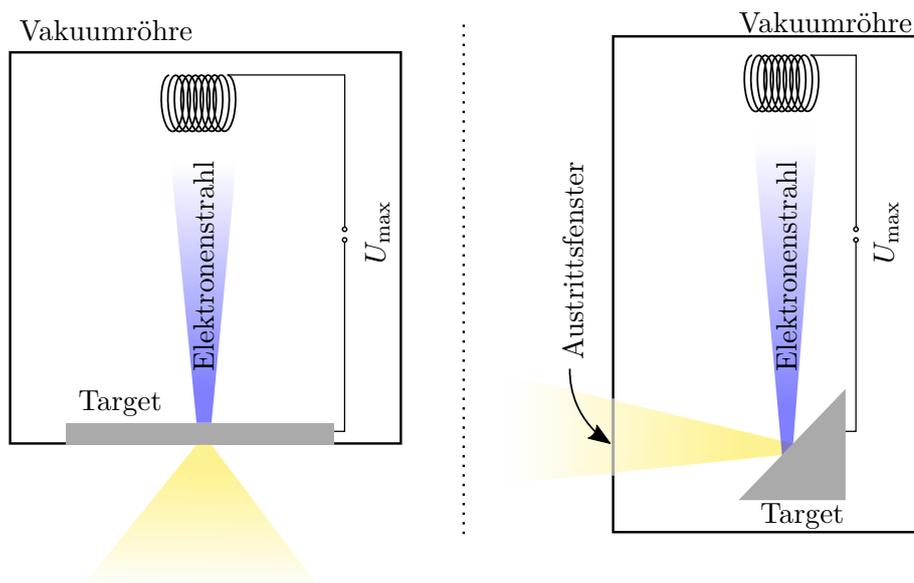


Abb. 2.1.: Schematische Darstellung einer Röntgenröhre in Transmissionsgeometrie (links) und in Reflexionsgeometrie (rechts). Ein Elektronenstrahl wird entlang der Beschleunigungsstrecke auf die Energie E_{\max} gebracht und trifft auf ein Röntgentarget. Die Elektronen werden in aller Regel in einem Glühdraht freigesetzt und auf ihrer Beschleunigungsstrecke durch eine Elektronenoptik auf das Target fokussiert.

Reflexionstargets höhere Röhrenleistungen appliziert werden, weil diese besser gekühlt werden können. Als *Röhrenleistung* wird das Produkt aus der Beschleunigungsspannung U_{\max} und dem Elektronenstrom bezeichnet (auch Targetstrom oder Anodenstrom genannt).

Es gibt zwei Wechselwirkungseffekte zwischen den Elektronen und dem Targetmaterial, die zur Entstehung von Röntgenstrahlung beitragen: Stoßionisation und Bremsung im Coulombfeld. Davon leitet sich auch die Bezeichnung der entstehenden Strahlung ab:

Charakteristische Strahlung Die Elektronen des Kathodenstrahls können die Elektronen der inneren Schalen der Targetatome ausschlagen. Die entstandenen Lücken werden durch Elektronen aus höheren Schalen gefüllt. Dabei entstehen Röntgenphotonen mit einer Energie, die gerade der Energiedifferenz der beteiligten Schalen entspricht.

Bremstrahlung Die Elektronen werden im Coulombfeld der Targetatomkerne gebremst. Dabei emittieren sie Röntgenstrahlung. Die Energie der entstehenden Röntgenphotonen ist kontinuierlich verteilt. Die größte auftretende Röntgenenergie ist gerade die Maximalenergie der Elektronen $E_{\max} = eU_{\max}$. Nachdem die Röntgenstrahlung nicht nur direkt an der Oberfläche des Targets entsteht, wird diese bereits im Target-

material wieder geschwächt. Dies und die Verteilung des Stoßparameters (zwischen Elektron und Atomkern) sind ursächlich für die Form des kontinuierlichen Anteils des Röhrenspektrums. Beispiele für typische Röhrenspektren finden sich in Kap. 4.

Um ein Röntgenspektrum einer konkreten Röntgenröhre korrekt berechnen zu können, müssen einige Parameter berücksichtigt werden. Zu nennen sind, das Targetmaterial und die Geometrie des Targets, der Auftreffwinkel der Elektronen, der Winkel unter dem die Strahlung das Target verlässt und die Energie der Elektronen. Für Röntgensimulationen, haben sich zwei Wege etabliert, um zu einem Röhrenspektrum zu gelangen⁷. Zum einen eine Monte-Carlo (MC)-Simulation (mit einer hohen Modellierungstiefe, vor allem bezüglich der Geometrie). Zum anderen analytische bzw. teilweise empirische Modelle. Hierzu sei besonders das Modell von Tucker et al. genannt (Ref. [98]). Dieses Modell hat für die Erzeugung von Spektren für Röntgensimulationen Verbreitung gefunden. Es handelt sich um ein teilweise empirisches Modell für Röntgenröhren mit Wolfram als Targetmaterial. Es wird im Folgenden als TBC-Modell bezeichnet werden. Die Implementierung, welche für diese Arbeit Anwendung findet, stammt aus der Software Scorpius XLab[®] [103].

2.1.2. Extinktion von Röntgenstrahlung

Als *Extinktion* oder *Schwächung* von Röntgenstrahlung wird die Summe aller Prozesse verstanden, welche die Photonenzahl in einem Röntgenstrahl mindern. Dazu zählen sowohl die im nächsten Abschnitt besprochenen Streueffekte, als auch die Absorption von Röntgenphotonen. Die Herleitung sei hier in knapper Form nachvollzogen, um notwendige Begriffe und Formelsymbole einzuführen.

Man geht von einem Experiment aus, bei dem ein Nadelstrahl mit monochromatischer Röntgenstrahlung der Energie E auf einen Detektor trifft, sodass dieser die *ungeschwächte* Intensität I_0 bestimmt. Setzt man anschließend ein röntgenschwächendes Material mit der Dicke dt zwischen die Quelle und den Detektor, so stellt man am Detektor eine verminderte Intensität fest. Die Intensitätsänderung sei mit $-dI$ bezeichnet⁸. Fügt man dem Experiment weitere „Scheibchen“ aus demselben Material und derselben Dicke hinzu, so kann man beobachten bzw. aus den Intensitäten am Detektor rückschließen, dass jedes Scheibchen dt anteilig dieselbe Zahl an Röntgenphotonen aus dem Strahl entnimmt (bezogen auf die Intensität, die auf das betreffende Scheibchen einfällt). Anders ausgedrückt: Die Intensitätsänderung ist proportional zur Scheibchendicke⁹. Es ergibt sich die

⁷ Ausserdem kann natürlich auch ein gemessenes Spektrum verwendet werden.

⁸ Das negative Vorzeichen ist Konvention.

⁹ Ein Stapel dünner Scheibchen oder ein dickeres Scheibchen sind in diesem Experiment ununterscheidbar.

Differentialgleichung

$$-dI = \mu dt. \quad (2.5)$$

Nach Integration und Umformen erhält man das *Lambert-Beersche Gesetz* (dabei tritt die ungeschwächte Intensität als Integrationskonstante auf)

$$I(t) = I_0 \exp(-\mu t). \quad (2.6)$$

Die Größe

$$T = \frac{I}{I_0} = \exp(-\mu t) \quad (2.7)$$

wird als *Transmission* bezeichnet. Die Proportionalitätskonstante μ wird als Schwächungskoeffizient bezeichnet. Gleichung 2.6 und ihre Herleitung gilt auch, wenn man die verschiedenen, zur Schwächung beitragenden, Effekte einzeln betrachtet. Es gibt also für die Absorption ein μ_{Photo} , für den Comptoneffekt ein μ_{C} sowie für den Rayleigheffekt ein μ_{R} (ferner sei noch die Paarbildung μ_{Paar} erwähnt). Die Koeffizienten verhalten sich additiv

$$\mu = \mu_{\text{Photoeffekt}} + \mu_{\text{Comptonstreuung}} + \mu_{\text{Rayleighstreuung}} + \mu_{\text{Paarbildung}}. \quad (2.8)$$

Führt man das oben beschriebene Experiment bei verschiedenen E durch, stellt man fest, dass der Schwächungskoeffizient stark energieabhängig ist. Allgemein gilt

$$\mu = \mu(E). \quad (2.9)$$

Die Energieabhängigkeit des Schwächungskoeffizienten ergibt sich aus der Energieabhängigkeit seiner Komponenten.

Bezüglich der Atomzahl Z des schwächenden Materials besteht ebenfalls eine Abhängigkeit der Schwächungskoeffizienten (siehe dazu die Abschnitte 2.1.3 und 2.1.4).

Der Schwächungskoeffizient ist eine Eigenschaft des Materials. Nachdem er linear von der Dichte ρ des Materials abhängt (egal in welchem Aggregatzustand), wird oft der sogenannte *Massenschwächungskoeffizient* angegeben

$$\mu_{\rho} = \frac{\mu}{\rho}. \quad (2.10)$$

Dadurch ist eine besser vergleichbare Größe definiert. In Abb. 2.2 ist am Beispiel von Eisen der Verlauf des Massenschwächungskoeffizienten und seiner Zusammensetzung dargestellt.

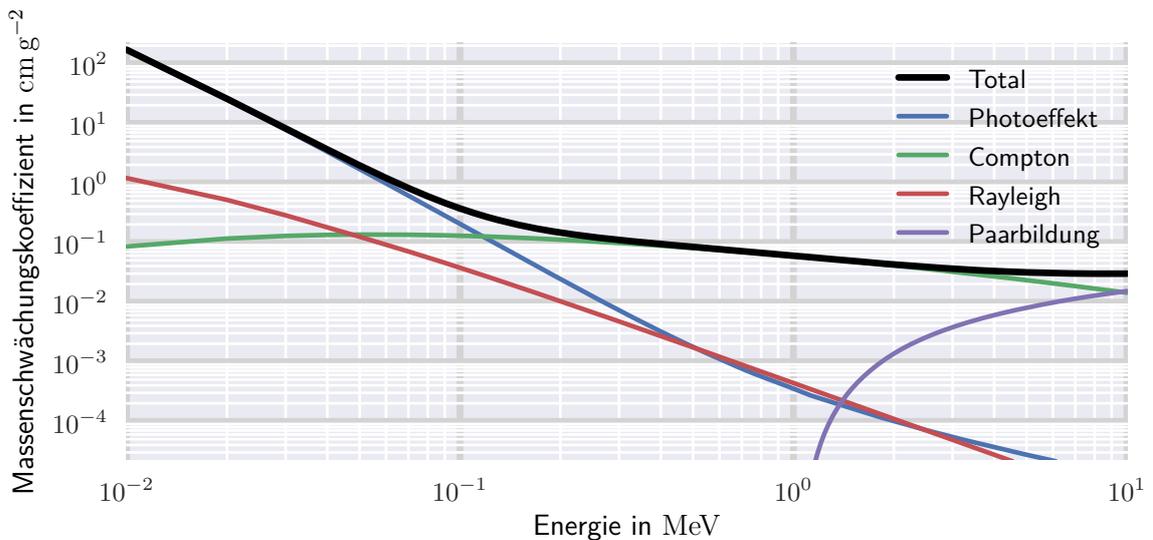


Abb. 2.2.: Energieabhängigkeit des Massenschwächungskoeffizienten am Beispiel von Eisen, doppellogarithmisch aufgetragen.

Wird ein Röntgenstrahl durch mehrere hintereinander liegende Absorber aus verschiedenem Material geschwächt bzw. ist der Schwächungskoeffizient ortsabhängig, so gilt für die Transmission

$$T(E) = \frac{I(E)}{I_0(E)} = \exp\left(-\int_s \mu(E, t) dt\right). \quad (2.11)$$

Dazu wird das Integral entlang des Weges s (eine Strecke, die im Quellpunkt beginnt und an dem Ort, an dem die Röntgenstrahlung gemessen wird, endet) ausgeführt.

2.1.3. Absorption von Röntgenstrahlung

Die Absorption von Röntgenstrahlung geschieht durch den Photoeffekt. Die Energie- und Ordnungszahlabhängigkeit des Photoabsorptionskoeffizienten ergibt sich nach Ref. [63] zu

$$\mu_{\text{Photoeffekt}} \propto \frac{Z^n}{E^3} \quad \text{für } n \in [3; 3, 5]. \quad (2.12)$$

Dabei ist n für leichtere Elemente bei 3, 5 und für schwerere bei 3 zu erwarten. Die Formel gilt näherungsweise für $E < 511$ keV.

2.1.4. Streuung von Röntgenstrahlung

Im Folgenden will ich auf die beiden, für die in dieser Arbeit betrachteten Experimente, wichtigsten Streuprozesse von Röntgenphotonen in Materie eingehen. Dazu sollen noch

einige Begriffe eingeführt werden. Als *Streuprozesse* will ich alle Prozesse bezeichnen, bei denen ein (Röntgen-)Photon seine Ausbreitungsrichtung ändert. In diesem Zusammenhang sei auch der Begriff der *Streustrahlung* als die Menge der Photonen bezeichnet, die bereits mindestens einmal seit ihrer Entstehung in der Röntgenquelle ihre Ausbreitungsrichtung geändert haben¹⁰.

Strahlung, die direkt von der Röntgenquelle, ohne Richtungsänderung, stammt, wird als *Primärstrahlung* bezeichnet. Mit der *n-ten Ordnung* der Streustrahlung soll die Zahl der Richtungsänderungen (= Zahl der Streueignisse bzw. Streuprozesse in der Historie des betrachteten Photons), die ein entsprechendes Photon oder eine Menge von Photonen erfährt, bezeichnet werden. Streustrahlung 1. Ordnung bezeichnet demnach eine Richtungsänderung und entsprechendes gilt für höhere Ordnungen¹¹. Die Strahlung, die ein Röntgendetektor misst, setzt sich aus verschiedenen Anteilen von Streustrahlung und Primärstrahlung zusammen und kann experimentell nicht einfach¹² aufgetrennt werden. Nachdem ich im Rahmen dieser Arbeit auf die Simulation von Röntgenstreustrahlung eingehen will, sei der Begriff der Röntgenprojektion entsprechend erweitert: Eine *Primärstrahlprojektion* enthält demnach ausschließlich Primärstrahlung und eine *Streustrahlprojektion* bzw. eine *Projektion der n-ten Ordnung* ausschließlich Streustrahlung bzw. Streustrahlung aus der entsprechenden Ordnung. Wird ein bestimmter Streueffekt betrachtet wird, so wird er ebenfalls in der Bezeichnung geführt.

Bei einer CT-Messung kommt Streustrahlung in allen Komponenten des CT-Systems vor, welche vom Primärstrahlkegel erfasst werden. Einfluss auf die Qualität einer CT-Messung nimmt die Streustrahlung nur dann, wenn sie auch detektiert wird. Dann trägt sie zum Messsignal bei und ist für eine Transmissionsmessung ein Störsignal. Besonders relevant sind dabei zwei Anteile:

Zum einen die Streustrahlung innerhalb des Röntgendetektors. Das meint innerhalb des Szintillators sowie der umgebenden Teile, wie das Strahleintrittsfenster der Elektronik oder des Detektorgehäuses. Dieser Anteil wirkt sich auf die Ortsauflösung des Detektors aus. Zum anderen die Streustrahlung, welche vom Objekt ausgeht. Je nachdem, an welchem Ort dieser Anteil detektiert wird, verfälscht er die Transmissionsmessungen. Dadurch werden abhängig von der Objektform, Artefakte im Tomogramm hervorgerufen (in Ref. [77] wird dies beispielsweise im Kontext medizinischer CT diskutiert). Eine Möglichkeit, den Einfluss

¹⁰ Dabei ist es nicht wichtig, ob man einen Streuprozess als Vernichtung eines Photons und Entstehung eines neuen am selben Ort auffassen muss, solange zeitliche und räumliche Unmittelbarkeit angenommen werden darf.

¹¹ Ich werde die Primärstrahlung trotz dieser Definition nicht als Streustrahlung 0. Ordnung bezeichnen.

¹² „Nicht einfach“ in dem Sinne, als selbst mit zusätzlichem apparativen Aufwand, etwa Abschattung durch Kollimation, keine vollständige Trennung der einzelnen Anteile erfolgen kann.

von Objektstreustrahlung zu mindern, besteht darin, den Objekt-zu-Detektorabstand zu vergrößern. Nachdem der „Quellort“ dieser Streustrahlung das Objekt selbst ist und auch für diese Strahlung das quadratische Abstandsgesetz gilt¹³, ist dies möglich, sofern die geometrischen Rahmenbedingungen des CT-Systems dies zulassen.

Als *Streuwinkel* ω wird im Folgenden der Winkel zwischen der Bewegungsrichtung des Photons vor und nach dem Streueignis bezeichnet. Die Richtung $\omega = 0$ sei als *Vorwärtsrichtung* und entsprechend $\omega = 180^\circ$ als *Rückwärtsrichtung* bezeichnet (Vorwärtsstreuung und Rückstreuung).

Comptonstreuung

Als *Comptonstreuung* wird die inelastische Streuung eines Röntgenphotons an einem freien oder quasi-freien Elektron bezeichnet. Bei der *Comptonstreuung* verliert das Primärphoton einen Teil seiner Energie. Der Comptoneffekt findet für alle in dieser Arbeit betrachteten Fälle in Materie statt, also an Elektronen, welche in einem Atom gebunden sind.

Die Energie des Photons nach der Streuung berechnet sich nach

$$E'(E, \omega) = \frac{E}{1 + \kappa(1 - \cos(\omega))} \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{E}{m_e c^2}. \quad (2.13)$$

Der differenzielle Wirkungsquerschnitt wird für den Zweck der Röntgensimulation in Näherung mittels inkohärenter Streufunktion $S(E, \omega, Z)$ (ISF, incoherent scattering function) verwendet. Für das freie Elektron gilt der Klein-Nishina Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma_{\text{Klein-Nishina}}}{d\Omega} = \frac{r_e}{2} \left(\frac{E'}{E} \right)^2 \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - \sin^2 \omega \right). \quad (2.14)$$

Dieser wird durch die ISF korrigiert, zu

$$\frac{d\sigma_{\text{Compton}}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\text{Klein-Nishina}}}{d\Omega} \cdot S(E, \omega, Z). \quad (2.15)$$

Die ISF ist aus Tabellenwerken zu erhalten, z.B. „EPDL97“ [24]. In Abb. 2.3 ist der differenzielle Wirkungsquerschnitt für den Comptoneffekt bei verschiedenen Energien aufgetragen. Der Einfluss der ISF manifestiert sich vor allem dadurch, dass in Vorwärtsrichtung keine Comptonstreuung stattfinden kann.

¹³ Punktweise für jeden Ort an dem Streustrahlung entsteht.

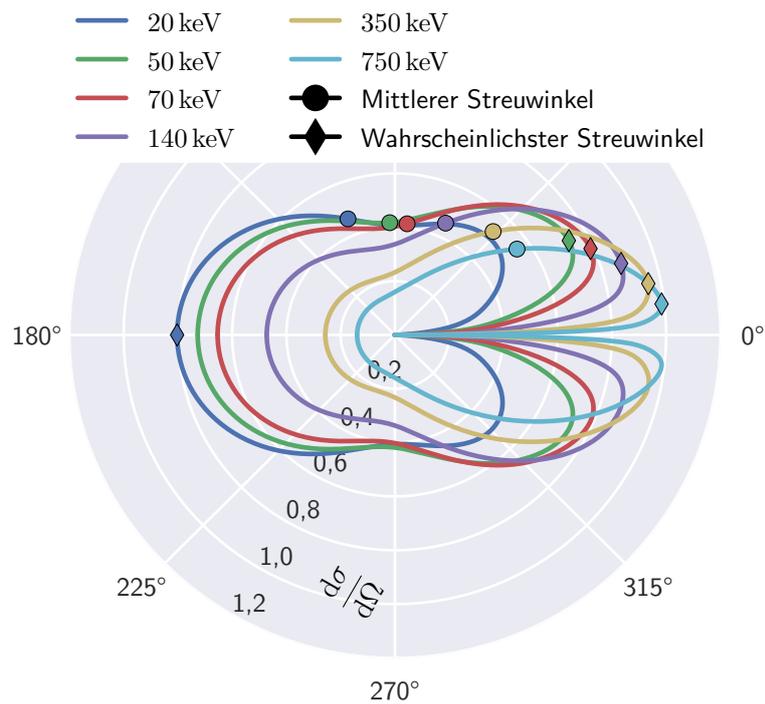


Abb. 2.3.: Polardiagramm des differentiellen Streuquerschnittes für den Comptoneffekt bei verschiedenen Energien (für Aluminium; $Z = 13$). Zusätzlich sind die Richtungen mit dem Maximalwert des Streuquerschnittes „Wahrscheinlichster Streuwinkel“, sowie der „Mittlere Streuwinkel“ eingetragen. Die Werte sind jeweils zwischen 0° und 180° berechnet. Der mittlere Streuwinkel ist das arithmetische Mittel. Für den Rayleigheffekt gibt es eine entsprechende Abbildung in Anhang B.2, Abb. B.1.

Rayleighstreuung

Als Rayleigheffekt wird die elastische Streuung eines Röntgenphotons an einem Atom bezeichnet. Es findet kein Energieübertrag statt. Das Photon ändert lediglich seine Ausbreitungsrichtung. Die Abhängigkeit des totalen Streuquerschnittes ergibt sich nach Ref. [63] näherungsweise zu:

$$\sigma_{\text{Rayleigh}} \propto \frac{Z^{1,5}}{E^2} \quad (2.16)$$

Der differenzielle Wirkungsquerschnitt ergibt sich in der sogenannten Formfaktor-Näherung zu [36]:

$$\frac{d\sigma_{\text{Rayleigh}}}{d\Omega} = r_e^2 \frac{1 + \cos^2 \omega}{2} (f(q, Z))^2 \quad \text{mit } q = 2 \frac{E}{c} \sin\left(\frac{\omega}{2}\right) \quad (2.17)$$

Dabei wird der materialabhängige Teil durch den sogenannten atomaren Formfaktor $f(q, Z)$ beschrieben. Dieser ist in Tabellenwerken verfügbar, z.B. „EPDL97“ [24]. Der materialunabhängige Restterm ist der Thompson-Wirkungsquerschnitt.

Mehrfachstreuung

Die a priori Wahrscheinlichkeit eines Röntgenphotons dafür, dass in seiner Historie zwei oder mehr Streuprozesse stattgefunden haben, hängt von der Energie des Primärphotons, sowie von der Abfolge der Streuwinkel ab. Nachdem in Kap. 5 ein Streumodell für die Simulation der Streustrahlung zweiter Ordnung entwickelt wird, soll an dieser Stelle die Streuwahrscheinlichkeit dafür als Funktion der beiden Streuwinkel ω_1 bzw. ω_2 betrachtet werden.

Für diese Betrachtung sei eine etwaige Propagationsstrecke, auf der beispielsweise eine Absorption des betrachteten Photons stattfinden kann, zwischen dem ersten und zweiten Streuprozess ignoriert (vergleiche dazu auch Abb. 5.4 in Kap. 5.4). Das heißt, es soll nur die Wahrscheinlichkeit betrachtet werden, dass in der Historie eines Photons zwei Streuprozesse vorgekommen sind, ohne Rücksicht auf andere Wechselwirkungspfade. Es werden nur der Rayleigheffekt (R) und der Comptoneffekt (C) betrachtet. Die Möglichen Abfolgen von Streuprozessen zweiter Ordnung sind dann: RR, CC, RC und CR.

Die Wahrscheinlichkeit für einfache Streuung um den Winkel ω_1 ist proportional zum differenziellen Wirkungsquerschnitt $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\omega_1)$, also ist die Wahrscheinlichkeit für zwei nacheinander auftretende Streuereignisse proportional zu dem Produkt der einzelnen differenziellen

Wirkungsquerschnitte

$$\frac{d\sigma}{d\Omega dE}(\omega_1, E) \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega dE'}(\omega_2, E'). \quad (2.18)$$

Dabei gilt für den Rayleigheffekt $E = E'$ und Formel 2.13 für den Comptoneffekt. Für die vergleichende Betrachtung der Streuwahrscheinlichkeit für die zweite Ordnung ist es nicht nötig die Proportionalitätskonstanten aufzuführen, weshalb die Größe 2.18 in der ungewöhnlichen Einheit b^2 (Barn zum Quadrat) betrachtet wird.

Diese Größe ist in Abb. 2.4 in Abhängigkeit der beiden Streuwinkel aufgetragen (und als „doppelter Wirkungsquerschnitt“ bezeichnet). Dazu ist exemplarisch als streuendes Material Aluminium verwendet worden, jeweils für die Primärenergie 90 keV und 400 keV. Die numerischen Werte, die in Abb. 2.4 aufgetragen sind, sind mit Hilfe der Python-Bibliothek „xRaylib“ erzeugt worden. Siehe Ref. [87] für eine Beschreibung der zugrundeliegenden Datenbanken sowie der verwendeten Interpolation.

Man liest aus Abb. 2.4 für die zweite Streuordnung ab,

- dass der Rayleigheffekt stark in Vorwärtsrichtung konzentriert ist. Es ist also unwahrscheinlich ein Photon zu beobachten, welches zweimal elastisch gestreut wurde und dabei seine ursprüngliche Bewegungsrichtung wesentlich verlassen hat. Dies gilt umso mehr, je größer die Primärenergie wird und geht damit einher, dass der Rayleigheffekt im dargestellten Energiebereich ohnehin nicht der dominierende Wechselwirkungseffekt ist.
- dass der Comptoneffekt mit steigender Primärenergie stärker in Vorwärtsrichtung konzentriert ist. Dabei ist allerdings, anders als beim Rayleigheffekt, die exakte Vorwärtsrichtung ($\omega_1 = \omega_2 = 0^\circ$) *verboten*.

Diese Beobachtungen legen nahe, dass man im Rahmen einer Abschätzung der Streustrahlungsintensität für die zweite Ordnung große Winkelbereiche vernachlässigen kann (umso mehr, je größer die Primärenergie ist). Insofern dient die Darstellung in Abb. 2.4 als eine *Landkarte*, mit deren Hilfe man solche Ausschlussbereiche identifizieren kann. Dieses Ergebnis kann dazu verwendet werden, die Simulationsdauern für die Streustrahlungssimulation, welche Gegenstand von Kap. 5 ist zu reduzieren, indem man sich bei der Ausführung von Algorithmus 2 (Kap. 5.5) auf die relevanten Winkelkombinationen beschränkt.

2.1.5. Paarbildung und Annihilationsstrahlung

Überschreitet die Röntgenphotonenenergie die doppelte Ruhemasse des Elektrons ($E > 1022 \text{ keV}$), so kann es im Coulombfeld eines Atomkerns zur Paarbildung kommen. Da-

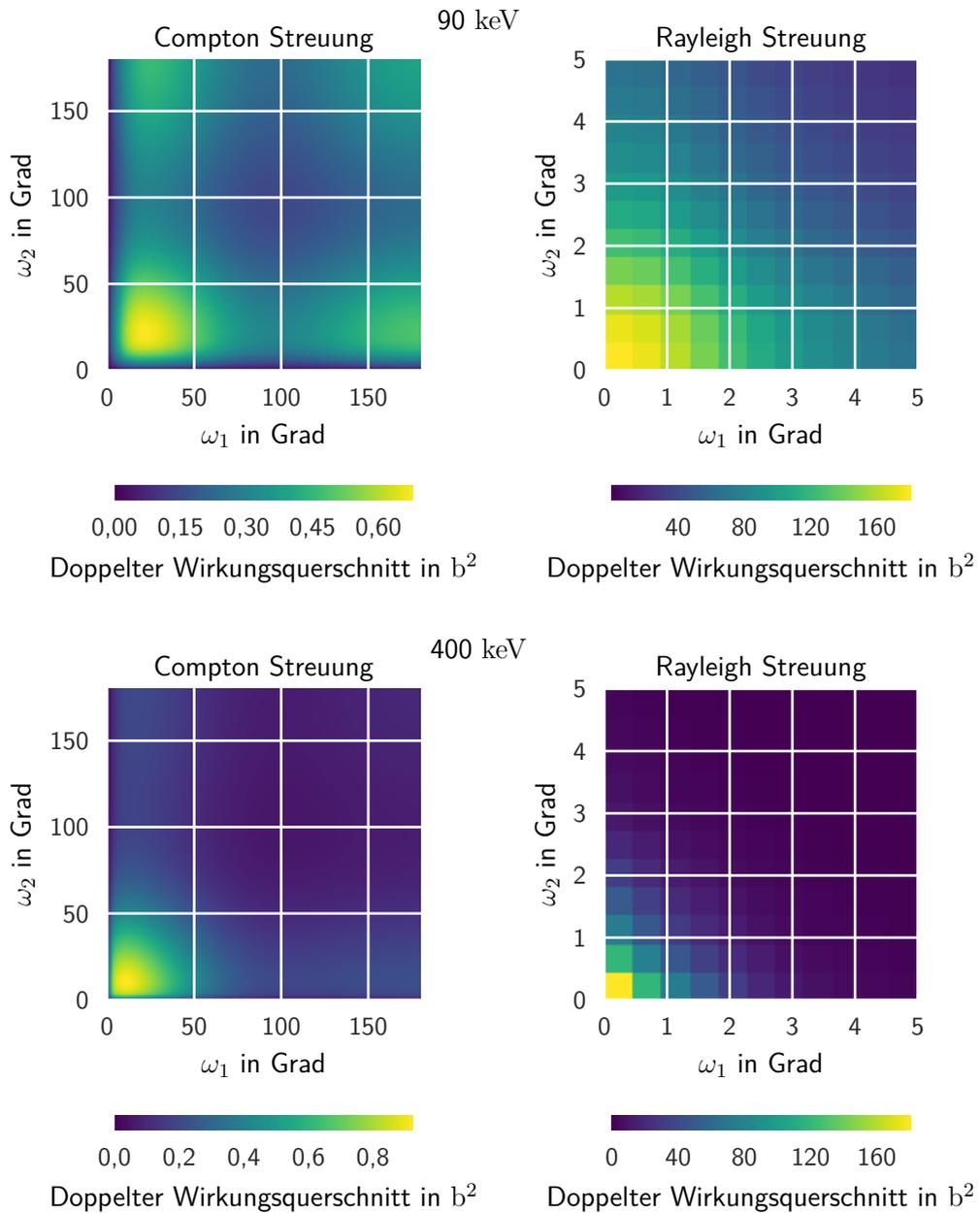


Abb. 2.4.: Zur Untersuchung der Streuwahrscheinlichkeit für zwei aneinander gereichte Streueignisse. Dargestellt ist die Größe 2.18 als farblich markierte Fläche zu den auf den Achsen aufgetragenen Winkeln. Jeweils am Beispiel Aluminium als streuendes Material. Die gemischten Streueffektfolgen (Rayleigh-Compton und umgekehrt) sind im Anhang in Abb. B.2 dargestellt.

bei entsteht ein Elektron-Positron Paar. Das Positron annihiliert nach Abbremsung im umgebenden Material mit einem der dort vorhandenen Elektronen unter Aussendung zweier Photonen mit je 511 keV. Insofern ist dieser Effekt ebenfalls als Streueffekt zu betrachten. Für den Energiebereich, der in dieser Arbeit betrachtet wird ($E < 10 \text{ MeV}$), ist die Annihilationsstrahlung nur relevant, wenn sie im Szintillationsmaterial des Detektors entsteht. Der Anteil, welcher im Objekt entsteht, ist gegenüber der Comptonstreustrahlung vernachlässigbar [95].

2.1.6. Detektion und Bilderzeugung in Kegelstrahlgeometrie

Moderne industrielle CT-Systeme arbeiten überwiegend in sogenannter Kegelstrahlgeometrie. Dazu wird ein Flächendetektor gegenüber einer Röntgenröhre aufgestellt. Dazwischen befindet sich eine Manipulationseinheit, die dazu dient, das zu untersuchende Objekt zu tragen und zu bewegen, sodass aus verschiedenen Richtungen Radiographien aufgenommen werden können. Abbildung 2.5 zeigt schematisch ein CT-System in Kegelstrahlgeometrie.

Das Koordinatensystem sei, wie eingezeichnet, festgelegt. Die einzelnen röntgensensitiven Flächen des Detektors werden als Pixel bezeichnet. Der Ort der Röntgenquelle wird mit Q , der Mittelpunkt des Detektors mit D bezeichnet (sofern nur ein einzelner Pixel betrachtet wird, wird dessen Mittelpunkt der Einfachheit halber auch mit D bezeichnet).

In Kegelstrahlgeometrie ergibt sich, eine vergrößerte Abbildung des Objektes (Schattenwurfgeometrie). Man definiert den Brennfleck-zu-Objekt-Abstand (FOD, focus to object distance) und den Brennfleck-zu-Detektor-Abstand (FDD, focus to detector distance). Daraus berechnet sich der geometrische Vergrößerungsfaktor

$$m = \frac{\text{FDD}}{\text{FOD}}.$$

Durch Variation dieses Abstandsverhältnisses lassen sich verschieden hohe Ortsauflösungen in der CT realisieren. Man nennt deshalb die z -Achse des CT-Systems auch Vergrößerungsachse.

Als *Prüfraum* wird das Volumen des CT- Systems bezeichnet, in dem sich das zu tomographierende Objekt befinden kann. Es ist also das Volumen, für das aus verschiedenen Richtungen Transmissionsmessungen durchgeführt werden, die anschließend im Rekonstruktionsschritt verarbeitet werden.

In Kegelstrahlgeometrie spielt der schräge Einfall der Röntgenphotonen auf die Pixel eine Rolle. Um die Intensität, welche ein Detektorpixel integriert, zu berechnen, muss sowohl der Abstand des Pixels zur Röntgenquelle r als auch seine effektive Fläche berücksichtigt

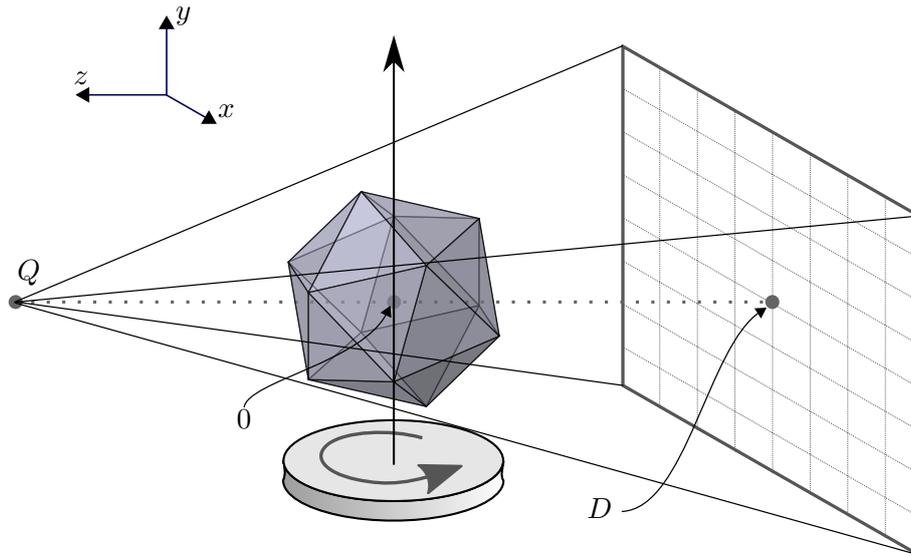


Abb. 2.5.: Schematische Darstellung eines CT-Systems in Kegelstrahlgeometrie. Der Quellort der Röntgenphotonen ist mit Q bezeichnet. Der Mittelpunkt des Flächendetektors ist mit D bezeichnet. Die Strecke \overline{DQ} bildet die optische Achse des Systems. Auf dem Drehteller kann ein Objekt platziert und um die eingezeichnete Achse rotiert werden, um eine CT-Aufnahme mittels einer Standard Kreistrajektorie zu realisieren. Hier und im Folgenden wird das Laborkoordinatensystem so gewählt wie es eingezeichnet ist: Der Koordinatenursprung ist durch den Schnittpunkt von optischer Achse und Rotationsachse gegeben. Als z -Achse wird die Achse bezeichnet, die orthogonal zur Detektorfläche ist, der Quellpunkt liegt in positiver z -Richtung. Die y -Achse entspricht der Rotationsachse. Die x -Achse ist so gewählt, dass ein orthogonales Rechtssystem entsteht; die Kanten des Detektors liegen damit parallel zu der x - bzw. y -Achse.

werden. Für die Simulationsmodelle muss die Intensität des Pixels dementsprechend

$$I_{\text{eff}} = I_0 r_0^2 \frac{\cos \beta}{r^2} \quad (2.19)$$

berechnet werden. Dabei ist β der Winkel zwischen der Pixelnormale und dem Röntgenstrahl. Geht man davon aus, dass die Intensität über die gesamte Pixelfläche A_{Pixel} konstant ist, lässt sich die Energie, welche durch die Pixelfläche pro Zeiteinheit ds hindurch tritt, berechnen

$$\frac{E_{\text{Pixel}}}{ds} = \int_{A_{\text{Pixel}}} dx dy I_{\text{eff}}(x, y) = I_{\text{eff}} A_{\text{Pixel}}. \quad (2.20)$$

Detektorentechnik

Röntgendetektoren dienen dazu ortsabhängig die Intensität der Röntgenstrahlung zu messen und in ein digitales Signal zu wandeln. Dazu kommen im Wesentlichen zwei Typen von Detektoren zum Einsatz. Seltener die sogenannten Direktkonverter. Diese bestehen aus einem Halbleiter. Einfallende Röntgenstrahlung löst im Halbleitermaterial freie Ladungsträger aus, sodass mittels Strommessung ein Signal erzeugt wird.

Die im Rahmen dieser Arbeit wichtigere Klasse von Detektoren sind die sogenannten indirekt konvertierenden Detektoren. Diese basieren auf einem Szintillator, welcher einfallende Röntgenintensität in optische Photonen wandelt. Dahinter befinden sich Photodioden, welche die Intensität des optischen Lichts messen und als Signal ausgeben.

Die Signalthöhe von indirekt konvertierenden Detektoren hängt von der Photonenenergie ab. Die vom Detektor gemessene Intensität ist proportional zur Energie der Photonen und zur Absorption der Photonen im Szintillationsmaterial [10]:

$$I \propto R(E) = E (1 - \exp(-\mu(E)t)) \quad (2.21)$$

Die rechte Seite beschreibt das spektrale Antwortverhalten $R(E)$ eines szintillatorbasierten Detektors (Dicke der Szintillatorschicht t). Die fehlenden Proportionalitätskonstanten beschreiben alle Prozessschritte bzw. deren Effizienzen nach der Erzeugung der optischen Photonen (Effizienz der Photodioden, Effizienz der Verstärkerelektronik etc.). In Abb. 2.6 ist ein Beispiel dazu gezeigt.

An dieser Stelle seien noch drei Begriffe präzisiert, die bisher ohne Einführung verwendet wurden: Unter einer *Radiographie* wird das „Bild“ verstanden, welches man von einem Röntgendetektor erhält. Eine Radiographie ist also das Ergebnis einer orts aufgelösten

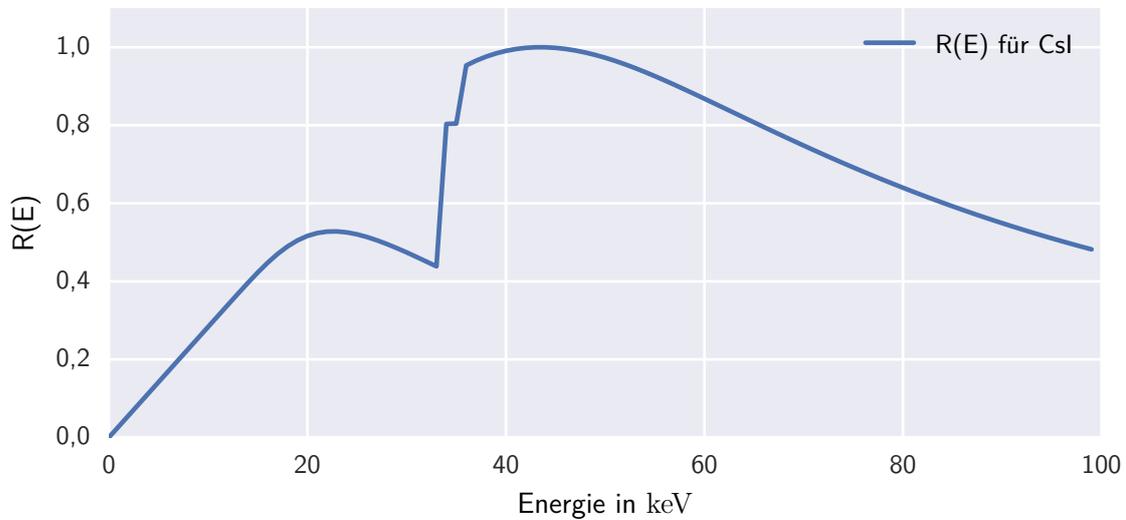


Abb. 2.6.: Spektrale Detektorantwort $R(E)$ nach Glg. 2.21 für einen CsI-Szintillator mit $200\ \mu\text{m}$ Dicke. Die Dichte des CsI ist mit $4,51\ \text{g cm}^{-3}$ angenommen. Die Schwächungskoeffizienten für CsI wurden mit Hilfe der Software aus Ref. [87] berechnet. Die Kurve ist auf ihr Maximum normiert.

Messung der Röntgenintensität. Der Begriff (*Röntgen-*)*Projektion* ist synonym dazu. Er wird allerdings im Kontext von Simulationen bevorzugt verwendet. Eine Transmissionsmessung (also die experimentelle Bestimmung von Glg. 2.11) erhält man, indem man das Verhältnis von geschwächter zu ungeschwächter Intensität bildet. Für CT-Messungen geschieht dies oft, indem eine Radiographie (alle Pixel dieser) durch den ungeschwächten Intensitätswert dividiert. Dabei wird dieser in einem Bildbereich derselben Radiographie abgelesen, in dem kein Objekt im Strahlengang war¹⁴. Insofern kann man auch von einem *Transmissionsbild* sprechen, wenn viele Transmissionsmessungen zu einem Bild zusammengefügt sind.

2.2. Tomographische Rekonstruktion und Signalverarbeitung

Eine CT-Messung läuft vereinfacht dargestellt wie folgt ab. Es wird eine Menge von Röntgenprojektionen des zu messenden Objektes aus möglichst vielen verschiedenen Richtungen aufgenommen. Diese Projektionen werden möglicherweise korrigiert, um etwaige messtechnische Unzulänglichkeiten auszugleichen oder auch um später auftretenden Artefakten entgegenzuwirken. Anschließend folgt die sogenannte Rekonstruktion. In diesem Schritt wird mittels eines numerischen Verfahrens aus der Menge der Röntgenprojektionen die dreidimensionale Verteilung des Schwächungskoeffizienten berechnet. In diesem Ab-

¹⁴ Oft ist neben bzw. über dem Objekt „Luft“ abgebildet.

schnitt wird skizziert, wie die beiden gängigen tomographischen Rekonstruktionsverfahren funktionieren.

2.2.1. Tomographische Aufnahme- und Rekonstruktionsverfahren

Das Ergebnis einer tomographischen Rekonstruktion sind die Schnittbilder des untersuchten Objektes. Die Schnittbilder werden Tomogramme genannt. In dieser Arbeit werde ich, etwas ungenauer auch dann von einem Tomogramm sprechen, wenn es sich um eine Menge bzw. einen Stapel von Schnittbildern handelt. Eine formale Definition des Begriffs Tomogramm folgt in Kap. 3.

Um aus einer Menge von Röntgenprojektionen ein Tomogramm zu berechnen, benötigt man ein mathematisches Verfahren, welches im Folgenden *Rekonstruktionsalgorithmus* genannt wird. Gegenstand dieses Abschnitts ist es, in knapper Form die gängigen Rekonstruktionsalgorithmen zu beschreiben. Nachdem im Rahmen dieser Arbeit die verwendete Rekonstruktionsalgorithmik nicht auf ihre Parametrierung hin untersucht wird, soll eine reine Beschreibung der Rekonstruktionsalgorithmen, ohne ausgeführte Herleitungen, genügen. Man findet sie in Ref. [15]. Gleichzeitig will ich einige Bezeichnungen der Aufnahmegeometrie einführen.

Die tomomographische Rekonstruktion ist die Inversion der sogenannten *Radon-Transformation*. Tatsächlich handelt es sich meist um eine Näherung der inversen Radon-Transformation. Die Radon-Transformation ist definiert über das Linienintegral

$$\mathcal{R}f = \int_g f(x, z) ds, \quad (2.22)$$

welches entlang aller Geraden g der (x, z) -Ebene ausgeführt wird. Dabei ist $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion, die außerhalb eines Kreises in der Ebene mit endlichem Radius verschwindet [15]. Wenn man sich die Gerade g dadurch definiert denkt, dass sie durch den Quellpunkt einer Röntgenquelle und durch die Mitte eines Detektorpixels läuft, erschließt sich der Zusammenhang zur Röntgentransmissionsmessung. Zum Vergleich schreibt man den Logarithmus von Gleichung 2.11

$$M(g) = \ln(T) = - \int_g \mu(x, z) ds \quad (2.23)$$

und stellt fest, dass es sich um eine Radontransformation bezüglich aller möglichen Strahlwege, die ein Röntgenstrahl in einer Ebene eines absorbierenden Objekts haben kann, handelt.

An dieser Stelle muss der Begriff der Projektion nochmals verfeinert bzw. abgegrenzt

werden. Es wird von einer Röntgenprojektion gesprochen, wenn eine Radiographie, also ein zweidimensionales „Röntgenbild“, gemeint ist. Der Begriff *Projektion* wird in diesem Kapitel, also im Kontext der Rekonstruktionsalgorithmik, für $M(g)$ verwendet. Nachdem diese Abgrenzung nur eine Rolle spielt, wenn explizit über Rekonstruktion gesprochen wird, wird die Bezeichnung für $M(g)$ nur in diesem Kapitel verwendet.

Es sei angemerkt, dass die $M(g)$ aus Transmissionsmessungen, wie oben beschrieben, mit einem polychromatischen Röntgenstrahl stammen. Das heißt, es ist bereits hier im Ansatz der Rekonstruktionsalgorithmik die Energieabhängigkeit von μ vernachlässigt¹⁵. Das führt zu dem Strahlaufhärtungsartefakt. Man muss sich also bewusst sein, dass das Ergebnis der Rekonstruktion kein linearer Schwächungskoeffizient bei einer bestimmten Energie ist, sondern ein Effektivwert. Die Funktion f stellt also die 2D-Ortsverteilung der Schwächungskoeffizienten in einer Schnittebene eines Objekts dar $f(x, z) \equiv \mu(x, z)$. Wenn man der Umgebungsluft eines Objektes den Schwächungskoeffizienten Null zuordnet und davon ausgeht, dass das untersuchte Objekt eine endliche Ausdehnung besitzt, so wird klar, dass auch obige Bedingung für die Funktion f erfüllt ist.

Wenn eine CT-Messung bezüglich einer Schnittebene des Objektes mittels der gemessenen *Strahlsummen* für alle möglichen g durchgeführt wurde, so hat man die Radontransformation der Objektfunktion f vorliegen¹⁶. Unabhängig davon, ob nur eine einzelne Schnittebene oder das gesamte Objektvolumen tomographiert werden soll, kann praktisch immer nur eine endliche Menge von Linienintegralen „gemessen“ werden. Die Menge der realisierten g wird durch alle Orte, an denen sich die Röntgenquelle befinden kann, und alle Orte, an denen sich ein Detektorpixel befinden kann, definiert. Es gibt bezüglich dieser (diskreten) Abtastung des Raumes einige Standardvorgehen, deren Bezeichnungen hier eingeführt seien. Man nennt eine Abfolge von Detektorpositionen (ein Detektor sei hier eine konkrete Anordnung von Pixeln) und Quellpunktpositionen *Trajektorie*¹⁷.

Parallelstrahlgeometrie Es gibt einen Quellpunkt, von dem ein kollimierter Nadelstrahl ausgeht, welcher ein einzelnes Pixel trifft. Diese Anordnung wird senkrecht zur Strahlrichtung in der zu tomographierenden Ebene verschoben, um das Objekt abzutasten. Für jede Position wird die Objekttransmission bestimmt. Anschließend wird die Strahlrichtung um den Normalenvektor der Ebene gedreht und wieder mittels Parallelverschiebung abgetastet. Dieses Prozedere wird solange wiederholt, bis um mindestens 180° rotiert wurde. Dies ist die *Trajektorie* der Computertomographen erster Generation.

¹⁵ Es gibt auch Ansätze das Spektrum mit zu berücksichtigen, siehe [26]

¹⁶ Für die entsprechende Schnittebene.

¹⁷ Ich gehe an dieser Stelle nicht darauf ein, inwiefern diese *Trajektorien* vollständig im Sinne der Tuy-Smith-Bedingung sind.

Fächerstrahlgeometrie Es gibt eine Röntgenquelle, von der ein in einer Richtung kollimierter Strahl ausgeht. Dieser trifft auf einen Detektor in Form einer Zeile aus aneinander gereihten Pixeln. Mittels der Detektorzeile wird simultan die Transmission des Objektes an allen Stellen gemessen, die im Strahlengang stehen. Anschließend wird die Anordnung um den Normalenvektor der Strahlebene gedreht (Drehzentrum ist die Objektmitte). Dieses Prozedere wird wiederholt, bis die Anordnung um mindestens 180° plus dem Öffnungswinkel des Fächers rotiert wurde. Diese Trajektorie ist an Computertomographen der zweiten Generation realisiert.

Kegelstrahlgeometrie mit Standard Kreistrajektorie Es gibt eine Röntgenquelle und einen (rechteckigen) Flächendetektor, dessen Normalenvektor auf den Quellpunkt zeigt. Verbindet man den Quellpunkt mit den Ecken des Detektors, ergibt sich ein Strahlkegel in dem das Objekt für die Transmissionsmessung positioniert wird. Anschließend wird die Anordnung, um einen Vektor, der parallel zu einer der Detektorkanten ist, rotiert und wieder eine Transmissionsmessung durchgeführt. Dieses Prozedere wird typischerweise wiederholt, bis 360° Drehung erreicht ist. Diese Trajektorie ist die wohl am häufigsten angewendete im Bereich der industriellen Computertomographie.

Kegelstrahlgeometrie mit Helix-Trajektorie Das Vorgehen ist wie bei der Standard Kreistrajektorie, wobei das Objekt zusätzlich entlang des Rotationsvektors verschoben wird und es kann mehr als eine Umdrehung geben. Aus Sicht des Objektes bewegen sich Quell- und Detektormittelpunkt auf einer Helix. Diese Trajektorie findet bei Objekten Anwendung, die in einer Dimension besonders ausgedehnt sind.

Kegelstrahlgeometrie mit beliebiger Trajektorie Man stellt sich ein Objekt vor, welches in einer Kegelstrahlgeometrie um beliebige Winkel gedreht werden kann. Es kann auch beliebig verschoben werden, dabei muss es auch nicht immer vollständig vom Kegelstrahl erfasst werden. Solche Trajektorien (die letztlich erst noch objektspezifisch definiert werden müssen) können beispielsweise realisiert werden, indem Röntgendetektor und -quelle jeweils von einem industriellen Roboter gehalten werden und dadurch beliebig im Raum um das Objekt herum positioniert werden können.

Gesucht wird die Objektfunktion $f(x, z)$ bzw. $f(x, y, z)$ für den 3D Fall. Zunächst muss der Zusammenhang zwischen f und M hergestellt werden. Nachdem f nur diskretisiert gespeichert und berechnet werden kann¹⁸, stellt man sich f als Treppenfunktion vor. f hat also in kleinen, abgeschlossenen Raumabschnitten (z.B. Quadrate in 2D oder Würfel in 3D), den sogenannten Voxeln v , einen konstanten Wert. Die Koordinate eines Voxels v ist durch dessen Mittelpunkt gegeben. Die Voxel v können allerdings auch durch einen Zählindex

¹⁸ Das liegt auch daran, dass der Raum nur diskret durch die Geraden g abgetastet wird.

(i, j, k) adressiert werden. Dazu sei eine eindeutige Transformation in das kartesische Koordinatensystem gegeben¹⁹. Man stellt sich vor, dass ein „Strahl“ g den Objektraum schneidet und entlang seines Weges eine Reihe von Voxeln trifft $\{v_{i,j,k} | g \cap v_{i,j,k}\}$. Damit kann der Projektionswert (hier Strahlsumme) in diskreter Form aufgeschrieben werden

$$M(g) = \sum_{\{v_{i,j,k} | g \cap v_{i,j,k}\}} t_{i,j,k} v_{i,j,k}. \quad (2.24)$$

Dabei sind die $t_{i,j,k}$ die Schnittlängen, die ein Strahl mit dem entsprechenden Voxel hat. Hat man nun eine Menge von Projektionen (für viele verschiedene Richtungen g) vorliegen, so lässt sich ein lineares Gleichungssystem aufstellen:

$$\mathbf{M} = A\mathbf{v} \quad (2.25)$$

Dazu wurden alle, durch Messung erhaltenen, Projektionen im Vektor \mathbf{M} zusammengefügt und alle Voxel, also die Unbekannten, im Vektor \mathbf{v} . Die *Systemmatrix* A beschreibt den Zusammenhang der Voxel und der Messwerte. Sie ergibt sich aus der Menge der verwendeten (vorhandenen) g . Gleichung 4.4 ist eine Aneinanderreihung von Gleichung 2.24 bezüglich aller g , die in der zur Messung verwendeten Trajektorie vorkamen. Anstatt, wie hier beschrieben, die Einträge von A aus den Schnittlängen $t_{i,j,k}$ zu bilden, kann man auch von ausgedehnten Strahlen ausgehen und den Projektionswert korrekterweise als Flächenintegral auffassen (z.B. Ausdehnung gleich Breite eines Detektorpixels). Dann wird in A der Flächenanteil, den der Strahl mit dem Voxel einschließt gesetzt [15].

Systemmatrizen sind sehr groß und im Allgemeinen nicht quadratisch. Es handelt sich um schlecht gestellte inverse Probleme und durch Rauschen der Messdaten und Überbestimmtheit ist meist keine Eindeutigkeit der Lösung zu erwarten. Nachdem direkte Inversion der Systemmatrix A des linearen Gleichungssystems nicht möglich ist, gibt es verschiedene Verfahren zur näherungsweisen Lösung.

Ein bekannter Vertreter ist das iterative Rekonstruktionsverfahren vom Typ ART (algebraic reconstruction technique). Es läuft nach folgendem Schema ab (aus [15]):

1. Setze eine initiale Schätzung für die Unbekannten (z.B. alle Voxel auf Null setzen $\mathbf{v}^{n=0} = \mathbf{0}$).

¹⁹ Nachdem man typischerweise Würfel als Voxel verwendet, genügt es also einen Nullpunkt, die Kantenlänge und die drei Richtungsvektoren zu speichern.

2. Aktualisiere die gegenwärtige Lösung (dazu wird eine zufällige Zeile i des Gleichungssystems gewählt)

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n - \frac{A_i \mathbf{v}^n - M_i}{A_i A_i^\top} A_i^\top. \quad (2.26)$$

Hierbei ist n der Zählindex der Iteration.

3. Wiederhole Schritt ab 2, bis sich Konvergenz der Lösung eingestellt hat.

Die zweite wichtige Klasse von Rekonstruktionsverfahren sind die Verfahren vom Typ gefilterte Rückprojektion (FBP, engl. filtered back projection). Diese Rekonstruktionsverfahren sind besonders wichtig, da sie deutlich weniger Rechenaufwand erfordern und damit schneller sind als ART-Verfahren.

Die FBP-Verfahren basieren auf dem sogenannten Fourier-Scheiben-Theorem (fourier slice theorem). Dieses besagt²⁰, dass ein Schnitt durch den Ursprung der 2D Fouriertransformierten der Objektfunktion $f(x, z)$ gleich der 1D Fouriertransformierten des Projektionssignals ist. Das 1D *Projektionssignal* kommt zustande, indem man die Parallelstrahlgeometrie anwendet. Projektionssignal ist also die Menge aller $M(g)$ für alle zueinander parallelen g . Das nennt man auch die Radontransformation in Parallelstrahlgeometrie. Es ist das Ergebnis einer Transmissionsmessung mit einem Zeilendetektor in Parallelstrahlgeometrie. Hat man sehr viele dieser Projektionssignale aus verschiedenen Richtungen vorliegen, kann man also die Ebene der Fouriertransformierten von $f(x, z)$ „füllen“. Nach inversem Fouriertransformieren erhält man die Objektfunktion. Damit ist also eine einfache Rekonstruktionsvorschrift gegeben.

Eine Rekonstruktionsvorschrift, die das Fourier-Scheiben-Theorem anwendet, ist die sogenannte gefilterte Rückprojektion. Bei dieser wird, zusätzlich zu dem eben beschriebenen Vorgehen, ein Hochpassfilter auf das Projektionssignal angewendet, um der speziellen Abtastgeometrie Rechnung zu tragen (man entgeht dem sogenannten regridding-Problem). Besonders hervorzuheben ist der Algorithmus von Feldkamp, Davis und Kress [32]. Dieser ist ein verbreitetes Rekonstruktionsverfahren vom Typ FBP für den Kegelstrahlfall, also eine Erweiterung des eben beschriebenen für den Fall mit Flächendetektoren. Sofern nichts Gegenteiliges vermerkt ist, wird im Folgenden eine Implementierung dieses Verfahrens verwendet, wenn von „der Rekonstruktion“ bzw. von dem FBP-Verfahren die Rede ist.

2.2.2. Artefakte

Als Artefakte bezeichnet man Strukturen im Tomogramm, welche nicht dem abgebildeten Objekt entspringen. Es handelt sich also um Abbildungsfehler. In Kap.3 werden sie allge-

²⁰ Hier ohne jede Herleitung in 2D beschrieben, man findet sie in Ref. [15]

mein, als Fehler der Messung des Schwächungskoeffizienten behandelt.

Der Einfluss von Artefakten auf das Ergebnis einer Messdatenauswertung (z.B. dimensionelles Messen mittels CT) ist vielfältig und Gegenstand zahlreicher Untersuchungen. Im industriellen Kontext oft im Hinblick auf Artefaktreduktion und deren Auswirkung auf nachgelagerte Datenprozessierung, z.B. Ref. [51, 59].

Für häufig auftretende Artefakttypen haben sich feststehende Bezeichnungen etabliert. Es haben sich in der Literatur, je nach fachlicher Spezialisierung der Autoren²¹, verschiedene Blickwinkel auf dieselben Artefakte ergeben. Deshalb findet man dieselben Artefakte unterschiedlich typisiert und entweder nach ihrer Wirkung im Bild oder nach ihrem Ursprung benannt. Es kommt auch vor, wie z.B. beim *cupping-Artefakt*, dass eine wirkungsbezogene Bezeichnung mehrere ursprungsbezogene Artefakttypen einschließt. Hier sind das das *Strahlaufhärtungs-Artefakt* sowie das *Streustrahl-Artefakt*. Die Verwirrung in der Bezeichnung gerade bei diesem Beispiel stammt auch daher, dass die Streustrahl- und Strahlaufhärtungs-Artefakte fast immer gemeinsam auftreten und sich in ihrer Wirkung überlagern. Diese Artefakttypen werden in dieser Arbeit eine wichtige Rolle spielen, da sie bei typischen industriellen CT-Messungen auftreten und teilweise so stark ausgeprägt sind, dass die zugrunde liegende Fragestellung nicht mehr beantwortet werden kann. Die Beispiele in Abschnitt 3.4 zeigen starke Ausprägungen verschiedener Artefakte bis hin zum Verlust der Bildinformation.

Nachdem es teilweise nicht einfach ist, Artefakte ihren Ursachen zuzuordnen, ist es nützlich diese in Simulationen zu untersuchen. Dabei besteht die Möglichkeit, einzelne potenziell ursächliche Effekte, getrennt voneinander zu betrachten. Der später in dieser Arbeit diskutierte Ansatz zur Optimierung tomographischer Messungen beruht letztlich darauf, dass Artefakte gezielt simuliert werden können. Eine Untersuchung von Artefaktquellen mittels Simulation ist in Ref. [101] durchgeführt. In Ref. [52] wird vorgeschlagen, die Messunsicherheiten für das dimensionelle Messen mittels CT simulationsbasiert zu bestimmen.

Eine ausführliche Beschreibung von Artefakten und ihren typischen Ursachen findet man in Ref. [15]. Die Ursachen für Artefakte sind dort auch in verschiedene „Schichten“ gegliedert. Wobei jede Schicht mehrere mögliche Bild-degradierende Einflüsse zeigen kann. Die Schichten sind aus Ref. [15] übernommen und seien als Beispiel für eine Systematik der Artefaktquellen genannt: Physikalische- bzw. Röntgenabbildungsschicht, Sensor- bzw. Detektorschicht, Elektronik- bzw. Digitalisierungsschicht, Rekonstruktions- bzw. Algorithmschicht und Bildverarbeitungs- bzw. Darstellungsschicht. Für diese Systematik ist

²¹ Zu nennen sind im Wesentlichen: Mathematiker, Physiker, Ingenieure und im speziellen Signalverarbeiter.

eine Signalübertragungskette für die 3D-Abbildung zwischen den einzelnen Schichten als Modellvorstellung angenommen.

Es gibt bisher kein allgemeingültiges Maß, welches die Menge an Artefakten im Tomogramm quantifizieren kann (mit Ausnahme von Abstandsmaßen, welche ideale Referenzdaten benötigen). In Kapitel 6 wird ein Weg beschrieben, wie ein solches Maß auf Basis der Informationstheorie gefunden werden kann. Dazu ist es nicht nötig eine Auflistung der Artefakttypen vorzunehmen, denn alle Artefakte haben gemeinsam, dass das artefaktbehaftete Tomogramm eine fehlerhafte Messung des Schwächungskoeffizienten beinhaltet. In Kap. 3 wird das genauer ausgeführt.

2.3. Gebräuchliche Bildgütemaße für die Computertomographie

Um die Ergebnisqualität einer tomographischen Aufnahme zu bewerten haben sich verschiedene, meist aus der Signalverarbeitung entlehnte, Bildgütemaße etabliert. Sie haben jeweils eine beschränkte Anwendbarkeit, z.B. weil sie nur für bestimmte Regionen (region of interest, ROI) im Tomogramm oder nur für bestimmte Anwendungsfälle definiert sind. In Kap. 6 beschäftige ich mich ausführlich damit, wie ein allgemeingültiges Gütemaß für Tomogramme definiert werden kann. Einige gebräuchliche werden hier genannt. Teilweise wird die Bildgüte auch anhand von Kennwerten für das Ortsauflösungsvermögen diskutiert [15].

Es sei ein Tomogramm gegeben und zwei Teilbereiche ROI_A und ROI_B aus diesem mit jeweils homogener Bildinformation (z.B. Volumen in dem Aluminium abgebildet ist, ohne Überlapp mit einer Oberfläche). Die Schwächungskoeffizienten der einzelnen Voxel sind über das Indextripel i, j, k adressiert. Der $\langle \cdot \rangle$ -Operator bezeichnet die Mittelung über das Teilvolumen und σ die Standardabweichung. Damit definiert man:

Kontrast

$$| \langle \mu \rangle_{ROI_A} - \langle \mu \rangle_{ROI_B} | \quad (2.27)$$

SNR, Signal-zu-Rausch-Verhältnis

$$SNR = \frac{\langle \mu \rangle_{ROI_A}}{\sigma_{ROI_A}} \quad (2.28)$$

CNR, Kontrast-zu-Rausch-Verhältnis

$$\text{CNR} = \frac{|\langle \mu \rangle_{\text{ROI}_A} - \langle \mu \rangle_{\text{ROI}_B}|}{\sigma_{\text{ROI}_B}} \quad (2.29)$$

Totale Variation

$$\text{TV} = \sum_{i,j,k} \sqrt{|\mu_{i+1,j,k} - \mu_{i,j,k}|^2 + |\mu_{i,j+1,k} - \mu_{i,j,k}|^2 + |\mu_{i,j,k+1} - \mu_{i,j,k}|^2} \quad (2.30)$$

Hat man ein (ideales) Referenzvolumen ($\hat{\mu}_i$) gegeben, kann man die mittlere Absolutdifferenz aller N_V Voxel betrachten:

$$D = \frac{1}{N_V} \sum_i^{N_V} |\mu_i - \hat{\mu}_i| \quad (2.31)$$

Ergänzend zur Bewertung anhand von numerischen Maßen kann man auch anhand des Histogramms, also der Häufigkeitsverteilung der Schwächungskoeffizienten, eines Tomogramms Rückschlüsse auf die Qualität der Abbildung ziehen. Im Tomogramm eines industriellen Objekts, mit wenigen verschiedenen Materialklassen, sollten die Schwächungskoeffizienten diskret verteilt sein. Die Form des Histogrammes sollte also eine Verteilung mit wenigen scharfen Peaks sein. Verbreiterungen der Peaks, also Verteilungen um einen bestimmten Schwächungskoeffizienten, deuten auf Artefakte hin. Ein solcher Peak wird im Folgenden auch als Materialpeak bezeichnet, da er typischerweise alle Schwächungskoeffizienten die eine bestimmte Materialklasse abbilden beinhaltet. Überlappen solche Materialpeaks, ist kein bzw. nur ungenügender Kontrast zwischen den entsprechenden Materialklassen vorhanden. Man kann die Materialien dann im Tomogramm nicht mehr klar voneinander unterscheiden. In Kap. 4.4 finden sich gute Beispiele für die Bewertung von Tomogrammen anhand von Histogrammpeaks. In Kap. 3 wird ausführlicher beschrieben wie ein optimales Tomogramm zustande kommt.

2.4. Simulation der Röntgenbildgebung

2.4.1. Definition wichtiger Begrifflichkeiten

Im Verlauf dieser Arbeit werden einige Begriffe, deren Abgrenzung im Folgenden gegeben wird, im Themenfeld „Simulation“ Verwendung finden.

Wenn computernumerisch ein physikalisches Experiment nachgestellt werden soll, wird von einer *Simulation* gesprochen. Insofern sei für alle Begriffe, die für ein Röntgen-Experiment in dieser Arbeit auftreten, ein entsprechendes Pendant definiert. Das ist im Einzelnen:

Röntgensimulation, Simulation Steht dem Begriff der Röntgenmessung bzw. Messung gegenüber²² und bezeichnet das computernumerische Pendant.

simulierte Projektion, simulierte Radiographie Das Ergebnis einer Röntgentransmissionsmessung, wenn explizit ein Flächendetektor gemeint ist, ist eine Radiographie bzw. Projektion. Entsprechend also das simulierte Analogon zu diesen Begriffen.

CT-Simulation Analog zur CT-Messung ist die Simulation eines Projektionsstapels bezeichnet, welcher anschließend mit demselben Rekonstruktionsverfahren wie bei einer Messung zu einem Tomogramm rekonstruiert wird.

Simulationsreihe Bezeichnet, analog zu einer Messreihe (CT-Messreihe oder Transmissionsmessreihe), eine Menge von synthetischen Daten für deren Erzeugung ein oder mehrere physikalische Parameter systematisch variiert wurden.

Simulationsmodell, Simulationsmethode Bezeichnet die physikalische oder mathematische Modellierung, die zur Implementierung der Simulation verwendet wird. Dazu gehört auch die Unterscheidung zwischen einem probabilistischen oder deterministischen Ansatz (siehe dazu die folgenden beiden Abschnitte). Damit ist allerdings *nicht* der Algorithmus, also die Abfolge in der die Gleichungen etc. ausgewertet werden, gemeint.

2.4.2. Deterministische bzw. analytische Röntgensimulation

Als analytische oder deterministische Simulationsmethode bezeichnet man eine auf einem Strahlverfolgungsansatz beruhende Methode zur Berechnung von Röntgenprojektionen. Die Begriffe analytische bzw. deterministische Simulation werden in der Literatur weitgehend synonym gebraucht. Referenzen²³, welche sich teilweise aus verschiedenen Blickwinkeln mit der Methode beschäftigen, sind [28, 55, 70].

Wesentlich für die analytische Simulationsmethode ist, dass Strahlenbündel modelliert werden. Man betrachtet eine Menge von Photonen (einen Strahl) entlang eines Pfades von Quellpunkt zu Detektorpixel. Zur Berechnung der Intensität, welche ein Detektorpixel integriert, wird (etwas vereinfacht) nach dem folgenden Schema vorgegangen:

1. Definiere den Röntgenquellpunkt und den Ort der Senke (Pixelmittelpunkt). Die gerade Strecke zwischen diesen beiden Punkten ist der Pfad auf dem sich die Röntgenphotonen bewegen und absorbiert werden, wenn der Pfad das Objekt schneidet.

²² Ich bezeichne nicht das numerisch nachgebildete CT-System als Simulation.

²³ Wobei diese Liste sicherlich unvollständig ist.

2. Berechne entlang des Pfades von Quelle zu Senke die Strahlsumme

$$M(E) = \int_w \mu(E, t') dt'. \quad (2.32)$$

Dazu wird eine Beschreibung des (virtuellen) Objektes benötigt, welche für jedes vorkommende Material die Form der Oberfläche enthält. Das Material ist durch den linearen Schwächungskoeffizienten gegeben. Die geschlossene Oberfläche kann z.B. durch ein Dreiecksnetz oder eine Menge von geometrischen Primitiven (Kugel, Quader etc.) gegeben werden. Die Berechnung der Schnittlänge (pro Materialklasse) des Strahls mit dem Objekt übernimmt ein sogenannter Raytracing-Algorithmus²⁴.

3. Um die Intensität, die der Pixel „sieht“, zu berechnen, wird schließlich über alle Energien integriert

$$I = \int_{E_0}^{E_{max}} S(E) \exp\left(-\int_w \mu(E, t') dt'\right) R(E) dE \quad (2.33)$$

$$= \int_{E_0}^{E_{max}} D(E) \exp\left(-\int_w \mu(E, t') dt'\right) dE. \quad (2.34)$$

Dazu wird vorher das Röntgenquellspektrum $S(E)$ sowie das spektrale Antwortverhalten des Detektors $R(E)$ festgelegt. Es ist bemerkenswert, dass in diesem Modell der analytischen Simulationmethode streng genommen das Produkt aus diesen beiden spektralen Komponenten genügt. Das Produkt $D(E) = S(E)R(E)$ charakterisiert also das zu simulierende System. Es wird daher im Folgenden als Systemspektrum bezeichnet. In einer Implementierung des analytischen Simulationsmodells wird das Integral in Glg. 2.33 numerisch ausgeführt. Dazu ist es nötig vorab eine geeignete Diskretisierung der Energieachse zu wählen. Um auf die korrekte Pixel-Intensität zu kommen, muss zusätzlich Glg. 2.19 berücksichtigt werden (quadratisches Abstandsgesetz und Schrägeinstrahlung). Nachdem ein Pixel eines realen Detektors als Messwert das Flächenintegral der auf seine Effektivfläche einfallenden Strahlung wiedergibt, ist es häufig zu ungenau die Intensität bezüglich der Pixelmitte zu berechnen. In diesen Fällen behilft man sich damit, dass mit Subpixeln gearbeitet wird. Dabei wird die Simulation bezüglich jedes Subpixels ausgeführt und anschließend summiert (also das numerische Flächenintegral gebildet).

4. Dieses Prozedere wird für alle Pixel des virtuellen Detektors wiederholt. Dieser kann dabei beliebige Geometrie haben.

²⁴ Hier hat sich in der Gemeinde der „Röntgensimulierer“ leider ein schlechter Begriff eingeschlichen, Computergraphiker würden genau diesen Algorithmus als Raycasting bezeichnen.

5. Für eine CT-Simulation wird für alle Trajektorienpositionen eine simulierte Projektion berechnet.

Um quantitativ korrekter zu werden und weitere Effekte eines realen CT-Systems nachstellen zu können gibt es diverse Erweiterungen dieser analytischen Simulationsmethode. Das sind:

Rauschen Anstatt die Intensitäten aus Glg. 2.33 als Pixelwerte zu setzen, werden geeignete²⁵ Zufallszahlen, deren Erwartungswert I ist, gesetzt.

Streustrahlung Im Objekt gestreute Röntgenstrahlung, welche den Detektor erreicht, kann, in Grenzen, im analytischen Modellen berücksichtigt werden. In Kap. 5 werden existierende Verfahren vorgestellt und erweitert.

Röntgenbrennfleck Die räumliche Ausdehnung und Form des Röntgenbrennflecks kann dadurch berücksichtigt werden, dass dieser durch mehrere punktförmige Subbrennflecke abgetastet wird. Bezüglich jedes Subbrennflecks wird eine eigene Simulation durchgeführt und die Ergebnisprojektionen summiert.

Detektorunschärfe Eine Unschärfe bzw. Verschmierung der Projektion, die bei realen Detektoren auftritt, kann über eine Punktspreizfunktion (Sprungantwortverhalten) des Detektors beschrieben werden. Hat man eine solche Punktspreizfunktion gegeben, kann eine simulierte Projektion mit dieser gefaltet werden, um den auflösungsmindernden Effekt nachzustellen.

Es gibt mehrere, teilweise kommerzielle, Implementierungen des analytischen Simulationsmodells. Im Rahmen dieser Arbeit ist die Software Scorpius XLab[®] zum Einsatz gekommen, wann immer von analytischer Simulation gesprochen wird.

2.4.3. Monte-Carlo Röntgensimulation

Die sogenannte Monte-Carlo (MC) Methode (MC) zur Röntgensimulation ist ein probabilistisches Verfahren. Modelliert werden einzelne Photonen oder Elektronen, deren Lebensweg von virtueller Quelle bis zur Vernichtung verfolgt wird. Man spricht von der Teilchenhistorie. Die Teilchen „leben“ in einer virtuellen Welt, in der alle relevanten Objekte durch ihre Form, Ort und ihr Material beschrieben sind (z.B. Objekt). Die Vernichtung kann ein Absorptionsprozess oder Verlassen der *Simulationswelt* sein. Die Vorgehensweise von MC Simulationen ist allgemein in Ref. [84] beschrieben. Der *Teilchentransport* wird als Markov-Kette erster Ordnung aufgefasst: Der Transport eines Teilchens hängt nur von

²⁵ Es werden poisson- oder normalverteilte Zufallszahlen verwendet.

seinem aktuellen Zustand (Ort, Bewegungsrichtung und Energie) ab. Ein Teilchentransport kommt nach folgendem Schema zustande: Abhängig vom Zustand wird eine Zufallszahl für die Propagationsstrecke gezogen. Diese hängt von der mittleren freien Weglänge des Teilchens in seinem aktuellen Medium ab. Wenn entlang dieser Strecke keine Materialoberfläche liegt, wird der Ort des Teilchenzustands entsprechend aktualisiert (andernfalls propagiert das Teilchen bis zur Oberfläche). Abhängig vom neuen Zustand wird, wieder mit Hilfe einer Zufallszahl, entschieden welchen Wechselwirkungseffekt das Teilchen *erfährt*. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung dafür hängt von den in diesem Medium und für dieses Teilchen gültigen Wechselwirkungsquerschnitten ab. Anschließend wird der Zustand des Teilchens wieder entsprechend aktualisiert (bei Streuprozessen wird also beispielsweise die Energie und Bewegungsrichtung geändert). Wenn Sekundärteilchen entstehen, werden diese separat behandelt (sie erhalten ihre eigene Teilchenhistorie). Diese Schritte werden so lang wiederholt bis das Teilchen vernichtet wird.

Nachdem die Teilchenhistorie erzeugt wurde, kann diese Informationsmenge entsprechend ausgewertet werden. Ein virtueller Röntgen-Detektor funktioniert in einer MC-Simulation vereinfacht gesprochen so: Wenn ein Teilchen im Volumen des Detektors Energie deponiert (z.B. weil ein Photon einen Absorptionsprozess erfährt) wird dies entsprechend gespeichert (ortsabhängige Energiedeposition). Passiert dies mit sehr vielen Photonen ergibt sich eine Verteilung (z.B. simuliertes Röntgenbild).

3. Aufnahmeplanungsproblem und simulationsgestützter Lösungsansatz

Eine computertomographische Aufnahme zu erzeugen erfordert eine Reihe von Entscheidungen bezüglich der Parametrierung der Messapparatur. Im Allgemeinen hängen die Parameter von der Information, die gewonnen werden soll, ab und sogar von dem Gegenstand der untersucht werden soll. Bezogen auf die industrielle CT spricht man von einer *Prüfaufgabe*, die es zu lösen gilt. Dieses Kapitel listet alle nötigen CT-Parameter. Daraus lässt sich die grundlegende Aufgabenstellung für diese Arbeit ableiten. Darüber hinaus wird eine Definition für ein optimales Tomogramm gegeben sowie Beispiele für konkrete Prüfaufgaben mit Optimierungsbedarf.

3.1. Definition des Aufnahmeplanungsproblems

3.1.1. Optimales Tomogramm

Ziel einer CT-Aufnahme ist es die Röntgenschwächung eines Prüfobjektes orts aufgelöst zu bestimmen. Im Folgenden wird dies präzisiert und dazu verwendet, ein *fehlerfreies* oder *optimales* Tomogramm zu definieren.

Die Messgröße der CT ist der lineare Schwächungskoeffizient μ . Dieser wird in allen Raumabschnitten $V_i(\mathbf{p}_i)$ des Prüfraumes $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^3$ aus den gemessenen Röntgentransmissionen eines Objektes berechnet. Der Prüfraum einer CT-Anlage ist in Kapitel 2.1.6 definiert. Man wählt typischerweise würfelförmige V_i , die sogenannten Voxel²⁶. Die Voxel füllen \mathcal{P} dicht aus. Die Koordinaten $\mathbf{p}_i = (x, y, z) \in \mathcal{P}$ sind die Mittelpunkte der Voxel. Die Punkte an dieser Koordinate werden mit p_i bezeichnet.

Ein Voxel sei mindestens so groß gewählt, dass man von einer makroskopischen Größe μ ausgehen kann. Die Voxelkantenlänge ist also die Abtastauflösung mit der $\mu(x, y, z)$ bestimmt wird. $\mu(x, y, z)$ ist also eine abschnittsweise zu bestimmende Funktion.

Man nennt $\mu(x, y, z)$ ein *Tomogramm* oder *CT-Bild*. Dementsprechend ist $\mu(x, y)|_{z=const.}$ eine *Schicht* (Schnittbild) aus dem Tomogramm, entsprechendes gilt für die beiden übrigen Dimensionen. Um Sprachlich zu vereinfachen, wird der Terminus *Wert eines Voxels* für

²⁶ engl. Kunstwort für Volume Element

den im Voxelvolumen konstanten Skalar $\mu = \mu_i = \mu(\mathbf{p}_i)$ verwendet (i wenn es über eine Indizierung adressiert wird bzw. \mathbf{p}_i wenn es über seinen Mittelpunkt identifiziert wird). In Fällen, in denen es nicht explizit darauf ankommt, dass der Wert des Voxels der lineare Schwächungskoeffizient ist, wird auch das Formelsymbol v verwendet (man denke sich dann eine Größe die durch lineare Abbildung in einen „echten“ Schwächungskoeffizienten überführt werden kann).

Um zu einer Definition für optimales Tomogramm zu gelangen ist es nötig noch genauer zu beschreiben, wie der lineare Schwächungskoeffizient zu verstehen ist. Wie in Kap. 2.1.2 beschrieben, ist $\mu = \mu(E)$ energieabhängig. Ist eine polychromatische CT-Messung durchgeführt, so gibt es für jede Energie ein Tomogramm. Die Energie bezüglich derer ein Tomogramm berechnet wurde heisst *Referenzenergie*. Gewöhnlicherweise werden allerdings keine Energie-selektierten Rekonstruktionen durchgeführt, denn die spektrale Information ist bei den typischen energieintegrierenden Detektoren nicht zugänglich und kann auch nicht ohne Zusatzinformation in einem Rekonstruktionsverfahren wieder hergestellt werden. Siehe Ref. [27] für einen Ansatz dazu. Um sprachlich etwas zu vereinfachen wird in dieser Arbeit von *dem Tomogramm* eines Objektes gesprochen, auch wenn es sich um eine polychromatische Messung gehandelt hat, unabhängig davon ob bei einer Referenzenergie rekonstruiert wurde oder ob die Energieabhängigkeit vernachlässigt wurde. Letzteres ist der Standardfall. Dies führt gerade zu den (cupping) Artefakten die es zu minimieren gilt. An dieser Stelle tritt noch ein technischer Aspekt auf, welcher wichtig bei der Betrachtung von Rekonstruktionsergebnissen ist. Tomogramme werden häufig nicht als ortsabhängige Schwächungskoeffizienten in der Dimension [Länge⁻¹] gespeichert und betrachtet. Das würde bedeuten, dass die Tomogramme in einem Fließkommazahl-Datentyp gespeichert werden (konventionell in cm⁻¹). Stattdessen wird der Wertebereich eines Rekonstruktionsergebnisses meist in vorzeichenlosen Ganzzahlen gespeichert und dargestellt. Dazu wird eine lineare Funktion definiert, die dem Wertebereich des Rekonstruktionsergebnisses, also den linearen Schwächungskoeffizienten bei einer Referenzenergie, einen Wert aus dem Wertebereich des Zieldatentyps zuweist, beispielsweise vorzeichenlose 16 Bit Ganzzahlen. Wenn nicht weiter von Belang wird in dieser Arbeit allgemein von *Voxelwerten* gesprochen auch dann, wenn die beschriebene lineare Funktion benötigt wird, um auf lineare Schwächungskoeffizienten zu schließen. Die graphische Darstellung eines Tomogramms geschieht, indem man die Schichten einzeln betrachtet. Man betrachtet also eine Serie von 2D-Bildern. Die Voxelwerte werden dann durch verschieden starke Schwärzung dargestellt,

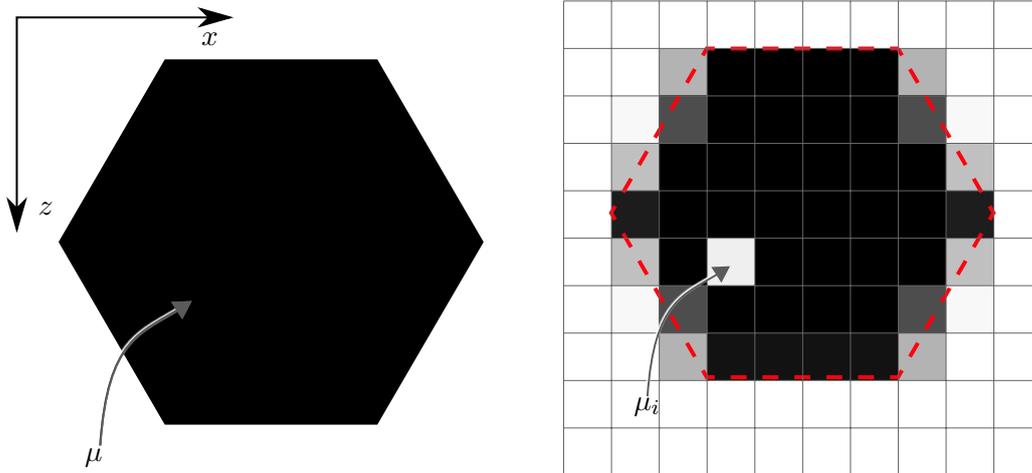


Abb. 3.1.: Veranschaulichung der Definition eines Tomogramms. μ bezeichnet den Schwächungskoeffizienten des Objektes an der markierten Stelle im linken Bild. Nachdem ein homogenes Objekt gezeigt wird, gilt μ für jeden Ort im Objekt. Dies ist, im Beispiel, durch die vollständige Schwärzung dargestellt. Im rechten Bild ist eine Darstellung des Objektes auf einem Voxelgitter, die rote Linie markiert die ursprüngliche Oberfläche des Objektes. Das markierte Voxel ist artefaktbehaftet, μ_i ist also fehlerhaft. Alle übrigen Voxel im Beispiel sind fehlerfrei. Die verschiedenen starke Schwärzung entlang der Oberfläche drückt die volumenanteilig berechneten mittleren Voxelwerte aus. Die Wahl des Koordinatensystems ist beliebig. Hier und im Verlauf dieser Arbeit werden die Achsen so gelegt, dass die z -Achse im Tomogramm mit der Vergrößerungsachse der CT-Anlage zusammenfällt. Siehe dazu auch Abb. 2.5.

deshalb spricht man synonym vom *Grauwert* eines Voxels²⁷.

Ein **optimales Tomogramm** ist dann erreicht, wenn bei gegebener Abtastauflösung alle $\mu_i(\mathbf{p}_i)$ fehlerfrei sind. Mögliche Fehler im Tomogramm nennt man Artefakte beziehungsweise Rauschen, wenn es sich um stochastische Schwankungen handelt.

Diese Definition ist bewusst als ideal gewählt, mit gewöhnlicher Messtechnik ist dieses Optimum insbesondere bezüglich des Rauschens nicht erreichbar. Insofern stellt die Definition eine sichere obere Schranke für die Optimalität dar. Dieser Umstand wird für die Definition eines Gütemaßes in Kap. 6.1 wieder aufgegriffen.

²⁷ Der Raum der darstellbaren bzw. wahrnehmbaren Schwärzungsgrade ist typischerweise deutlich kleiner als der Raum der Voxelwerte, die in einem Tomogramm vorkommen. Deshalb beschränkt man den Raum der vorkommenden Voxelwerte auf verschiedene Teilintervalle und betrachtet jeweils nur diese. Es gibt dann verschiedene Visualisierungen desselben Tomogramms. Man nennt diese Beschränkung auf visualisierbare Schwärzungsgrade *fenstern*, weiterführendes dazu findet sich in Ref. [15].

Die genannte Definition eines Tomogramms und des Begriffes Artefakt ist in Abb. 3.1 dargestellt. Die Abbildung zeigt auch die Lage eines Objektes relativ zum Voxelgitter. Grenzflächen zwischen Objekten bzw. zwischen Objekt und Umgebung liegen im Allgemeinen so, dass eine Menge von Voxeln den Übergang verschiedener Materialien (z.B. Aluminium zu Luft) zusammenfasst. Auch dann soll der Wert des Voxels der mittlere Schwächungskoeffizient μ im entsprechenden Raumabschnitt sein. Das gewichtete Mittel der Materialien mit den Volumenanteilen V_n^{mat} , die in das Volumen V_i des Voxels i fallen, ergibt den Wert des Voxels. Der Wert μ_i eines Voxels an einer Grenzfläche aus n Materialien ist im Idealfall eines artefakt- und rauschfreien Tomogramms demnach

$$\mu(\mathbf{p}_i) = \mu_i = \frac{1}{V_i} \sum_n V_{n,i}^{\text{mat}} \mu_{n,i} \quad n \in 1, 2, \dots \quad .$$

Es sei an dieser Stelle bemerkt, dass es gerade im interdisziplinär geprägten Fachgebiet der zerstörungsfreien Prüfverfahren erheblich abweichende Definitionen von einem optimalen Tomogramm gibt. Das gilt beispielsweise für die (dimensionelle) Messtechnik, bei der eine korrekte Oberfläche von Bedeutung ist (siehe beispielsweise die Ref. [50–52, 64]). Dann genügt es, wenn alle Materialübergänge, z.B. Luft zu Objekt, korrekt abgebildet sind. Ein cupping-Artefakt ist tolerierbar. Ein weiteres Beispiel ist eine Gussbauteil-Untersuchung, bei der Ungängen, z.B. Lunker im Volumen des Objektes detektiert werden sollen. Dabei kann die Fragestellung auch noch weiter eingeschränkt sein, sodass nur in einem Abschnitt des Objektes Ungängen detektiert werden müssen. Im letztgenannten Fall ist ein hochauflösendes, verzerrungsfreies Tomogramm demnach nur in einem sehr kleinen Bereich des Prüfobjektes nötig.

3.1.2. CT-Parametersatz

Bevor eine CT-Messung gestartet werden kann, muss eine Reihe von Entscheidungen bzgl. der Parametrierung der Messapparatur getroffen werden. Diese Menge an Parametern ist spezifisch für die zu erfüllende Prüfaufgabe und damit insbesondere vom Prüfobjekt abhängig.

Ziel der *Aufnahmeplanung* ist es die Menge an Parametern so zu wählen, dass das Rekonstruktionsergebnis möglichst frei von Artefakten ist, wie sie in Kap. 3.1.1 definiert wurden. Die Aufgabe dieses Optimum zu finden heißt *Aufnahmeplanungsproblem*.

In Abb. 3.2 sind die CT-Parameter zusammengestellt. Für diese Zusammenstellung sei bereits eine konkrete CT-Messapparatur gewählt, das heißt, dass bereits ein (Flachbild-)

Detektor und dessen 2D-Ortsauflösung feststeht. Ebenso sei die Röntgenquelle festgelegt. Es sei insbesondere bekannt, wie sich der Brennfleck als Funktion der Röhrenleistung (bzw. als Funktion des Flusses) verhält.

Es ergeben sich zehn Parameter, die für eine CT-Aufnahme gewählt werden müssen. Wobei die Parameter mit Trajektorienbezug je nach Geometriewahl noch unterteilt sind. Im Fall beliebiger Geometrie sind jeweils sechs Koordinaten für Detektor und Quelle zu wählen, Positionsvektor und Richtungsvektor²⁸. Im Fall einer Standard Kreistrajektorie mit äquidistanter Winkelabtastung, sind drei Koordinaten für die Objektausrichtung, sowie Projektionszahl, Fokus-zu-Objekt Abstand und Detektor-zu-Objekt Abstand nötig. Wenn die Vergrößerung festgelegt ist, benötigt man nur einen der beiden letztgenannten Abstände um die Parametrierung vollständig zu beschreiben.

Um ein Tomogramm zu berechnen, müssen, nach Aufnahme der Projektionen, bildverarbeitende Schritte zur Korrektur von Detektornichtlinearitäten und Strahlungsinhomogenitäten angewandt und im Anschluss eine Rekonstruktion durchgeführt werden. Diese beiden Schritte erfordern erneut die Wahl einiger Parameter. All diese Bild- und Rekonstruktionsparameter²⁹ sind nicht Teil der Aufnahmeplanung. Das liegt insbesondere daran, dass derselbe Satz von Projektionen mehrfach mit verschiedenen Bild- und Rekonstruktionsparametern verarbeitet werden kann. Insofern ist die Wahl einer geeigneten Signalverarbeitungskette ein eigenes Optimierungsproblem, welches nicht Gegenstand dieser Arbeit ist³⁰.

Die Parameter aus Abb. 3.2 haben untereinander Abhängigkeiten. Diese Abhängigkeiten sind vielfältig und der Grund dafür, dass eine Aufnahmeplanung für die CT ein hochgradig nichttriviales Problem ist.

Die Abhängigkeiten entstehen sowohl durch technische Einschränkungen, als auch durch die zugrunde liegende Röntgenphysik. Ich wähle im Verlauf dieser Arbeit einen Brute-Force Ansatz zur Parameteroptimierung. Damit werden die Abhängigkeiten der Parameter, sofern sie überhaupt bekannt sind, zunächst nicht zur Aufnahmeplanung ausgenutzt. Im Gegenzug kann ich durch meinen Ansatz solche Abhängigkeiten untersuchen. Um die Komplexität des Aufnahmeplanungsproblems zu verdeutlichen, werden die Abhängigkeiten hier aufgezählt:

Rauschen Die stochastischen Fehler in der Intensitätsmessung, welche sich in nichttrivialer Weise in das Tomogramm fortpflanzen, haben ihren Ursprung in allen den Röntgenfluss betreffenden Parametern sowie der Integrationszeit. Das sind Quell-

²⁸ Das Objekt soll, konventionsgemäß, um den Koordinatenursprung positioniert sein.

²⁹ Inklusive der Wahl eines Rekonstruktionsverfahrens.

³⁰ Die Bildbewertungsmaße aus Kapitel 6 könnten hierbei dennoch von Nutzen sein.

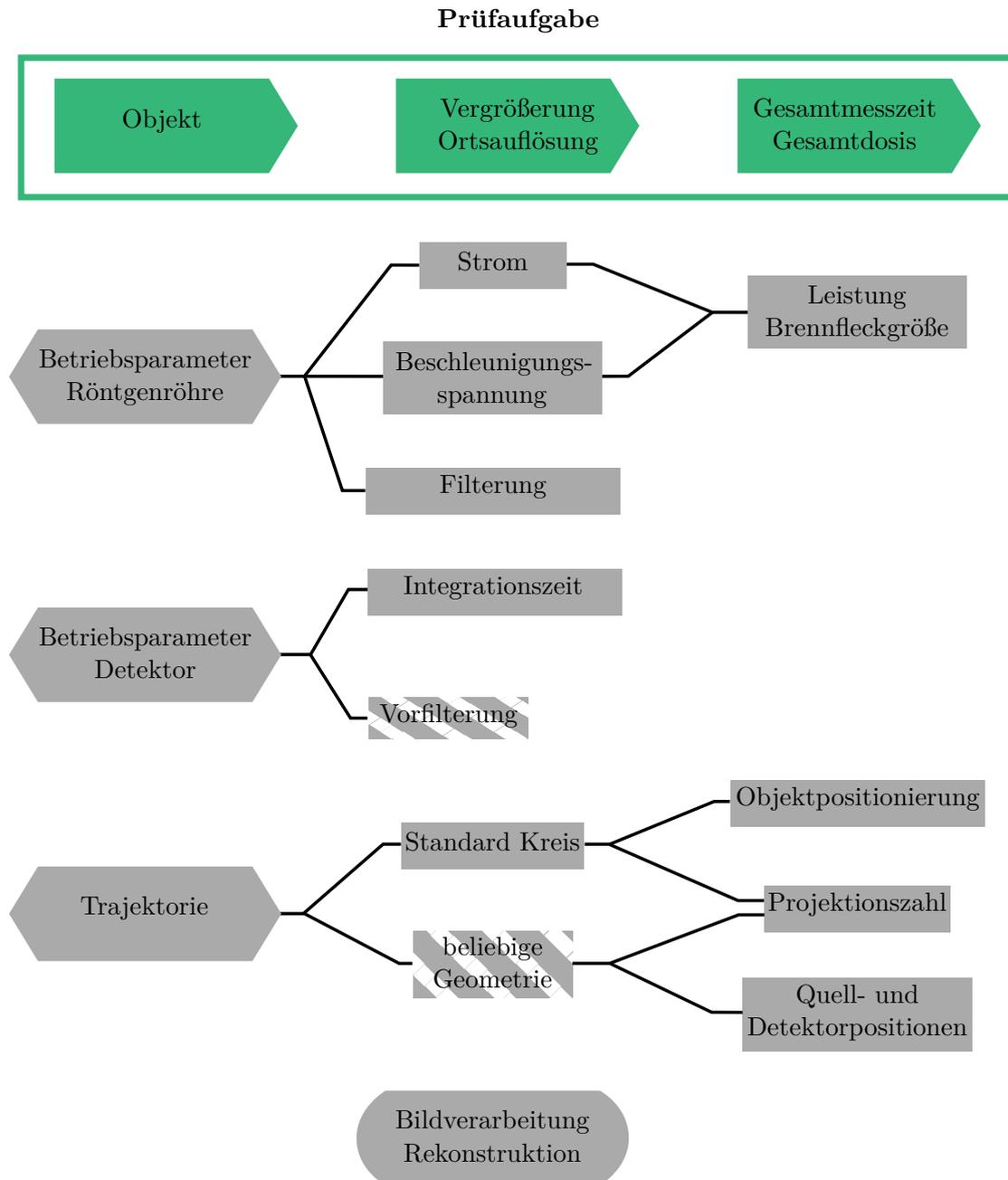


Abb. 3.2.: Übersicht und Gruppierung der CT-Parameter. Ausgehend von einer Prüfaufgabe, welche durch das Prüfobjekt und die zugrundeliegende Fragestellung definiert wird, muss für jeden hier in Rechtecken dargestellten Parameter eine Entscheidung getroffen werden, bevor eine CT-Messung durchgeführt wird. Die schraffiert hinterlegten Parameter stehen nicht im Fokus dieser Arbeit. Bildverarbeitung und Rekonstruktion sind zwar notwendig um aus gemessenen Radiographien ein Tomogramm zu berechnen, es sind jedoch keine (Mess-)Parameter.

strom und -spannung, Integrationszeit, quell- und detektorseitige Filterung. Ist die Gesamtmesszeit begrenzt, so spielt wegen der Abhängigkeit zur Integrationszeit auch die Projektionszahl und damit ein Trajektorienparameter eine Rolle.

Messgeometrie Sei Objektausdehnung und Ortsauflösung gegeben, dann koppelt, wegen der unveränderlichen Größe der Detektorpixel, die Größe des Brennflecks an die Parameter der Trajektorie. Das liegt daran, dass die Größe der Brennfleck-induzierten Verschmierung der Radiographie ebenfalls eine Funktion der geometrischen Vergrößerung ist.

Ein besonders ausgedehntes Bauteil, welches nicht komplett in den Prüfraum der CT-Messapparatur passt, benötigt besondere Trajektorien (z.B. eine Messfelderweiterung mittels seitlichem Detektorversatz).

Spektrum Um ein Röntgenquellspektrum zu wählen stehen die Parameter Quellfilter und Beschleunigungsspannung zur Verfügung. Diese Entscheidung ist in besonderem Maß vom Objekt bzw. von dessen Form und Material abhängig. Die Objektpositionierung beeinflusst die Spektrenwahl dann, wenn stark absorbierende Durchstrahlungslängen nicht vermieden werden können oder wenn das Objekt sehr nah am Detektor positioniert werden muss, wenn es also vermehrt zu Artefakten durch Streustrahlung kommen kann.

Das Aufnahmeplanungsproblem ist also dadurch gegeben, dass zehn Parameter zu wählen sind. Besonders komplex wird die Fragestellung dadurch, dass die Parameter teilweise voneinander abhängig sind. Ob bestimmte Parameter bzw. Parameterkombinationen realisierbar sind, ist abhängig von den Komponenten eines CT-Systems (technische Einschränkungen). Zu diesen Abhängigkeiten treten noch technische Einschränkungen der CT-Messapparaturen hinzu, die hier nicht betrachtet werden³¹. Die obenstehende Aufzählung gruppiert diese Abhängigkeiten nach den physikalischen Zusammenhängen, welche die Parameterabhängigkeiten erzeugen. Man kann im Allgemeinen nicht davon ausgehen, dass die Abhängigkeiten, sofern sie bekannt sind, den Suchraum des Aufnahmeplanungsproblems wesentlich verkleinern.

Es sei besonders darauf hingewiesen, dass das Objekt und damit die Aufgabenstellung einen Teil der Parameterabhängigkeiten beeinflusst. Diese Tatsache ist der Grund für die objektabhängige Bildqualität der CT.

Daraus folgt, dass eine Aufnahmeplanung ebenfalls vom Objekt abhängen muss. Ein Verfahren zur Aufnahmeplanung kann deshalb nicht ohne eine Objektbeschreibung und

³¹ Das sind beispielsweise die beschränkte Dynamik der Detektoren, nicht austauschbare Filter an der Röntgenquelle und mechanische Grenzen des Manipulationssystems.

nicht ohne die Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen Röntgenstrahlen und Objekt auskommen. Deshalb ist in dieser Arbeit ein Schwerpunkt auf der Simulation von Röntgenbildgebung gesetzt, welche genau diesen Zusammenhängen Rechnung trägt.

3.2. Stand der Technik: Verfahren zur Aufnahmeplanung

Die wohl wichtigste und gleichzeitig fast völlig undokumentierte Methode der Aufnahmeplanung ist der sogenannte *erfahrene Bediener*. Gemeint sind damit Personen, die auf ihnen vertrauten CT-Systemen dank ihres gesammelten Wissens bzw. ihrer Erfahrung die nötigen Parametersätze finden können oder zumindest keine schlechten wählen.

Nachdem die industrielle CT seit etwa drei Jahrzehnten wachsende Anwendung findet, gibt es auch Bedienschulungen und entsprechende Literatur [1, 39], sowie in Industrienormen [30, 56]. Dort findet man grundlegende Handlungsempfehlungen für das Gelingen einer CT-Aufnahme.

Das sind (teilweise in leichter Abwandlung):

10 %-Regel zur Spektrenwahl Die Norm EN 16016-2:2011 [30] fordert, zur Optimierung von CT-Aufnahmen ein Röntgenspektrum so zu wählen, dass eine Transmission zwischen 10 % und 20 % erreicht wird. Diese Transmission soll dabei auf der größten durchstrahlten Länge erreicht werden³². Von dieser Regel kann man sich überzeugen, indem man das maximale Kontrast-zu-Rausch-Verhältnis (CNR) einer Radiographie berechnet (dazu wird die Photonenstatistik verwendet) und davon ausgeht, dass optimale Radiographien zu optimalen CT-Aufnahmen führen. In den Ref. [44, 107] ist dies ausgeführt.

Bauteilausrichtung nach kleinen durchstrahlten Weglängen Um Artefakte durch Strahlauvhärtung zu mindern oder überhaupt eine messbare Transmission zu gewährleisten, gibt es die allgemeine Empfehlung ein Objekt so auszurichten, dass die durchstrahlten Längen, also die Strecken die der Röntgenstrahl im Objekt zurücklegt, auf der gesamten Trajektorie möglichst klein sind. Ein Ansatz, eine auf diese Art optimierte Positionierung zu finden ist, diejenige Drehachse als Rotationsachse der Tomographie-Aufnahme zu wählen bei der das Objekt das kleinste Rotationsträgheitsmoment besitzt. Das lässt sich, beispielsweise anhand von CAD-Daten (computer-aided de-

³² Die Norm kennt sehr wohl auch Multimaterialobjekte, nennt sie aber in diesem Zusammenhang nicht klar. Im Multimaterialfall sollte man besser über die Weglänge mit der größten Strahlsumme sprechen.

sign), über eine Hauptachsentransformation berechnen. Ein solcher Ansatz ist bei S. Reisinger [81] untersucht worden.

Strom- und Belichtungszeitwahl Setzt man voraus, dass die zur CT-Aufnahme verwendete Photonenzahl nur von Quellstrom und Integrationszeit abhängt und das Quantenrauschen ein sehr wichtiger Einflussfaktor auf die Güte einer CT-Aufnahme ist, folgert man die allgemeine Empfehlung, dass das Rauschen möglichst klein gehalten werden muss. Gibt man das Signal-zu-Rausch-Verhältnis (SNR) im ungeschwächten Bild vor, legt man damit das Produkt aus Quellstrom und Detektorbelichtungszeit fest. Ob eine bestimmte Integrationszeit oder ein bestimmter Quellstrom gewählt werden kann, hängt davon ab, ob die Komponenten eine entsprechende Parameterwahl anbieten. Durch große Röhrenleistung lassen sich dementsprechend kurze Integrationszeiten und damit kurze Messdauern erreichen. Die Röhrenleistung steht allerdings im Kompromiss zur Brennfleckgröße, sodass im ungünstigen Fall — wenn hohe Ortsauflösung gefordert ist — die Röhrenleistung im Kompromiss zur Ortsauflösung steht. Zwischen der Brennfleckgröße und der Röhrenleistung besteht ein linearer Zusammenhang [1].

Wahl der Projektionszahl für Standard-Kreis-Trajektorie Für eine CT-Messung mit einer äquidistanten Abtastung des Vollkreises schreibt DIN EN 16016-2:2011(D) die Projektionszahl

$$\# = \frac{\pi}{2}N \quad (3.1)$$

vor. Mit N als Zahl der Voxel, über die das Messobjekt in einer Schicht maximal ausgedehnt ist. Es finden sich in der Literatur auch noch ähnliche Angaben mit $\frac{\pi}{4}$ oder gar 1 als Vorfaktor. In aller Regel werden diese Empfehlungen auf Basis des Fourier-Scheiben-Theorems bzw. des Nyquist-Shannon-Abtasttheorems entwickelt. Herleitungen finden sich bei in [15, 58].

Optimierung der Trajektorie

Die Frage nach der optimalen Bauteilausrichtung sowie die Frage nach der Zahl der Projektionen sind letztlich Spezialfälle der Frage nach der optimalen Aufnahmegeometrie. Diese Frage ist von besonderem Interesse, nicht nur im Bezug auf möglicherweise verbesserte Abbildungsqualität. In der Medizintechnik ist oft die Frage der Dosisreduzierung durch verminderte Projektionszahl wichtig, in der industriellen CT tritt an dieselbe Stelle eine Verkürzung der Messzeit bzw. eine Reduktion der anfallenden Datenmenge. Nachdem man unter dem Begriff Aufnahmegeometrie die Unterscheidung zwischen Parallelstrahl, Kegelstrahl etc. versteht will ich von der Wahl der Trajektorie sprechen. In Ref. [34] sind die

bisher publizierten Bemühungen um objektbezogene Trajektorien zusammengestellt. Sowohl für den Fall von Kreistrajektorien, als auch für Trajektorien mit beliebiger Geometrie finden Fischer et al. Ansätze, die sie im Wesentlichen in zwei Kategorien einordnen. Solche Verfahren, die Vorwissen über das Objekt ausnutzen (z.B. aus computer-aided design (CAD) in einer Simulation) und solche Verfahren, die dynamisch Entscheidungen treffen. Letztgenannte Verfahren können also auch nebenläufig zu einem Messprozess dessen Fortgang beeinflussen. Das Verfahren zur Optimierung, welches im Verlauf dieser Arbeit vorgestellt wird, ist der ersten Kategorie zuzuordnen, wenn es zur Optimierung der Trajektorie eingesetzt wird.

3.3. Eigener Ansatz: simulationsgestützte Optimierung

Im Rahmen dieser Arbeit möchte ich ein neuartiges Konzept zur automatisierten Lösung des Aufnahmeplanungsproblems vorstellen. Gemeinsam mit dem Konzept werde ich, als zentralen Bestandteil der Arbeit, die nötigen Werkzeuge und Verfahren zur Verfügung stellen, sowie deren Qualität untersuchen und beurteilen.

In Kap. 1.2 ist die große Anwendungsbandbreite für Computertomographie im industriellen Umfeld dargestellt. Aus dieser Bandbreite leitet sich die Notwendigkeit für eine automatisierte Aufnahmeplanung ab. Unter *automatisierter Aufnahmeplanung* verstehe ich eine Methode, die in der Lage ist, die experimentellen Parameter für eine CT-Aufnahme so festzulegen, dass ein gegebenes Objekt optimal untersucht werden kann.

Die Aufnahmeplanungsmethode dieser Arbeit lautet:

Mittels hinreichend realistischer und schneller Computersimulationen lässt sich der Raum der CT-Parameter abtasten. Gelingt es zusätzlich ein allgemeingültiges Gütemaß für CT-Aufnahmen zu definieren, kann ein Optimum bestimmt werden.

Diese Methode hat drei Voraussetzungen. Im Folgenden werden die Voraussetzungen erläutert, aber auch beschrieben, was nicht Bestandteil der Aufnahmeplanung ist. Letzteres ergibt die inhaltliche Abgrenzung dieser Arbeit.

Erstens: Eine schnelle Computersimulation. *Schnell* sei dadurch präzisiert, dass die Lösung der zugrunde liegenden Fragestellung in sinnvollem Verhältnis zu der Zeit steht, die für die tatsächliche Messung und Bewertung der Ergebnisse benötigt wird bzw. bei Methodik „Versuch und Irrtum“ aufgebracht werden müsste³³. Konkret scheint eine Pla-

³³ Mit einem industriellen Hintergrund ließe sich hier auch noch leicht mittels Kostenersparnissen argumentieren. Ich sehe das an dieser Stelle als unnötig an.

nungsdauer im Bereich einiger Stunden bis zu wenigen Tagen als annehmbar³⁴. Bei oftmals wiederholten Messungen an ähnlichen Objekten, der Fall tritt zum Beispiel bei produktionsintegrierter Prüfung auf, lohnt sich der Aufwand für eine Optimierung entsprechend stärker. Die maximalen Planungsdauern bedeuten, dass die Simulation vieler vollständiger CT-Aufnahmen, sowie deren automatischer Bewertung innerhalb des entsprechenden Zeitraumes möglich sein muss. Dieses Kriterium schließt MC-Methoden zur Röntgensimulation aus, selbst dann, wenn auf sehr leistungsfähigen Computern gerechnet werden kann.

Zweitens: Eine realistische Simulation. Wie in Kap. 2.4 beschrieben, ist das Ergebnis einer CT-Simulation eine Menge von (simulierten) Radiographien. Eine CT-Simulation wird genau dann besonders realistisch, wenn man in der Lage ist, Radiographien realistisch zu simulieren. Das an Messung oder Simulation angeschlossene Rekonstruktionsverfahren, welches ein CT-Bild erzeugt, sei fest gewählt und deterministisch. Rekonstruktionsverfahren bzw. deren Parameteroptimierung sind nicht Gegenstand der Aufnahmeplanung. Sie sind zwar ein Parameter des CT-Messprozesses (siehe Abb. 3.2), allerdings werde ich den Fokus auf die experimentellen Parameter legen³⁵. Für diese Aufgabe muss die Röntgenphysik sowohl bezüglich Erzeugung und Detektion, als auch bezüglich der Wechselwirkung mit dem zu untersuchenden Objekt berücksichtigt werden.

Die Extinktion kann im analytischen Simulationsmodell leicht berechnet werden, sobald die Zusammensetzung und Form des Objektes hinreichend gut bekannt ist (siehe Gleichung 2.33). Auf diesen Teil werde ich in dieser Arbeit, abgesehen von Kap. 2.4, deshalb nicht weiter eingehen. Die Streuung der Röntgenstrahlung ist im analytischen Simulationsmodell deutlich schwieriger zu berücksichtigen. Derzeit gibt es keinen Ansatz, bei dem die Streuung in einem rein analytischen Simulationsmodell über die erste Ordnung hinaus berücksichtigt wird. In Kap. 5 wird ein solches Modell entwickelt und untersucht.

Die übrigen Stellen, an denen die Röntgenphysik berücksichtigt werden muss, sind die Röntgenquelle bzw. die Entstehung des Spektrums $S(E)$ und der Detektor bzw. dessen spektrale Effizienz $R(E)$. Im analytischen Simulationsmodell genügt es das Produkt aus Quellspektrum $S(E)$ und spektraler Effizienz $R(E)$ zu kennen, da diese Beiträge im analytischen Modell ausschließlich im Produkt auftreten. Mit dem *Spektrenschätzproblem (SSP)* (definiert in Ref. [93]) und dem Lösungsansatz von Sidky et al. in Ref. [91] gibt es eine Methode die es erlaubt, eben dieses Produkt experimentell zu bestimmen. Damit ist es

³⁴ Diese Zeitvorstellung ist rein subjektiv und Meinung des Autors. Man nehme die Dauer der Versandwege von einem Auftraggeber zu einem Messdienstleister als Zeitspanne zur Aufnahmeplanung.

³⁵ Der Ansatz zur Optimierung, welcher Gegenstand der Arbeit ist, kann auch zur Untersuchung von Rekonstruktionsalgorithmen verwendet werden. Allerdings muss darauf geachtet werden, dass gerade für iterative bzw. stochastische Verfahren teils spezielle Annahmen gemacht werden (siehe: diskrete Tomographie), welche die Aussagekraft des weiter unten diskutierten Gütemaßes verändert. Dadurch kann die Vergleichbarkeit der Rekonstruktionsergebnisse der verschiedenen Algorithmen verloren gehen.

möglich das analytische Simulationsmodell zu kalibrieren. In Kap. 4 wird diese Methode angewandt und auf ihre Güte hin untersucht. Dazu wird auch untersucht, wie die entsprechenden Experimente zur Anwendung der Methode aufgebaut sein müssen, um hinreichende Ergebnisse zu erzielen. Eine Simulation, die mittels einfacher Transmissionsmessungen auf eine Anlage (spektral) kalibriert werden kann, bietet einen Vorteil gegenüber der herkömmlichen Art und Weise $S(E)$ und $R(E)$ zu bestimmen.

Herkömmlich ist es nötig, die Kette von physikalischen Prozessen von Entstehung der Röntgenstrahlung bis zum Ausgangssignal des Detektors zu simulieren. Diese Kette umfasst Modellierung der Röntgenröhrengometrie, Legierung des Targetmaterials, Form und Material der Austrittsfenster, Beschaffenheit des Elektronenstrahls bis zur digitalen Signalerzeugung im Detektor, welche — je nach Typ — den Szintillationsprozess, das Verhalten von CCD-Chips und die zugehörige Elektronik mit einschließt. Es muss demnach eine Vielzahl an Parametern bekannt sein, um das Produkt $D(E) = S(E) \cdot R(E)$ zu bestimmen. Im Kontext der analytischen Simulationsmethode charakterisiert $D(E)$ ein CT-System bezüglich seiner spektralen Eigenschaften vollständig und wird im Folgenden *Systemspektrum* genannt. Oft sind die nötigen Parameter nur durch eine Schätzung zu erhalten, weil sie entweder von Röntgenröhren- bzw. Detektorherstellern nicht mitgeteilt werden oder auch weil sie durch Alterung der Röhren und Detektoren veränderlich sind. Diese Kette mittels Schätzungen und Annahmen zu modellieren, ist derzeit Bestandteil von analytischen Röntgensimulationen.

Eine wesentliche Idee dieser Arbeit ist es, das Systemspektrum $D(E)$ aus einfachen Kalibrationsmessungen mittels der Spektrenschätzmethode zu bestimmen. Dadurch lässt sich die Notwendigkeit ersetzen, die Komponentencharakteristika zu modellieren. Insofern stellt diese Idee eine Erweiterung der bestehenden analytischen Simulationsmethode dar. Die Kalibration ist zwar nicht notwendig um die Methode anzuwenden, es ergibt sich dadurch jedoch deutlich gesteigerte Relevanz.

Eine Computersimulation der Röntgenbildgebung setzt auch voraus, dass Form und Material des zu untersuchenden Objektes bekannt sind. Man kann annehmen, dass die Objektformen und Materialkompositionen zwar besonders vielfältig sind, jedoch grundsätzlich technische Beschreibungen der Objekte vorliegen. Gemeint sind insbesondere Konstruktionszeichnungen, wie z.B. CAD-Daten inklusive der Materialkenndaten der Konstruktionswerkstoffe³⁶. Gemeint sind auch ungenaue Objektbeschreibungen, wie in Patentschriften enthalten oder „nicht optimierte“ CT-Aufnahmen, aus denen sich genügend Information zur Parametrierung einer CT-Simulation ableiten lässt. Genügend Information zur Durchführung einer Simulation heißt: Form und Material. Selbstverständlich sind die Fehler

³⁶ So wie sie heutzutage im Maschinenbau üblich und erforderlich sind.

eines Objektes, die ja von der Prüfmethode „CT“ gefunden werden sollen, Abweichungen zu einer technischen Beschreibung. Allerdings sind diese Abweichungen klein verglichen mit den Unterschieden zwischen verschiedenen Objekten die zu verschiedenen Prüfaufgaben gehören. Insofern kann durchaus die Aufnahme *eines* Objektes optimiert werden. Geht man davon aus, dass die Abweichungen groß sind, kann man diese auch modellieren und deren Einfluss untersuchen. Solche Untersuchungen sind nicht Bestandteil dieser Arbeit, die vorgestellte Methode bietet jedoch die Möglichkeit dazu. Im Fall ungenauer Objektbeschreibungen, wie beispielsweise Voxeldaten, muss dementsprechend mit geringerer Qualität des Aufnahmeplanungsergebnisses gerechnet werden. Allerdings eröffnet sich die Möglichkeit iterativ, also z.B. durch Messung, Optimierung der Parameter, erneuter Messung usw., zu einem optimalen Ergebnis zu kommen.

Drittens: Ein quantitatives Maß für die Güte einer CT-Aufnahme. Nach der Definition eines optimalen Tomogramms bzw. des Begriffes Artefakt, wie in Kap. 3.1.1, führt ein quantitatives Maß für das Artefaktinventar direkt zu einer Vorschrift zur Optimierung einer CT-Aufnahme. Vorausgesetzt das Maß ist eine streng monotone Funktion des Artefaktinventars einer CT-Aufnahme, so genügt es demnach den CT-Parametersatz zu bestimmen, bei dem das Maß optimal wird. Der entsprechende Parametersatz ist dann das Ergebnis der Aufnahmeplanung.

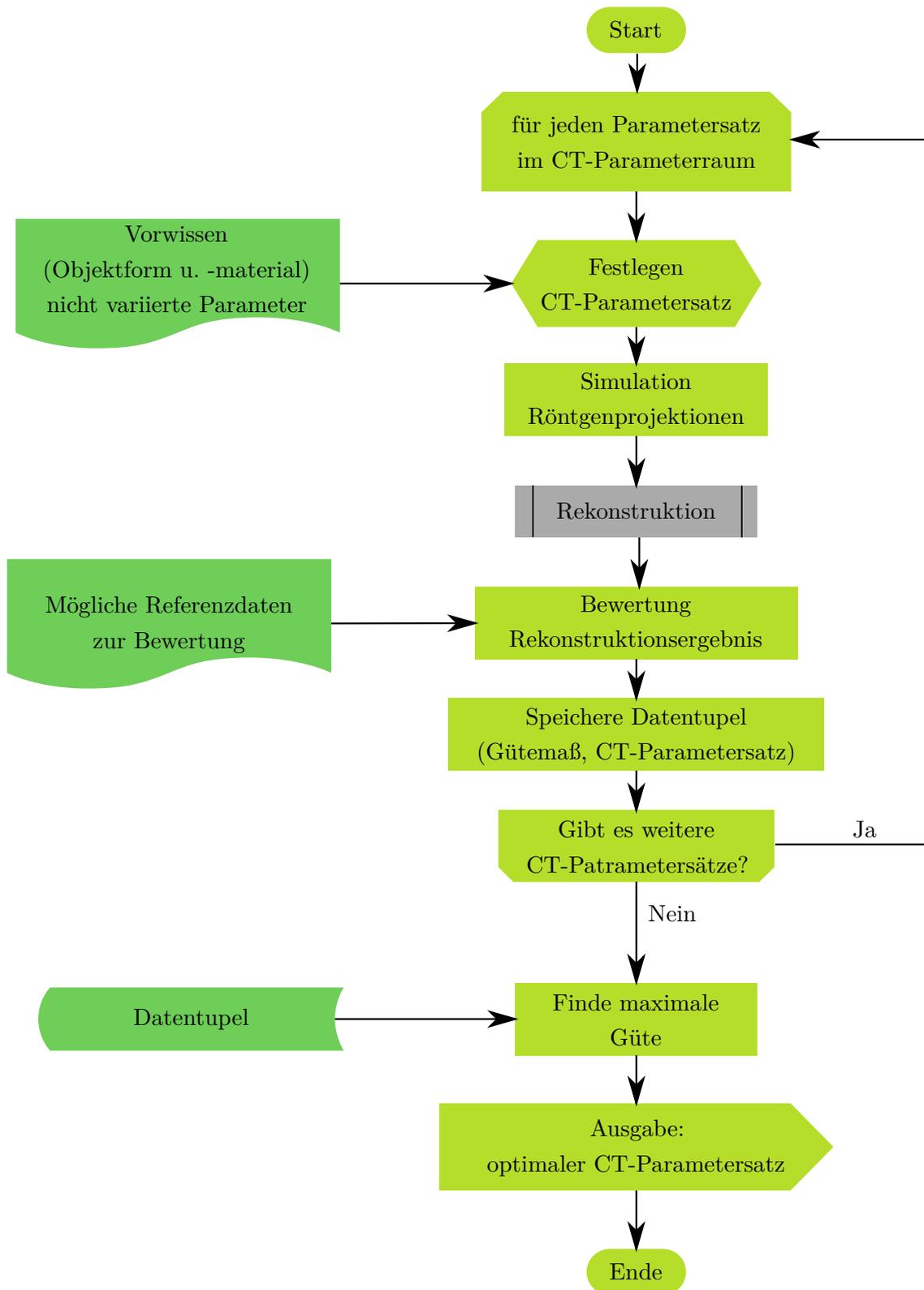
Ohne weitere Einschränkung kann angenommen werden, dass mindestens ein Brute-Force-Ansatz zur Minimierung möglich ist. Ein solches Maß wird in Kap. 6.1 gefunden und diskutiert. Es gibt bei diesem Ansatz jedoch eine Kategorie von Artefaktursachen, die ich ausschließen muss. Eine schlechte Anlagengeometriekalibrierung kann zu Artefakten an Objektkanten und verzerrter Darstellung des Objektes führen. Dabei sind auch falsche Voxelkantenlängen und in Folge dessen fehlerhafte Längenmessungen im Tomogramm möglich. Anders ausgedrückt: Das Koordinatensystem des Voxeldatensatzes kann gegen das Laborkoordinatensystem gestreckt bzw. gestaucht sein. Zwar lässt sich auch dieser Effekt in einer Simulation nachstellen und mittels Gütemaß auch das entsprechende Artefaktinventar quantifizieren, allerdings nur, wenn die entsprechenden geometrischen Abweichungen an der zu simulierenden CT-Anlage bekannt sind. Ist letzteres der Fall, so lässt sich diese Artefaktursache beheben, indem man Maßnahmen im Maschinenbau bzw. im Rekonstruktionsverfahren trifft. Es ist damit nicht Bestandteil einer Aufnahmeplanung. Mit anderen Worten: die Optimierungsmethode geht von einer einwandfrei funktionierenden CT-Messapparatur aus.

Eine Aufnahmeplanung auf Basis von CAD-Daten oder ähnlichem und einer Simulation ist von Hanke et al. patentiert worden. In Ref. [47] findet sich ein Ablaufdiagramm, welches dem in Abb. 3.3 stark ähnelt. In Abbildung 3.3 ist das Vorgehen für diese Optimierungsmethode in einem Flussdiagramm zusammengefasst. Der Ablauf ist hier als Brute-Force-Optimierung

dargestellt. Effizientere Suchstrategien lassen sich sicherlich leicht finden³⁷, diese Arbeit hat jedoch die Zusammenstellung und Bewertung der nötigen Werkzeuge im Fokus.

Abb. 3.3.: Flussdiagramm der Optimierungsmethode. Basierend auf der realistischen analytischen Simulation werden in einem iterativen Verfahren die Parameter der CT-Aufnahme variiert und mittels des Gütemaßes bewertet. Die Optimierung geschieht hier mittels Brute-Force Methode. Die CT-Rekonstruktion ist zwar Bestandteil der Verarbeitungskette, jedoch nicht Teil der zu optimierenden Parameter. Hier kann sowohl ein nicht vergleichendes als auch vergleichendes Maß, welches Referenzdaten benötigt, zum Einsatz kommen.

³⁷ In der Literatur finden sich zu dem Stichwort *design of experiments* Ansätze dazu. Solche Ansätze sind meist generisch und seien hier nur beispielhaft genannt. Unter Kenntnis der Problemstellung „Computertomographie“ mag man noch effizientere Suchstrategien finden. Beispielsweise dadurch, dass nicht alle Parameter stark voneinander abhängen und somit getrennt betrachtet werden können.



3.4. Herausfordernde Beispiele zur Aufnahmeplanung

Im Folgenden werden herausfordernde Beispiele für computertomographische Fragestellungen vorgestellt. In diesem Kapitel sollen die Objekte als Veranschaulichung des Aufnahmeplanungsproblems dienen. In Kapitel 7 werden genau diese Beispiele aufgegriffen, um die Optimierungsmethode dieser Arbeit zu demonstrieren bzw. ihr Verbesserungspotential zu untersuchen.

3.4.1. Ungenügende Positionierung komplex geformter Objekte

Die Positionierung eines, möglicherweise kompliziert geformten Objektes, auf dem Drehteller eines CT-Systems ist in gewissem Umfang gleichbedeutend mit der Frage nach der optimalen Trajektorie. Das gilt genau dann, wenn die mögliche Trajektorie auf eine Standard Kreistrajektorie eingeschränkt ist, wobei die Entscheidung nach der Winkelauflösung oder -verteilung (Standard Kreis oder nicht) ebenfalls zu treffen ist.

Für komplex geformte Objekte stellt die Wahl der optimalen Positionierung auch für den *erfahrenen Bediener* eine Herausforderung dar. Unter einem komplex geformten Objekt sei ein Objekt verstanden, welches sich durch besonders inhomogene Dichteverteilung oder durch viele Einzelteile auszeichnet, die relativ zueinander so orientiert sind, dass nicht leicht erkannt werden kann, in welche Richtung viele parallele Kanten liegen. Auch die Entscheidung, welche Pfade im Objekt besonders große Strahlsummen aufweisen, kann nicht leicht getroffen werden (zum Beispiel weil die entsprechenden Strukturen im inneren verborgen sind). Somit ist es bei einem komplex geformtes Objekt nicht trivial, die oben genannten Regeln zur Positionierung und Parameterfindung umzusetzen. Im Umkehrschluss lohnt es sich für eben solche Objekte ein Verfahren der Aufnahmeplanung anzuwenden.

Das in Abb. 3.4 gezeigte Kornett ist ein Beispiel für ein komplex geformtes Objekt. Die Menge aus teilweise gebogenen Rohrstücken und der Schalltrichter weisen viele nicht parallele Oberflächen auf. Im Bereich der Ventilmechanik gibt es im Gegensatz zu dünnwandigen Rohren massive Metallstücke. Ein einfacher Ansatz das Kornett zu positionieren ist es, dieses auf seinen Schalltrichter zu stellen. Der Normalenvektor des Drehtellers und die Längsachse des Rohres hinter dem Schalltrichter sind dann parallel. In Abb. 3.4 ist ein Ausschnitt eines Tomogramms des Kornettes, welches in dieser Positionierung und mit einer Standard Kreistrajektorie durchgeführt wurde, dargestellt. Im Bereich der Ventilmechanik sind sowohl Artefakte in der Luft als auch ein kleiner Kontrast zwischen Metall und Luft in den Bohrlöchern zu erkennen. Insgesamt ist dieses Teilvolumen auch von cupping-Artefakten durchzogen.

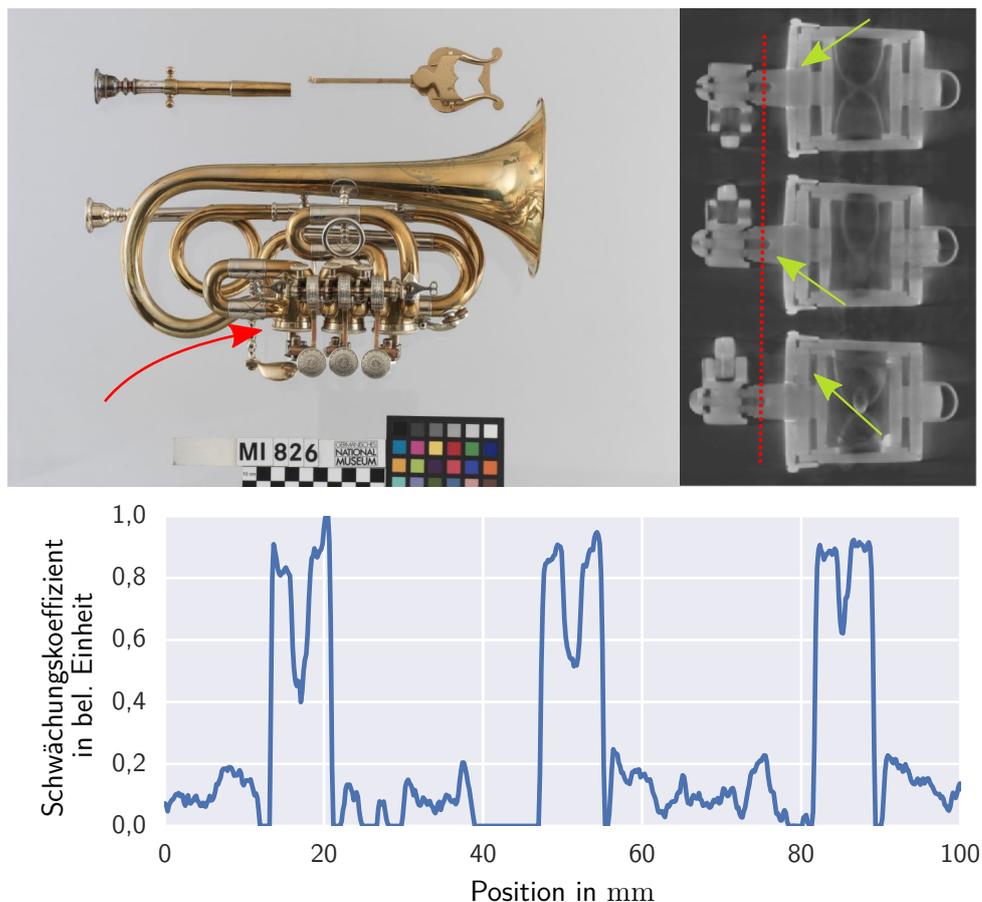


Abb. 3.4.: Photographie (Ref. [66]) und CT-Messung eines Kornettes. Abgebildet ist ein Cervený Kornett, das etwa aus dem Jahre 1910 stammt. Das Instrument befindet sich in der Sammlung des Germanischen Nationalmuseums in Nürnberg (Inventar MI826). Es besteht aus Messing mit einigen kleineren Stahlteilen im Bereich der Ventilmechanik. Zusätzlich gibt es Lötstellen mit Blei oder zinnhaltigem Lot. Für die CT-Messung wurde das Instrument aufrecht auf den Schalltrichter gestellt und in dieser Position auf der Rotationsachse einer CT-Anlage fixiert. Es ist aus dem Tomogramm der Ausschnitt gezeigt, der die Ventile in zentraler Ebene schneidet. Man kann deutlich Artefakte erkennen (teilweise mit den grünen Pfeilen markiert). Das Artefaktinventar umfasst besonders das cupping-Artefakt, zusätzlich sind auch schlierenartige Artefakte im Luftvolumen zu erkennen, sowie schlecht wiedergegebener Material-zu-Luft Kontrast. Das Linienprofil zeigt die Grauwertverteilung entlang der rot gestrichelten Markierung. Entlang der Profillinie werden die Bereiche in der Luft zwischen den Ventilen und die Bohrungen mit dem umgebenden Material für drei Schrauben geschnitten. Die Schraubenlöcher sind dabei unterhalb der Schraube geschnitten, also im Bereich eingeschlossener Luft. Im Linienprofil erkennt man von Null verschiedene CT-Grauwerte für den Bereich zwischen den Ventilen, obwohl dort Luft und damit der Grauwert Null abgebildet sein sollte. Ähnliches gilt für die Schraubenlöcher. Der Material-Luft Kontrast ist nur schwach ausgeprägt.

3.4.2. Artefakte bei Multimaterialobjekten durch mangelhafte Wahl des Röntgenspektrums

Objekte die aus zwei oder mehr Materialien bestehen und bei denen die Schwächungskoeffizienten stark unterschiedlich sind, kommen bei verschiedenen Werkstücken vor und sind deshalb auch ein häufiges Problem bezüglich der Aufnahmeplanung. Solche Objekte sind beispielsweise Stecker für elektrische Verbindungen, meist aus Kunststoff mit regelmäßig angeordneten innen liegenden Metallstiften, oder auch Objekte aus Aluminium mit Inlays aus Stahl teilweise als Hülsen oder für Verschraubungen.

Es sei hier ein Beispielobjekt gewählt, das ebenfalls eine solche große Differenz in den Schwächungskoeffizienten der beteiligten Materialien aufweist. In Abb. 3.5 ist ein Abschnitt einer Klarinette dargestellt. Das Modell ist einer realen Klarinette nachempfunden³⁸. Das Rohr ist aus Holz modelliert, um die Jahresringe darzustellen ist die Dichte des Holzes periodisch verändert. Die Klappen und die dazu gehörende Mechanik ist aus *Neusilber* ausgeführt. Die Zusammensetzung der Materialien ist (Anteile der Elemente in Gewichtsprozent): *Neusilber* ($\rho = 8,40 \text{ g cm}^{-3}$, Cu: 55 %, Ni: 17 %, Zn: 28 %), *Holz* ($\rho = 0,62 \text{ g cm}^{-3}$ bzw. $\rho = 0,40 \text{ g cm}^{-3}$, C: 50 %, N: 1 %, O: 43 %, H: 6 %).

Ähnlich wie bei den oben erwähnten Steckverbindern gibt es in dem Klarinettenphantom zwei Materialien mit stark verschiedenem Röntgenschwächungsverhalten und die beiden Materialien haben nur geringen Abstand zueinander bzw. haben gemeinsame Grenzflächen.

Für eine simulierte Tomographie-Messung ist das Klarinettenphantom im virtuellen CT-System so positioniert worden, dass die Symmetrieachse des Rohres mit der Rotationsachse des Manipulationssystems zusammenfällt. Bei diesem Testfall ist die Fragestellung, welches Röntgenspektrum bzw. welches Aufnahmeverfahren sich dazu eignet das Klarinettenphantom bestmöglich darzustellen. Die Metallstrukturen weisen in Strahlrichtung eine maximale Transmissionslänge von ca. 4 mm auf. In Abb. 3.5 sind zwei simulierte Tomogramme gezeigt, welche unter Verwendung von einem Röntgenspektrum mit Maximalenergie 220 keV und ohne bzw. mit 1 mm Al-Filter erzeugt wurden. Man beobachtet keinen wesentlichen Unterschied zwischen den beiden Tomogrammen, obwohl die Aufhärtung des Röntgenspektrums mittels Filter erfahrungsgemäß zu einer Reduzierung des Artefaktinventars führen sollte. Beide Tomogramme zeigen eine vollständige Auslöschung der Bildinformation in Bereichen, in denen Metall direkt an Holz grenzt, also in Bereichen mit stark unterschiedlichen Schwächungskoeffizienten. Die Kontur des Holzkörpers ist somit nicht korrekt wiedergegeben. Die Außenkonturen der Metallteile sind zwar korrekt dargestellt, allerdings sind starke cupping-Artefakte zu erkennen, der Metallkörper ist also nicht als homogenes Material abgebildet.

³⁸ Die Modellierung dieses Objektes in Scorpius XLab[®] stammt von Dr. R. Wagner, vielen Dank dafür.

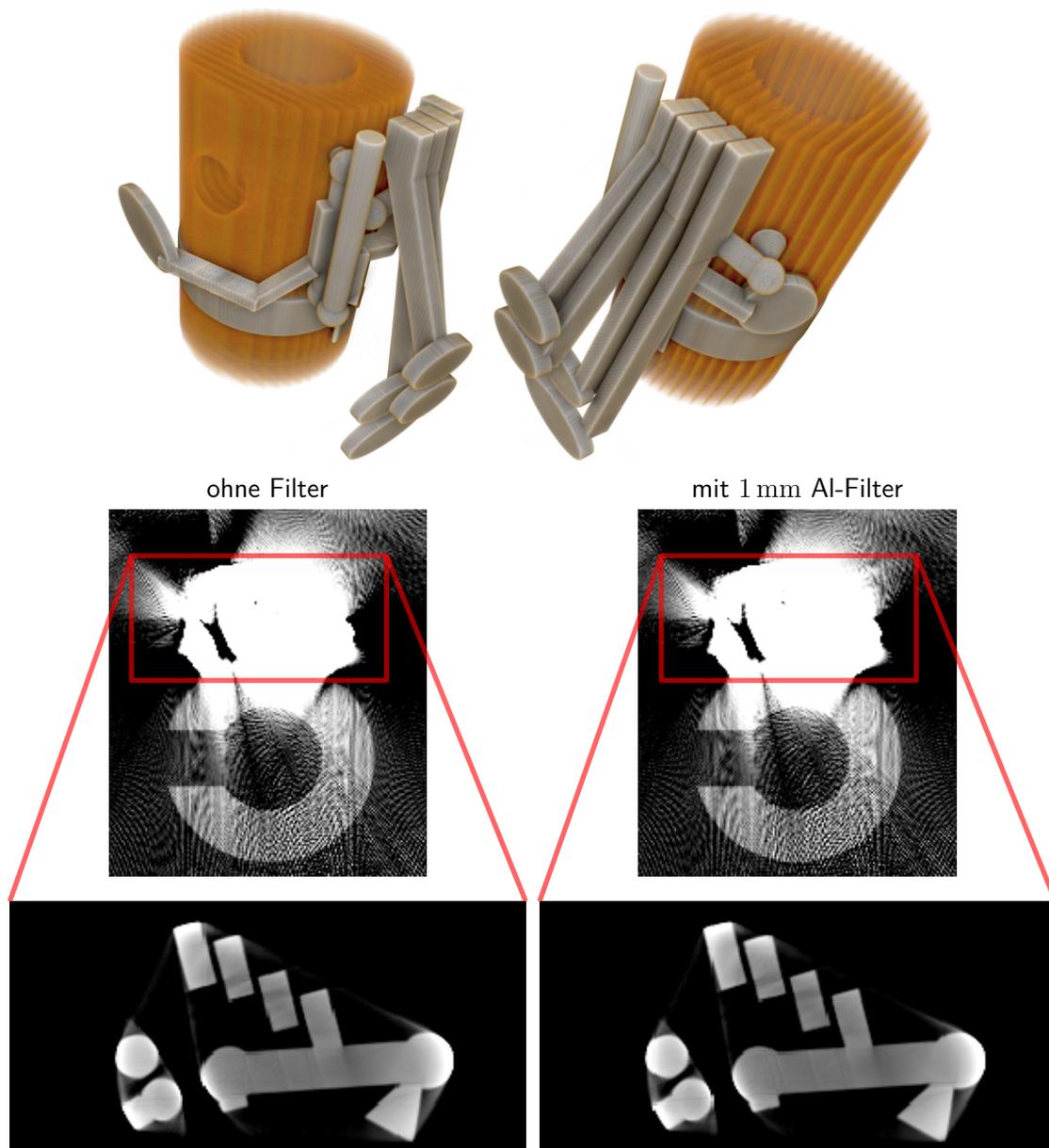


Abb. 3.5.: Schematische Darstellung des Klarinettenphantoms und Schnittbilder aus einer simulierten CT-Messung. Der Ausschnitt einer Klarinette ist entlang der Rohrachse 3 cm lang. Die rotbraun eingefärbten Teile sind als Holz modelliert, die silbergrau dargestellten Teile bestehen aus der Legierung Neusilber. Die dargestellten Tomogramme zeigen einen Schnitt durch das Klarinettenphantom, der senkrecht zur Rohrachse verläuft. Obwohl für die beiden rechts dargestellten Tomogramme ein Röntgenfilter simuliert wurde, lässt sich keine wesentliche Änderung des Artefaktinventars feststellen.

4. Kalibrationspektren für die analytische Röntgensimulation

Um eine möglichst realistische analytische Röntgensimulation durchführen zu können, ist es nötig, die Eigenschaften des CT-Systems, welches simulativ nachgebildet werden soll, zu kennen. Im analytischen Simulationsmodell sind das spektrale Verhalten der Röntgenquelle und des Röntgendetektors die dafür wesentlichen Parameter. Man benötigt zur Durchführung einer Röntgensimulation das Röntgenquellspektrum sowie die spektrale Detektorantwortfunktion. Im Falle des analytischen Simulationsmodells, wie es in Gleichung 2.34 beschrieben ist, genügt das Produkt $D(E)$ aus Quellspektrum $S(E)$ und Detektorantwort $R(E)$. Dieses Produkt wird als *Systemspektrum* bezeichnet. Das bedeutet, $D(E)$ charakterisiert aus Sicht des analytischen Simulationsmodells die *spektralen* Eigenschaften des CT-Systems, welches simuliert werden soll. Dazu sei auf Gleichung 2.34 und deren Beschreibung hingewiesen. Die Beobachtung, dass das Produkt aus Röntgenquellspektrum und Detektorantwort ausreicht, um die spektralen Eigenschaften eines CT-Systems im analytischen Modell zu berücksichtigen, ist Voraussetzung für die Kalibration des Simulationsmodells. Ergebnisse einer kalibrierten Simulation, im Vergleich mit einer realen CT-Messung, finden sich im Abschnitt 4.4. Es bleibt die Aufgabe $D(E)$ auf experimentellem Weg zu bestimmen. Dabei gilt, neben den Randbedingungen, welche durch die Röntgenphysik gegeben sind, eine technische Einschränkung³⁹: Die zur Kalibration nötigen Messungen müssen mit den Komponenten eines typischen CT-Systems durchführbar sein. Der apparative Aufwand soll also nicht größer werden als zur Durchführung einer CT-Messung nötig. Dem will ich, weil andernfalls die Methode an Relevanz verliert, besonders Rechnung tragen, wie in den folgenden Abschnitten ausgeführt ist.

Indem ich eine vorhandene, experimentelle Methode zur Bestimmung von $D(E)$ untersuche und deren Ergebnis in einer analytischen Simulation anwende, gelingt es die Simulation auf das System zu kalibrieren. Die sonst üblichen Wege $S(E)$ und $R(E)$ für eine analytische Simulation festzulegen (siehe Abschnitt 2.4), werden dadurch ersetzt. Damit ist eine neuartige Variante der analytischen Simulationsmethode gefunden, welche in der Lage ist

³⁹ Diese Einschränkung ist besonders durch den anwendungsorientierten Charakter der vorliegenden Arbeit motiviert. Allerdings stellt man auch fest, dass die im Folgenden durchgeführte Methode durch ihre Einfachheit besticht.

auf ein reales CT-System bezug zu nehmen.

Wenn ein solches, empirisch gefundenes $D(E)$ in einer analytischen Simulation Verwendung findet und das betont werden soll, werde ich von einer *kalibrierten Simulation* sprechen. Das hier angewandte Verfahren $D(E)$ zu bestimmen wird als *Spektrenschätzung* bezeichnet, da es sich nicht im eigentlichen Sinn um eine Messung von Röntgenenergie und Intensität handelt. Das gewählte Verfahren basiert auf der numerischen Ausführung einer Iterationsformel und ist damit einer direkten Fehlerbetrachtung nicht zugänglich. Dennoch will ich mich mit der Güte dieser Methode auseinandersetzen. Deshalb werde ich in der Hauptsache darauf eingehen, wie die experimentellen und numerischen Parameter der Methode Einfluss auf die Ergebnisse nehmen und die Stabilität der Methode gegenüber diesen Parametern untersuchen.

4.1. Das Spektrenschätzproblem für Systemspektren

Das Ziel der Untersuchungen dieses Kapitels ist es, das Systemspektrum $D(E)$ zu bestimmen bzw. ein Verfahren dazu vorzustellen. Dies soll, aus praktischen Gründen, direkt mit den Komponenten eines CT-Systems geschehen, also möglichst ohne zusätzlichen apparativen Aufwand. Daraus folgt insbesondere, dass keine zusätzlichen Röntgenspektrometer benötigt werden, sondern nur die im System verbaute Röntgenröhre und der Detektor. Die für CT-Systeme verwendeten Detektoren sind im Allgemeinen nicht energieauflösend im Sinne einer Bestimmung von $S(E)$. Auch die teilweise verwendeten direkt konvertierenden Detektoren können nur nach aufwändigem Kalibrieren energieauflösend eingesetzt werden. Bei sogenannten Dual-Energy bzw. Multi-Energy-Detektoren verwendet man verschiedene detektorseitige Röntgenfilter, um die Detektorantwort $R(E)$ zu modellieren⁴⁰. In den Ref. [13, 43] sind Realisierungen beider Detektortechnologien vorgestellt und verglichen. Mittels energieauflösender Detektoren kann in der industriellen Radiographie und CT Materialauflösung (effektive Ordnungszahl) erreicht werden. Allerdings können so nur wenige verschiedene Energiebänder eines Spektrums unterschieden werden⁴¹.

Physikalisch ist also eine Einschränkung dadurch gegeben, dass *nur* die Intensitätsmessung eines indirekt konvertierenden Detektors zur Verfügung steht, um die Spektrenschätzung

⁴⁰ Solche Detektoren können auch gleichzeitig in verschiedenen Spektralbereichen betrieben werden. Sie sind dann so ausgeführt, dass mehrere hintereinander liegende Szintillatoren jeweils ein Signal erzeugen. Eine weiter *oben* liegende Szintillatorschicht dient dann als Röntgenfilter für darunter liegende.

⁴¹ Diese Information ist zwar nicht wesentlich verschieden von den weiter unten vorgestellten Stufenkeilmessungen, allerdings verhält es sich eher so, dass die hier vorgestellte Methodik dazu dienen kann Dual-Energy-Detektoren zu charakterisieren als umgekehrt die Information dieser Detektoren zu verwenden um die Spektrenschätzung durchzuführen.

durchzuführen. Es bleiben damit zwei Möglichkeiten Messdaten zu erzeugen, aus denen $D(E)$ bestimmt werden kann.

1. Die Röntgenbeugung eines Strahls an einem Kristallgitter ist winkel- und energieabhängig. Die Röntgenenergie kann durch geeignete Kristalle bzw. deren Positionierung im Strahl räumlich getrennt werden. Man stellt einen Zusammenhang zwischen der Energie und dem Ort, an dem die Intensität detektiert wird, her. Solche Kristallspektrometer erfordern exakte Kenntnis der Messgeometrie, insbesondere der auftretenden Beugungswinkel. Das ist mit typischen CT-Systemen nur schwer zu realisieren, da normalerweise nur eine Objektrotationsachse verwendet wird und nur selten ein Goniometer zur Verfügung steht⁴². Es sei vor allem auf die sogenannte *defokussierte Laue-Geometrie* hingewiesen (wird zum Beispiel in Ref [45] beschrieben), weil diese mit einem Kegelstrahl und nur einem Kristall auskommt⁴³. Bei sämtlichen Kristallspektrometern besteht das Limit, dass für große Röntgenenergien keine Kristalle mehr gefunden werden können, deren Gitterparameter klein genug sind, um Röntgenstrahlen effektiv (einige Winkelgrad) zu beugen⁴⁴. Solche (Ein-)Kristallspektrometer können also nur bei CT-Anlagen mit kleiner Maximalenergie ($\lesssim 80$ keV) von Nutzen sein; man kann allerdings eine gute Energieauflösung erwarten. Im Rahmen dieser Arbeit gehe ich von deutlich größeren Maximalenergien aus, sodass Kristallspektrometer keine Anwendung finden können.

2. Die zweite Variante Messdaten unter Berücksichtigung der oben genannten Einschränkung zu erzeugen sind Transmissionsmessungen. Im Folgenden ist vorausgesetzt, dass Form und Material eines Testkörpers bekannt sind. Das heißt man kann Röntgentransmissionsmessungen durchführen, wobei die durchstrahlte Weglänge t sowie der energieabhängige Schwächungskoeffizient $\mu(E)$ bekannt sind. Für die rechte Seite von Gleichung 2.34 sind damit alle Faktoren außer dem gesuchten $D(E)$ bekannt. Die linke Seite von Gleichung 2.34, also die Intensität, folgt aus einer Messung.

⁴² Dieser Umstand ist zwar kein echtes Hindernis, macht röntgenbeugungsbasierte Methode jedoch unpraktikabel gegenüber einer Transmissionsmessung.

⁴³ Zum Beispiel ein großformatiger Siliziumeinkristall-Wafer, wie er in der Halbleiterindustrie Verwendung findet.

⁴⁴ Der Gitterparameter (und damit die atomaren Abstände) eines Kristalls muss in der Größenordnung der Wellenlänge liegen. Röntgenphotonen haben beispielsweise bei 300 keV eine Wellenlänge von $4,10 \cdot 10^{-12}$ m. Das ist zwei Größenordnungen kleiner als der Radius des Wasserstoffatoms.

$D(E)$ soll durch eine Kammfunktion dargestellt werden. Man definiert

$$D(E) := \sum_j^{N_{\text{Energie}}} d_j \delta(E - E_j). \quad (4.1)$$

N_{Energie} ist die Anzahl der Energiebins mit denen das Spektrum abgetastet wird. Setzt man diese Definition in Gleichung 2.34, ein kann das Integral über die Energie ausgeführt werden. Man erhält die Intensität

$$I = \sum_j d_j \exp\left(-\int_w \mu(E_j, t') dt'\right). \quad (4.2)$$

Dabei ist j der Laufindex einer noch zu wählenden diskreten Abtastung der Energieachse. Der Vektor $\mathbf{d} = (d_1, d_2, \dots)^\top$ enthält die Intensitäten des gesuchten Systemspektrums $D(E)$.

Wie bereits erwähnt soll eine gewisse Anzahl N_{Messung} von Transmissionsmessungen an bekannten, homogenen bzw. abschnittsweise homogenen Testkörpern durchgeführt werden. Die gemessenen Intensitäten⁴⁵ I_i seien mit dem Laufindex $i = 1, \dots, N_T$ nummeriert und zu einem Messdaten-Vektor $\mathbf{I} = (I_1, I_2, \dots)^\top$ zusammengefasst. Entsprechend sind auch die Testkörpereigenschaften durchstrahlte Weglänge t_i und Absorptionskoeffizient $\mu_i(E)$ indiziert und damit die Strahlsumme $M_i(E_j)$ bzw. $M_i(E_j) = \sum_{\text{Objekt}} \mu_i^{\text{Objekt}} t_i^{\text{Objekt}}$ wenn mehrere homogene Körper hintereinander angeordnet sind.

Schreibt man Gleichung 4.2 jeweils für die N_{Messung} Transmissionsmessungen auf, so erhält man ein lineares Gleichungssystem

$$\mathbf{I} = \mathbf{A} \mathbf{d} \quad (4.3)$$

mit

$$A_{ij} = \exp(-M_i(E_j)). \quad (4.4)$$

Die Systemmatrix A enthält dabei die *volle* Information über das Absorptionsverhalten der Objekte, welche für die Transmissionsmessungen verwendet werden.

Bezüglich des gesuchten Koeffizientenvektors \mathbf{d} ist Gleichung 4.3 ein *inverses Problem*. Das inverse Problem aus Gleichung 4.3 wird im Folgenden als *Spektrenschätzproblem (SSP)* bezeichnet.

⁴⁵ Je eine Intensitätsmessung pro Transmissionsexperiment.

Ein Röntgenquellspektrum aus Transmissionsdaten zu schätzen⁴⁶ wurde von Silberstein bereits 1932 vorgeschlagen [93]. Das SSP ist mehrfach mit unterschiedlicher Zielsetzung untersucht worden. Erwähnenswert sind Anwendungen im medizinischen Kontext. Das Quellspektrum ist dort zur Dosisberechnung von Interesse, siehe Ref. [102] und [54]. Ebenfalls erwähnenswert sind Anwendungen im Bereich der Mehrenergie-CT-Methoden. Die sogenannte Basismaterialzerlegung (siehe Ref. [33] für dieses Verfahren) stützt sich auf die Kenntnis von $D(E)$ für mindestens zwei verschiedene Quellspektren, um das absorbierende Material zu schätzen. In Ref. [108] und [105] wird für die Basismaterialzerlegung das Ergebnis einer Spektrenschätzung verwendet. Um eine Publikationsreihe zu nennen, welche sich mit dem SSP überblickend befasst (mit Stand von 1983), verweise ich auf die Referenzen [61] und [62]. Dort wird ein Überblick über einen Teil der vorhandenen Lösungsverfahren gegeben sowie deren Fehlerquellen und Limitierungen gezeigt. Teil zwei dieser Publikationsreihe zeigt die Anwendung auf experimentell erzeugte Transmissionsdaten. Kramer untersucht Spektren im Bereich 25 keV bis 50 keV und erhält brauchbare Ergebnisse, wobei er eine eher geringe Energieauflösung von 5 keV (5 Energieintervalle) verwendet.

Ich stütze mich im Folgenden auf die Publikation von Sidky et al. [91] sowie die dazugehörige, ergänzende und experimentelle Arbeit von Zhang et al. [108]. In diesen Publikationen findet man auch Zusammenfassungen jüngerer Ansätze das SSP zu lösen. Das *Maximum-Likelihood (ML)* Lösungsverfahren von Sidky et al. wird in den folgenden Abschnitten besprochen und angewendet.

4.2. Lösungsverfahren für das Spektrenschätzproblem

Um eine Lösung für das inverse Problem aus Gleichung 4.3 zu finden, muss man zunächst die Systemmatrix A näher betrachten. Typischerweise wird man $D(E)$ für CT-Systeme im Energiebereich 10 keV bis 1 MeV, in Extremfällen bis 10 MeV, schätzen wollen⁴⁷. Die Diskretisierung der Energieachse wird typischerweise deutlich mehr Energiebins enthalten als Transmissionsmessungen durchgeführt werden⁴⁸: $N_{\text{Messung}} \ll N_{\text{Energie}}$. Das SSP ist also typischerweise unterbestimmt. Das SSP ist ein schlecht gestelltes inverses Problem [91]. Sowohl eine Singulärwertzerlegung als auch verschiedene iterative Verfahren sind zur Lösung

⁴⁶ Zunächst muss man nicht davon ausgehen, dass man sich, wie für diesen Kalibrationsansatz, für $D(E)$ interessiert sondern eher für $S(E)$. Allerdings muss man $R(E)$ dann kennen oder einen Detektor besitzen, für dessen Ausgangssignal man $R(E) \equiv 1$ annehmen kann.

⁴⁷ Ich setze industrielle CT als Anwendungsgebiet voraus.

⁴⁸ Ein Spektrum mit Maximalenergie im Bereich bis 300 keV wird praktischerweise in 1 keV breiten Intervallen abgetastet. Da die charakteristischen Linien und die von Absorptionskanten induzierten Intensitätssprünge im MeV-Regime relativ zum Bremsspektrum weniger ins Gewicht fallen, kann bei großen Maximalenergien mit breiteren Intervallen gearbeitet werden.

des SSPs angewendet worden. Auf zwei der möglichen Ansätze will ich hier näher eingehen. In Ref. [91] sind darüber hinaus gehende Informationen enthalten.

Mit dem Beispiel der sogenannten Tikhonov-Phillips Regularisierung will ich ein Verfahren herausgreifen, das auf einer Matrixinversion basiert. Dieses Verfahren wurde in der Bachelorarbeit⁴⁹ von A. Maier mit dem weiter unten vorgestellten Verfahren von Sidky et al. verglichen [73]. Man ersetzt das eigentliche SSP durch das *regularisierte* Ersatzproblem (für eine mathematische Behandlung des Verfahrens siehe z.B. Ref. [83])

$$\underbrace{(A^\top A + \kappa \mathbb{E})}_G \mathbf{d} = \begin{cases} A^\top \mathbf{I} & \text{ohne Initialschätzung} \\ A^\top \mathbf{I} + \kappa \mathbf{d}^{(0)} & \text{mit Initialschätzung } \mathbf{d}^{(0)}. \end{cases} \quad (4.5)$$

Dieses lineare Gleichungssystem kann durch Berechnung der Inversen G^{-1} gelöst werden. Die zweite Formulierung, mit Initialschätzung, kann auch zu einer iterativen Variante des Verfahrens ausgebaut werden. Die Initialschätzung ist für jeden Iterationsschritt $i > 0$ das Ergebnis des letzten Iterationsschrittes $\mathbf{d}^{(i-1)}$. Der Regularisierungsparameter κ wird ebenfalls mit der Iterationszahl variiert; beispielsweise $\kappa_i = \kappa q^{i-1}$ mit $\kappa > 0$ und dem frei wählbaren Parameter $q \in]0; 1]$, wie in Ref. [83] angegeben.

Ein Nachteil dieser Methode besteht darin, dass sich die Positivität des Ergebnisses nicht garantieren lässt⁵⁰. Für ein *korrekt* gewähltes κ ist das Tikhonov-Phillips-Verfahren prinzipiell geeignet, um inverse Probleme wie das SSP zu lösen. In der Arbeit von A. Maier ist gezeigt, dass es sehr aufwändig ist κ so zu wählen, dass mit diesem Verfahren eine rein positive Lösung erreicht wird. Teilweise ist dies gar nicht gelungen, sodass negative Intensitäten mit erheblichen Betrag im Ergebnis vorkommen oder der *Regularisierungsparameter* κ musste so groß gewählt werden, dass das Verfahren effektiv nicht mehr konvergiert sondern lediglich die Initialschätzung wiedergibt. Eine direkte mathematische Herleitung der Beobachtung, dass das Tikhonov-Phillips Verfahren keine stabile Lösung für das SSP bieten kann, ist bisher nicht erfolgt⁵¹.

Sidky et al. haben ein Maximum-Likelihood-basiertes Verfahren vorgestellt, welches die Positivität der Lösung garantieren kann und ohne die Berechnung einer Matrixinversen aus-

⁴⁹ Diese Arbeit ist vom Autor betreut worden.

⁵⁰ Es gibt andere Formulierungen bzw. Verwandte dieser Regularisierungsmethode, welche die Positivität der Lösung garantieren können. Nachdem das weiter unten vorgestellte EM-Verfahren diesem Regularisierungsansatz jedoch deutlich Überlegen ist, will ich nicht näher auf solche Varianten der Tikhonov-Phillips-Regularisierung bzw. deren Erweiterungen eingehen.

⁵¹ Allerdings weist Sidky, ebenfalls ohne nähere Begründung, darauf hin, dass solche Verfahren, welche auf einer Matrixinversion basieren, prinzipiell schlecht geeignet sind um, das SSP zu lösen. Da es sich um ein hochgradig schlecht gestelltes, inverses Problem handelt.

kommt. Die Herleitung wird hier skizziert und das Verfahren in den folgenden Abschnitten näher untersucht. Die folgenden Ausführungen zur Herleitung des Verfahrens sind Ref. [91] und Ref. [108] entnommen⁵².

Es sei angenommen, dass die aus Transmissionsmessungen erhaltenen Intensitäten Poisson-verteilt sind. Zhang et al. merken korrekterweise an, dass diese Annahme unrichtig ist. Vielmehr handelt es sich um eine zusammengesetzte Poisson-Verteilung (also die Summe aus jeweils Poisson-verteilten Zufallsvariablen). Allerdings kann man, laut Zhang et al., im vorliegenden Fall ohne wesentliche Fehler zu erwarten, mit der Annahme einer einfachen Poisson-Verteilung fortfahren [108]. Man nimmt für die gemessenen Intensitäten aus Gleichung 4.2 also an, dass sie

$$I_i \propto \text{Poisson} \left\{ \sum_j d_j A_{ij} \right\}$$

Poisson-verteilte Zufallszahlen sind. Die Likelihood-Funktion eines Messdatenvektors \mathbf{I} , unter Verwendung einer (zwischen-) Lösung \mathbf{d} , ist das Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten $\mathcal{L} = \prod_i p(I_i, \mathbf{d})$. Damit lässt sich die log-Likelihood-Funktion des Problems [69] aufstellen

$$\ln \mathcal{L} = \sum_i \left(I_i \ln \left(\sum_j d_j A_{ij} \right) - \ln(I_i!) - \sum_j A_{ij} d_j \right).$$

Durch Maximieren dieser Funktion erhält Sidky et al. [91] die Iterationsformel

$$d_j^{(k \rightarrow k+1)} = d_j^{(k)} \frac{1}{\sum_i A_{ij}^\top} \sum_i A_{ij}^\top \frac{I_i}{\mathbf{A}\mathbf{d}^{(k)}}. \quad (4.6)$$

Um mittels Gleichung 4.6 ein $D(E)$ zu schätzen, benötigt man zwingend einen Startwert für die erste Iteration $k = 0$. Die Wahl eines solchen *Initialspektrums* ist mehrfach kommentiert worden. Im folgenden Abschnitt wird untersucht, inwiefern die Wahl einer Startschätzung Einfluss auf die Ergebnisse hat. Die Startschätzung wird im Folgenden, wegen des Kontextes der Systemspektren, als *Initialspektrum* bezeichnet. In Ref. [74] findet sich der Hinweis, dass es aufwändig sei solche Initialspektren zu wählen. Damit werde ich mich im Abschnitt 4.3 näher auseinandersetzen.

Das Initialspektrum hat auf zwei Arten Einfluss auf die Spektrenschätzung. Zum einen gilt für jedes $d_j^{(0)}$, dass sein Vorzeichen über alle Iterationen hinweg erhalten bleibt bzw., dass $d_j^{(k)} = 0, \forall k$, wenn der Startwert $d_j^{(0)} = 0$ war. Damit ist, nach geeigneter Wahl des Startspektrums, sowohl die Positivität der Lösung garantiert als auch die Möglichkeit

⁵² Mit Anpassungen bezüglich der Variablennamen.

gegeben Vorwissen über das zu schätzende Spektrum anzuwenden. Energieintervalle von denen bekannt ist, dass sie keine Intensität tragen setzt man im Initialspektrum gleich Null. Das gilt beispielsweise für alle Energiebins jenseits Maximalenergie der Röntgenröhre $E > E_{\max}$ oder für sehr kleine Energien, wenn ein bekannter Röntgenfilter eingesetzt wurde (das Röhrenaustrittsfenster mit eingeschlossen).

Zum anderen kann das allgemeine Vorwissen über den Verlauf von typischen Röntgenspektren sowie der Detektorcharakteristik (z.B. die spektrale Konversionseffizienz des Szintillators) zur Definition des Initialspektrums herangezogen werden. Damit sind insbesondere die charakteristischen Linien des Röhrentargetmaterials gemeint, sowie die Absorptionskanten des Detektormaterials und der möglicherweise verwendeten Röntgenfilter⁵³. Von Verfahren wie dem in Gleichung 4.6 definierten ist bekannt, dass ihr Ergebnis und dessen Genauigkeit von der Wahl der Startwerte (hier des Initialspektrums) abhängt [21]. Deshalb heißen solche Verfahren, speziell dieses, auch „Expectation-Maximization-Verfahren“ (EM-Verfahren).

4.3. Wahl geeigneter Parameter und Durchführung von Transmissionsexperimenten

Wahl der Transmissionsexperimente anhand des Singulärwertspektrums

Zur Durchführung einer Spektrenschätzung muss man entscheiden, welche (wohl bekannten) Testkörper man für die Transmissionsmessungen verwendet und wieviele (verschiedene) Transmissionsmessungen durchgeführt werden sollen. Zusätzlich ist eine Abtastbreite der Energieachse für $D(E)$ zu wählen. Beide Entscheidungen beeinflussen die Kondition der Matrix A und damit die Frage, wie schlecht gestellt das SSP ist. Ziel dieses Abschnittes soll es sein ein Verfahren bereitzustellen, welches die *Parameterwahl* für eine Spektrenschätzung ermöglicht.

Die Wahl der Parameter ist in diesem Sinne die Wahl der Matrix A . Im Folgenden wird deshalb davon gesprochen, dass A *gewählt* wird, wenn gemeint ist, dass die Anzahl und die Materialien für die Transmissionsexperimente gewählt werden.

Das Verfahren zur Wahl von A soll, mit Ausnahme der Maximalenergie des zu schätzenden Spektrums, kein Vorwissen über eine Lösung \mathbf{d} voraussetzen. Damit sind insbesondere Verfahren ausgeschlossen, die eine analytische Simulation der Transmissionsdaten beinhalten, weil dafür ein Systemspektrum benötigt würde. In einem solchen Fall könnte A gerade so gewählt werden, dass die L^2 -Norm zwischen \mathbf{d} und dem $D(E)$, welches zur Simulation verwendet wurde, minimiert wird. Man erhielte dadurch allerdings lediglich

⁵³ Gemeint sind detektor- und quellseitige Filter, insbesondere fest verbaute Ein- bzw. Austrittsfenster.

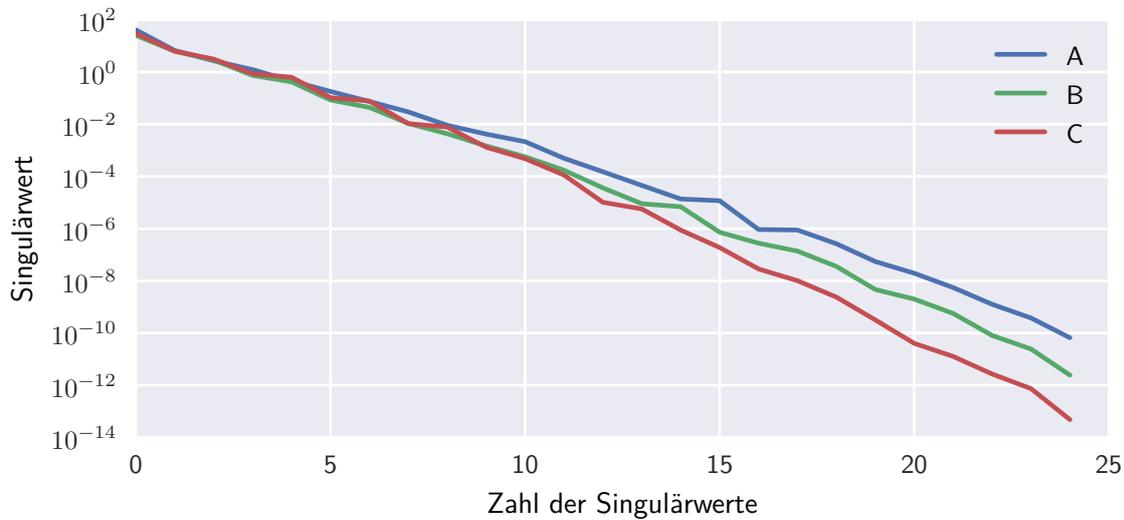


Abb. 4.1.: Graph der Singulärwerte für drei verschiedene Beispiele einer SSP-Systemmatrix in halblogarithmischer Darstellung. Die Matrizen sind jeweils von der Größe 25×300 und beinhalten die Beschreibung der Transmissionsexperimente für Stufenkeilmessungen mit Al-POM (A), Al-Fe (B) und POM-Fe (C).

die Parameter zur Schätzung des konkreten $D(E)$ und müsste weiterhin untersuchen, wie sich diese Parameterwahl auf andere, unbekannte Spektren mit gleicher Maximalenergie übertragen lässt.

In der Publikation von Sidky et al. ist eine Untersuchung des Singulärwertespektrums von A vorgeschlagen, um einen qualitativen Vergleich bezüglich verschiedener konkret gegebener Matrizen A zu erlangen. Dazu wird eine numerische Bestimmung der Singulärwerte durchgeführt. Anschließend werden die Singulärwerte ihrer Größe nach sortiert und auf den größten Wert normiert in einem Diagramm dargestellt. Auf die Normierung bezüglich des größten Singulärwertes will ich im Folgenden verzichten, da die Singulärwerte (bzw. das Singulärwertespektrum) verschiedener Realisierungen der Matrix A absolut verglichen werden sollen. Eine Normierung ergibt dann keinen Sinn mehr. Man erhält verschieden schnell abfallende Graphen für unterschiedlich gewählte A . Abbildung 4.1 zeigt Beispiele für drei verschiedene Matrizen A , jedoch ohne die Normierung auf den größten Singulärwert. Aufgrund des großen Wertespektrums wird eine halblogarithmische Darstellung gewählt.

Je weniger steil ein solcher Graph abfällt (im Vergleich mit den Graphen zu anderen A), je größer also die auftretenden Singulärwerte sind, umso besser ist die zugrunde liegende Matrix A konditioniert. Mit einem solchen Diagramm ist nach Ref. [91] ein qualitativer Vergleich für die Kondition verschiedener A gegeben.

Ich will diese qualitative Methode aufgreifen und durch randomisiertes Testen verschiedener A dazu verwenden, den Beitrag eines bestimmten Transmissionsexperimentes zum Singulärwertspektrum von A zu untersuchen⁵⁴. Ziel ist es die Transmissionsexperimente zu finden, welche zu einer möglichst guten Kondition von A führen⁵⁵.

Für eine festgelegte Maximalenergie des zu schätzenden Spektrums kann man ebenso festlegen, in wievielen und welchen diskreten Energieschritten dieses abgetastet werden soll. Für die im Rahmen dieser Arbeit auftretenden Maximalenergien (Größenordnung 100 keV) hat sich beispielsweise eine homogene Abtastung in 1 keV breiten Intervallen als praktisch erwiesen⁵⁶. Diese Wahl der Diskretisierung stellt einen Kompromiss zwischen der Genauigkeit der numerisch berechneten Energieintegrale, wie in Gleichung 2.33, und der benötigten Simulationsdauern dar. An dieser Stelle ist keine Aussage über die Energieauflösung des EM-Verfahrens getroffen.

Mit der Zahl der Energieintervalle ist die Zahl der Spalten n von A festgelegt. Die Zahl der Transmissionmessungen ist die Zahl der Zeilen m von A . Typischerweise wird man deutlich mehr Energieintervalle verwenden als Transmissionsexperimente durchgeführt werden: $n \gg m$. Für die Wahl der Transmissionsexperimente gilt die Bedingung, dass die Transmissionslänge, also die Dicke, und die Materialzusammensetzung der absorbierenden Objekte genau bekannt sein müssen. Für Transmissionmessungen, die mittels CT-Systemen in Kegelstrahlgeometrie durchgeführt werden, lassen sich diese Bedingungen leicht erfüllen, wenn man Stufenkeile mit kalibrierten Dicken verwendet. Nachdem in solchen Systemen Flächendetektoren eingesetzt werden, kann man in derselben Radiographie viele Transmissionsexperimente gleichzeitig durchführen, wenn die Anlagengeometrie eine entsprechende Abbildung des Stufenkeils zulässt. Gegebenenfalls muss der Einfluss des Kegelwinkels auf die Transmissionslängen korrigiert werden.

Wenn die Anlagengeometrie es zulässt, kann man zwei rechteckige Stufenkeile aus verschiedenen Materialien um 90° zueinander verdreht hintereinander stellen. In der Radiographie ergibt sich dann eine Matrix aus Transmissionen durch jeweils verschiedenen Dicken der beiden verwendeten Materialien, siehe beispielsweise die Radiographie in Abb. 4.9. Damit können auf einfache Art mehrere Transmissionmessungen für systematische Dickenkombinationen von bis zu zwei Materialien durchgeführt werden.

Die Wahl der Zeilen von A , was die Wahl der durchzuführenden Transmissionsmessungen

⁵⁴ Allerdings ohne, wie Sidky, auf den größten Singulärwert zu normieren. Die Singulärwerte werden im Folgenden also so betrachtet, wie sie berechnet werden.

⁵⁵ Dabei bleibt das SSP natürlich schlecht gestellt. Es wird immer Singulärwerte ~ 0 geben, und somit bleibt auch die Konditionszahl der Matrix unendlich. In diesem Sinne ist es streng mathematisch gesehen nicht sinnig an dieser Stelle das Wort Kondition zu verwenden.

⁵⁶ Das gilt auch für die Diskretisierung, welche für die analytischen Röntgensimulationen verwendet wird.

entspricht, reduziert sich auf die Wahl geeigneter Materialien sowie eines Dickenspektrums. Im Folgenden sei angenommen, dass eine Zahl N_{Mat} von Materialien zur Verfügung steht, aus denen Stufenkeile mit hinreichender Präzision hergestellt werden können. Aus jedem Material soll ein Stufenkeil mit einer Maximaldicke t_{Mat}^{\max} hergestellt werden. Jeder Keil soll $N_S^{Mat} + 1$ Stufen haben, mit den Dicken⁵⁷

$$0, \frac{t_{Mat}^{\max}}{N_S^{Mat}}, 2 \frac{t_{Mat}^{\max}}{N_S^{Mat}}, \dots, t_{Mat}^{\max}. \quad (4.7)$$

Mit N_T sei die Zahl der möglichen Transmissionsexperimente bezeichnet (Zahl der Transmissionsexperimente aus denen das optimale Ensemble gewählt werden soll). Darin enthalten: die Zahl der Zweierkombinationen mit verschiedenen Materialien, die Zahl der (mono-Material-) Stufen und die „Transmissionmessung ohne Absorber“. Die letztgenannte Transmissionmessung führt zu einer Zeile mit Einsen in A und entspricht der Messung der ungeschwächten Intensität (volle Transmission). Betrachtet man die Modellierung von $D(E)$ wie in Glg. 4.1, so erkennt man die ausgezeichnete Stellung dieser Zeile von A bezüglich der Iterationsformel 4.6: das Ergebnis der Spektrenschätzung wird auf die Primärintensität normiert. Wegen dieser ausgezeichneten Stellung dieser Zeile wird sie in der folgenden Betrachtung ausgeschlossen. Sie sei immer Bestandteil von A . Dies ist in einer gewöhnlichen Radiographie ohnehin gegeben, da man neben den Objekten „Luft“ abbildet.

Es sei nun eine Spektrenschätzung mit N Transmissionmessungen durchzuführen. Die Wahl von A kann mittels der genannten Daten auf

$$\binom{N_T}{N} \quad (4.8)$$

verschiedene Arten realisiert werden ($N < N_T$). Der Binomialkoeffizient ist im Allgemeinen so groß, dass ein systematischer Vergleich aller möglichen A nicht durchführbar ist.

Wie man in Abbildung 4.1 abliest, gibt es für typische A nur sehr wenige Singulärwerte, die sich wesentlich von Null unterscheiden (man beachte die halblogarithmische Darstellung). Nachdem zur Berechnung eine computernumerische Singulärwertzerlegung verwendet wurde sei erwähnt, dass man bei typischen Implementierungen der Singulärwertzerlegung von Null sprechen sollte, wenn der numerische Wert etwa 10^{-15} ist⁵⁸ (das numerische Limit

⁵⁷ Die Dicke Null ist explizit mit dabei. Die homogene Verteilung der Stufendicken ist nicht notwendig, sei aber ohne weitere Begründung und Einschränkung gewählt.

⁵⁸ In Ref. [80] ist diese Zahl motiviert.

ist in den Beispielen aus Abb. 4.1 noch nicht erreicht). Wenn eine Matrix A umso besser konditioniert ist je weniger steil der zugehörige Graph der Singulärwerte abfällt und je größer die auftretenden Singulärwerte sind, dann ist die Summe der Singulärwerte ebenfalls ein geeignetes Maß um diesen Vergleich durchzuführen. Im Beispiel von Abb. 4.1 ist also die Matrix die zu Linie „A“ gehört die am besten konditionierte. Wegen des angesprochenen computernumerischen Limits betrachtet man statt der Summe über alle nur die ersten k Singulärwerte > 0 . Man definiert einen Bewertungsindex, im Folgenden *Signifikanz* genannt, für eine Matrix A

$$\zeta := \sum_1^k s_i \quad (4.9)$$

mit den absteigend sortierten Singulärwerten s_i .

Wählt man zufällig eine Matrix A aus der Menge der möglichen A und berechnet das entsprechende ζ , kann man dieses dem Ensemble aus Transmissionsexperimenten, die zum konkret gewählten A geführt hatten, zuordnen. Wenn man dieses Vorgehen sehr oft wiederholt, kann man jedem Transmissionsexperiment verschiedene Werte von ζ zuordnen, je nachdem in welchem Ensemble das konkrete Transmissionsexperiment Bestandteil war. Nach hinreichend großer Zahl solch zufälliger Wahlen von A , kann man für jedes Transmissionsexperiment eine *mittlere Signifikanz* $\bar{\zeta}$ berechnen.

$\bar{\zeta}$ kann so interpretiert werden: Wenn ein konkretes Transmissionsexperiment (Material, Dicke) Bestandteil einer Matrix A war (also die entsprechende Zeile aufgetreten ist), hatte die Matrix im Mittel $\bar{\zeta}$ (Material, Dicke). Unterstellt man zusätzlich, dass bestimmte Transmissionsexperimente zu systematisch besser konditionierten A führen, dann ist $\bar{\zeta}$ (Material, Dicke) ein Maß für die „Wichtigkeit“ des entsprechenden Transmissionsexperiments.

Dementsprechend lautet die geforderte Parameterwahl für ein Experiment zur Spektrenschätzung: man wähle ein Ensemble aus den Transmissionsexperimenten mit den größten $\bar{\zeta}$. Damit ist ein Verfahren gegeben um A möglichst *gut* zu wählen.

Es gibt in diesem Verfahren zwei Parameter, die, ohne ausführliche Diskussion, kurz erwähnt sein sollen. Die Zahl der Zeilen n , aus denen die zufällig erzeugten A gebildet werden, wird im Folgenden so gewählt, dass sie in derselben Größenordnung liegt wie die Zahl der Transmissionsexperimente, die letztlich auch durchgeführt werden sollen. Man kann beobachten, dass die Ergebnisse für die Parameterwahl nur unwesentlich von n abhängen. Die Zahl der verschiedenen Realisierungen von A wurde so gewählt, dass sich Konvergenz für den Mittelwert $\bar{\zeta}$ einstellt.

Ich will dieses Verfahren nun an einem Beispiel anwenden. Dazu

- sei festgelegt, dass die Maximalenergie 300 keV ist.
- wähle man drei verschiedene Materialien und zugehörige Maximaldicken (jeweils in 1 mm Stufen abgetastet):
 - Aluminium (Al) mit max. 40 mm,
 - Eisen (Fe) mit max. 30 mm,
 - und Polyoxymethylen⁵⁹ (POM) mit max. 50 mm.
- werden aus diesen möglichen Transmissionsexperimenten zufällig ohne Wiederholung etwa $5 \cdot 10^7$ Ensembles mit je 20 Transmissionsmessungen gezogen.

Die Materialien sind aus pragmatischen Gründen gewählt: Sie sind leicht zugänglich und maschinell gut bearbeitbar. Darüber hinaus sind es Materialien die technisch angewendet werden. Gerade für diese Materialien soll letztlich auch die kalibrierte Simulation funktionieren. Die Abbildungen 4.2 und 4.3 zeigen $\bar{\zeta}$, jeweils normiert auf die größte mittlere Signifikanz, welche über alle *getesteten* Transmissionsexperimente hinweg aufgetreten ist.

Man beobachtet sowohl für die Monomaterial-Transmissionsexperimente, als auch für die Zweierkombinationen eine klare Präferenz der kleinen Strahlsummen. Präferenz in dem Sinne, dass die entsprechenden $\bar{\zeta}$ im Vergleich die größten Werte aufweisen und deshalb als Bestandteil von A gewählt werden sollten. Abgesehen von methodisch bedingtem Rauschen (man führt hier einen randomisierten Test durch) zeigen die Daten den oben ohne Begründung angenommenen deterministischen Zusammenhang: der randomisierte Test führt also zu einem systematischen Vergleich der möglichen Transmissionsexperimente, obwohl die Anzahl der getesteten A deutlich kleiner ist, als der Binomialkoeffizient 4.8. Hin zu großen Transmissionslängen bzw. Strahlsummen zeigen die $\bar{\zeta}$ ein Sättigungsverhalten. Für das hier gezeigte Beispiel lässt sich die Parameterwahl des SSP also treffen: Es seien zwei Stufenkeile aus Al und POM gewählt, wobei die Stufendicken bis maximal 1 cm bzw. 3 cm ausreichend sind.

Letztlich ist das Ergebnis dieses Tests erwartbar, kleine Strahlsummen führen zu Zeilen in A mit numerisch größeren Einträgen, was letztlich in größeren Singulärwerten resultiert. Es sei nochmals erwähnt, dass hier im Ensemble getestet wurde. Die berechneten Signifikanzen gelten unter der Randbedingung, dass 20 Transmissionsexperimente durchgeführt werden sollen. Allerdings kann mittels dieses leicht implementierbaren Verfahrens über das Dickenspektrum der Stufenkeile entschieden werden. Das ist hier ohne Kenntnis der konkreten Form eines Spektrums geschehen.

⁵⁹ Ein technischer Kunststoff.

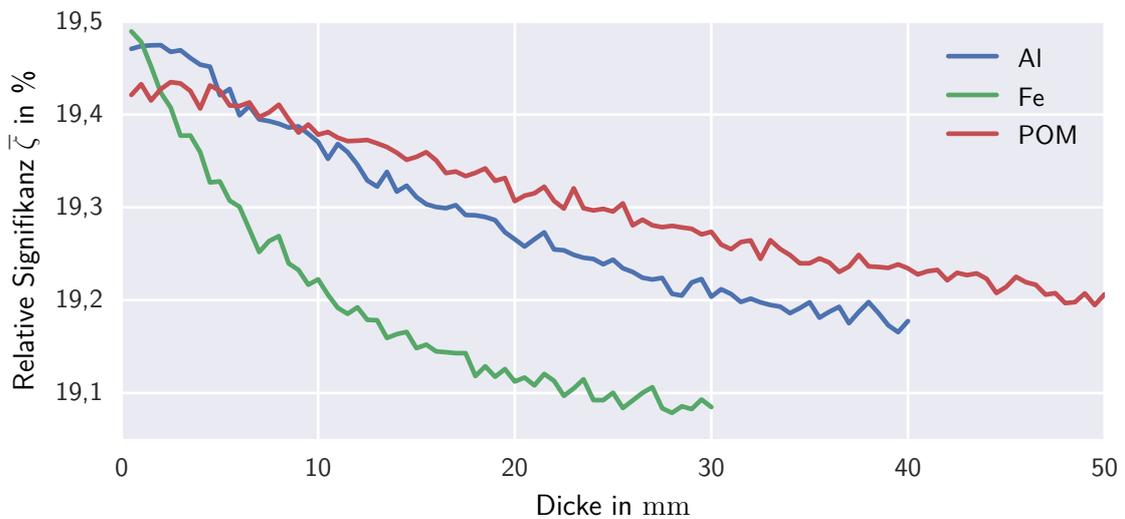


Abb. 4.2.: Signifikanzplot Stufenkeile aus drei Materialien (Al, POM, Fe). In der Grafik sind die Ergebnisse für $\bar{\zeta}$ als Funktion von Material und Dicke dargestellt. Hier sind nur solche Transmissionsmessungen berücksichtigt, bei denen das jeweilige Material einzeln vorkommt. Die zwei-Materialien-Kombinationen sind in Abb. 4.3 dargestellt. Die hier gezeigten Daten gelten für den Fall einer Spektrenschätzung mit 300 keV Maximalenergie. In Anhang B.2 finden sich analoge Abbildungen für 100 keV und 700 keV Maximalenergie (Abb. B.5 bzw. B.7).

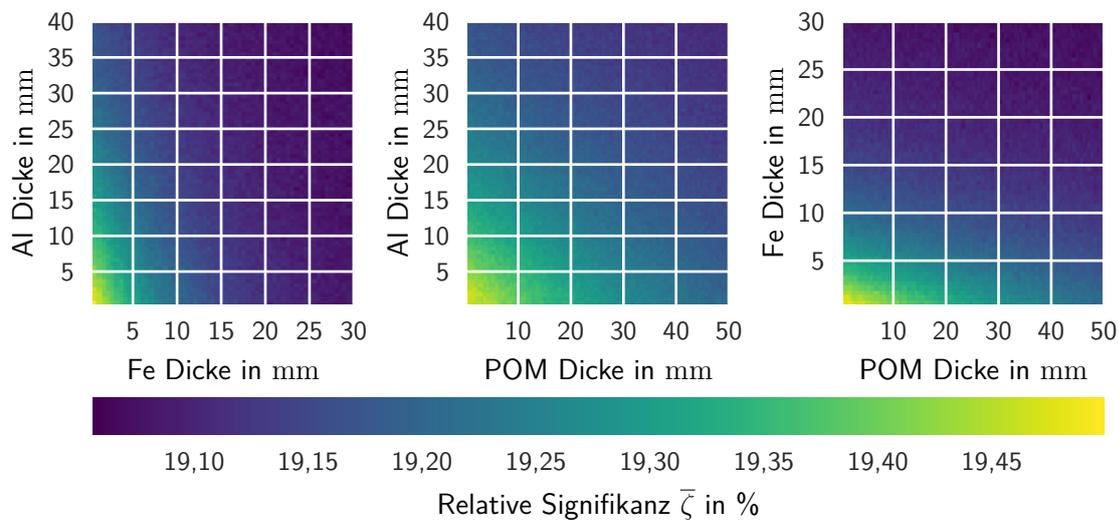


Abb. 4.3.: Die drei Bilder stellen $\bar{\zeta}$ für alle drei möglichen zweier-Kombinationen der drei Stufenkeilmaterialien (Al, Fe, POM) dar. Ein Bildpunkt entspricht der Kombination der am Rand aufgetragenen Materialdicken, sein Farbwert stellt die normierte Signifikanz dar. Diese Abbildung gilt für 300 keV Maximalenergie. In Anhang B.2 finden sich analoge Abbildungen für 100 keV und 700 keV Maximalenergie (Abb. B.6 bzw. B.8).

Wahl des Initialspektrums und experimentelle Validierung des EM-Verfahrens

Der Einfluss der Wahl verschiedener Initialspektren auf das Ergebnis einer Spektrenschätzung, sowie eine experimentelle Validierung der Ergebnisse ist Gegenstand dieses Abschnitts. Dabei stütze ich mich im Wesentlichen auf die Ergebnisse aus der Arbeit von A. Bachmann⁶⁰ in Ref. [6]. Die Ergebnisse dieses Abschnittes beruhen auf einer Serie von Transmissionmessungen an drei Stufenkeilen. Die Stufenkeile bestehen aus einer Aluminiumlegierung, einem Stahl sowie aus POM (Dichte: $1,40 \text{ g cm}^{-3}$). Die Stufendicken und die Legierungszusammensetzung der beiden Metalle ist in den Tabellen B.1, B.2 und B.3 im Anhang zusammengefasst. Sämtliche Transmissionmessungen der Messreihe sind bei einer Maximalenergie von 140 keV durchgeführt worden. Die verwendete Röntgenröhre besitzt ein Target aus Wolfram, sowie ein Röhrenaustrittsfenster aus Beryllium mit unbekannter Dicke. Der Röntgendetektor ist vom Typ „Perkin Elmer XRD 0820“ (Datenblatt Ref. [79]). Es handelt sich um einen indirekt konvertierenden Detektor mit dem Szintillationsmaterial Gadolinium Oxysulfid (Gadox), welches in Pulverform eingebracht ist. Deshalb wird für die Schätzung der Detektorantwortfunktion mit einer reduzierten Dichte von $5,00 \text{ g cm}^{-3}$ (statt $7,40 \text{ g cm}^{-3}$) gerechnet⁶¹. Die Dicke der Pulverschicht ist mit 0,20 mm angegeben.

⁶⁰ Die Bachelorarbeit wurde vom Autor gestellt und betreut.

⁶¹ Die reduzierte Dichte entspricht einer geschätzten Packungsdichte von 68 %

Um einen möglichen Einfluss durch Röntgenstreustrahlung im Experiment zu vermeiden sind sämtliche Transmissionsmessungen dieser Messreihe mit einem zwischen Röntgenröhre und Stufenkeil verbauten Kollimator sowie mit einem möglichst großen Objekt-zu-Detektor Abstand gemessen worden. In Ref. [6] ist ein Vergleich verschiedener Messgeometrien gezeigt. Die beschriebene Vorgehensweise ist diejenige, welche dem geringsten Einfluss durch Streustrahlung erwarten lässt⁶². Jedes Transmissionsexperiment ist einzeln durchgeführt worden.

Damit eine Validierung möglich wird, ist die Messreihe mit verschiedenen quellseitig verbauten Röntgenfiltern wiederholt worden. Die verwendeten Filter bestehen jeweils aus Reinstmaterial und sind mit wohlbekannter Dicke gefertigt. Insgesamt sind fünf Filter verwendet worden: Al 1,00 mm, Cu 0,25 mm und 2,00 mm sowie Ti 0,25 mm und 0,89 mm. Für die folgenden Rechnungen der Filterabsorption wird angenommen, dass das Absorptionsverhalten dieser Filter exakt mittels der tabellierten Schwächungskoeffizienten (Ref. [87]) und dem Lambert-Beerschen Gesetz vorhergesagt werden kann.

Zur Wahl des Initialspektrums:

Die Wahl des Initialspektrums ist je nach Umfang der Vorabinformation über ein CT-System unterschiedlich gut möglich. Es wurde bereits vorausgesetzt, dass die maximale Röntgenenergie grundsätzlich bekannt ist, im Folgenden 140 keV. Man kann davon ausgehen, dass zumindest das Targetmaterial der Röntgenröhre und damit die Lage der charakteristischen Linien bekannt ist. Die Erfahrung zeigt, dass die exakte Röhrengometrie (Anodenwinkel, Austrittsfenster) bei kommerziellen Systemen nicht bekannt ist. Ähnliches gilt für den konkreten Schichtaufbau der (indirekten) Detektoren. Wobei zumindest das Szintillationsmaterial (ohne dessen tatsächliche Dichte) als bekannt angenommen werden kann. Mit dieser Information kann man verschieden aufwändige Initialspektren konstruieren. Im Folgenden werden drei verschiedene Initialspektren und die damit erzielten Ergebnisse verglichen. Dazu wurde jeweils dieselbe Detektorantwortfunktion als „reine“ Gadox Absorptionseffizienz modelliert, wie in Abb. 2.6 dargestellt, und mit einer der drei folgenden Quellspektrumsschätzungen multipliziert.

1. MC-Simulation: Ein Röntgenquellspektrum, welches mittels „ROSI“ Ref. [41] für ein Target in Reflexionsgeometrie erzeugt wurde.
2. TBC-Modell (Tucker Barnes Spektren-Modell): Ein Röntgenquellspektrum, welches mittels des semi-empirischen Modells nach Tucker et al. [98] berechnet wurde (Implementierung aus Scorpius XLab[®]).

⁶² Ein Kollimator zwischen Objekt und Detektor wäre eine optimalere Alternative zu diesem Aufbau, konnte an dem gegebenen CT-System aus mechanischen Gründen jedoch nicht realisiert werden.

3. sin-Funktion: Als einfache Abschätzung eines Quellspektrums dient die Funktion

$$s(E, E_{\max}) = I_0 \sin\left(\frac{E}{E_{\max}}\pi\right) + \sum_{i=\text{char. Linien}} I_i \delta(E - E_i) \quad \text{für } 0 \leq E \leq E_{\max}.$$

Wobei die Intensitäten der charakteristischen Linien gemäß den relativen Peakhöhen wie sie z.B. in Ref. [97] tabelliert sind verteilt werden. Es werden nur die $K_{\alpha 1}$ und die $K_{\beta 1}$ Linie verwendet. Diese Abschätzung eines Röntgenquellspektrums sei als Testfall für eine *schlechte* Wahl verstanden.

Die Gadox-Detektorantwort enthält vor allem die, in den Ergebnissen prominent auftretende Absorptionskante bei etwa 50 keV (bringt diese also als „Vorwissen in die Initialschätzung ein“). Ähnlich verhält es sich mit den charakteristischen Linien, welche in den drei $S(E)$ enthalten sind. Abb. 4.4 zeigt die Ergebnisse einer Spektrenschätzung für die drei verschiedenen Varianten des Startspektrums.

Die integrale Intensität der drei Ergebnisse ist identisch. Das ergibt sich dadurch, dass die Transmissionslänge Null im SSP vorhanden war. Der Iterationsschritt für die entsprechende Zeile des SSP stellt eine Normierung bezüglich I_0 her. Man beobachtet, dass das EM-Verfahren für alle drei Initialspektren in eine ähnliche Lösung konvergiert ist, die noch genauer betrachtet wird:

Zwischen 20 keV und 40 keV ergibt sich ein lokales Intensitätsmaximum, welches nicht in dieser Ausprägung in den erwarteten Quellspektren vorhanden ist. Es kann erklärt werden, wenn man berücksichtigt, dass der Szintillator in diesem Energiebereich hohe Effizienz hat. Es ist also die Ausprägung von $R(E)$ im Systemspektrum. Bemerkenswert ist die Beobachtung, dass dieses lokale Maximum mit nur geringer Abweichung in Form und Intensität im Ergebnis aller drei Schätzungen auftritt. Die Dämpfung der Intensität bei Energien kleiner 15 keV ist mittels der Eigenabsorption des Targets und der Absorption des Austrittsfensters zu erklären und wird in jeder Schätzung identisch wiedergegeben.

Die Absorptionskante des Gadox bei 50 keV korrespondiert mit dem entsprechenden Intensitätssprung in den Systemspektren. Die Höhe dieses Intensitätssprunges ist nahezu identisch bei den beiden realistischeren Initialspektren. Das Ergebnis aus der sin-Funktion zeigt an dieser Absorptionskante und auch an der Absorptionskante des Wolframs bei 70 keV Unterschiede. Die charakteristischen Linien sind in allen drei Spektrenschätzungen verschieden ausgeprägt. Dabei kann man beobachten, dass sich die relative Höhe der Linien zum Bremspektrum (bzw. dem was in $D(E)$ als Kontinuum bleibt) kaum mit der Iterationszahl ändert⁶³. Für $E > 80$ keV flacht das Spektrum bis zur Maximalenergie hin ab. Das ist in allen drei Schätzungen ähnlich wiedergegeben. Es zeigt sich in diesem Energiebe-

⁶³ Man kann in einem Test durch Weglassen der charakteristischen Linien, hingegen feststellen, dass deren Intensität in den Ergebnissen der Spektrenschätzung dennoch auftritt. Es ergibt sich dann im

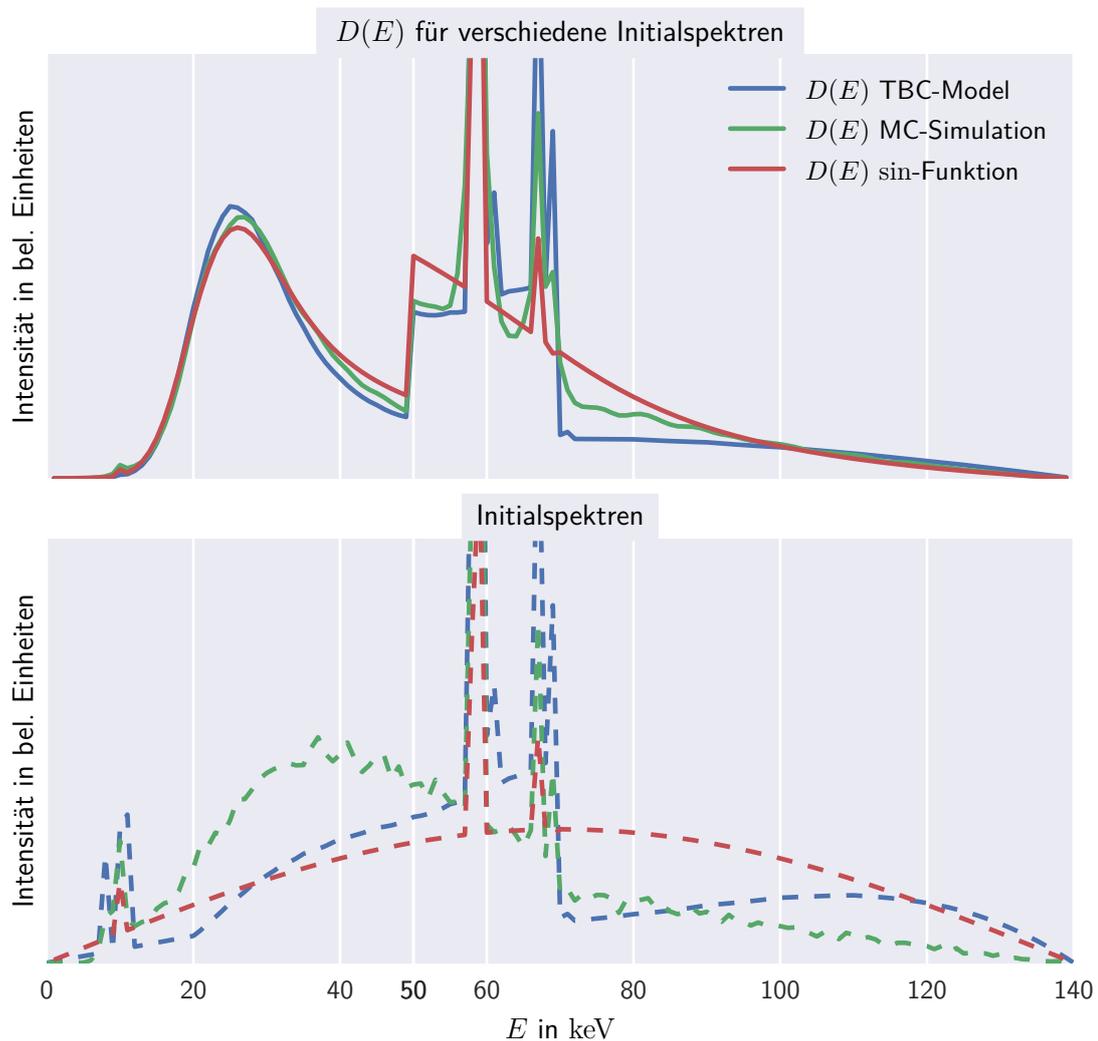


Abb. 4.4.: Einfluss des Initialspektrums auf das Ergebnis des EM-Verfahrens. Die durchgezogenen Linien zeigen das Ergebnis des EM-Verfahrens nach 400 Iterationsschritten. Die gestrichelten Linien stellen jeweils die initialen Quellspektren dar (ohne $R(E)$). Es wurden drei verschiedene initiale Quellspektren gewählt und jeweils mit derselben initialen Detektorantwort eines Gadox-Szintillators multipliziert. Das als TBC-Modell bezeichnete Spektrum ist nach dem semiempirischen Tucker-Barnes Modell für Wolfram-Target Röntgenröhren berechnet, Ref. [98]. Das als MC-Modell bezeichnete Spektrum stammt aus einer Monte-Carlo Simulation einer Röntgenröhre mit Wolframtarget in Reflexionsgeometrie; durchgeführt mit dem Simulationsprogramm „ROSI“, Ref. [41]. Die sin-Funktion (mit addierten charakteristischen Linien) ist der (fiktive) Testfall für sehr wenig Vorabinformation.

reich, dass die MC-Startschätzung am besten mit dem empirischen Ergebnis übereinstimmt.

Dasselbe EM-Lösungsverfahren ist auch bezüglich anderer Problemstellungen angewendet bzw. gefunden worden (Ref. [69] zur Rekonstruktion von Emissionstomographie) und dafür bekannt, dass es hinsichtlich der Initialschätzung schwierig anzuwenden ist [74]. Für die Anwendung für das SSP kann man, entgegen Ref. [74], festhalten, dass es keine große Schwierigkeit ist, ein Initialspektrum festzulegen. Notwendig ist, dass sämtliche Absorptionskanten und charakteristische Linien in der Initialschätzung vorhanden sind⁶⁴. Das liegt daran, dass EM-Verfahren allgemein keine hochfrequenten Anteile in der Lösung „erzeugen“. Der entsprechende Test bezüglich des SSP ist hier nicht aufgeführt, kann aber in Ref. [73] nachvollzogen werden⁶⁵. Die Form und Intensität des Kontinuums, welches hier nicht nur von der Targetgeometrie sondern auch wesentlich vom Szintillator (letztlich sogar dessen optischer Eigenschaften) abhängt, führt, wie hier gezeigt, nicht zu verschiedenen Ergebnissystemspektren, wenn sie im Initialspektrum verschieden gewählt wurde. Demzufolge ist die Wahl eines Initialspektrums unkritisch bezüglich der Lösung SSP: das EM-Verfahren konvergiert jeweils in eine ähnliche Lösung.

Zur Validierung der Ergebnisse:

Ob die besprochene Lösung auch korrekt ist kann nicht einfach geprüft werden. Im Rahmen dieser Arbeit konnte keine komplementäre Methode angewendet werden, um $D(E)$ zu bestimmen. Demzufolge bleibt nur ein indirekter Test zur experimentellen Validierung, indem eine wohlbekannte Veränderung an $D(E)$ vorgenommen und mittels des EM-Verfahrens nachgewiesen wird. Dazu wird der Einfluss eines wohlbekanntes Röntgenfilters auf ein Systemspektrum untersucht. Im Folgenden dient das Systemspektrum, welches mit der MC-Initialschätzung generiert wurde (siehe Abb. 4.4), als Validierungsgrundlage. Dieses, ohne Röntgenfilter, bestimmte Spektrum wird mit den Transmissionsfunktionen $T_{\text{Filter}}(E)$ für die fünf verschiedenen Röntgenfilter der Messreihe multipliziert und anschließend mit den Ergebnissen verglichen, die sich aus den Messdaten mit Röntgenfilter ergeben (Abb. 4.6).

In Abb. 4.6 ist das Ergebnis für den Ti-Filter mit 0,25 mm Dicke dargestellt. Die Schwerpunktenenergie ist eine Maßzahl, um die von den Filtern verursachte Strahlaufhärtung zu beobachten. Anhand der mittels EM-Verfahren bestimmten Verschiebung der Schwerpunk-

entsprechenden Energiebereich ein lokales Maximum, welches aber um ein Vielfaches weniger scharf ist, als die char. Linien.

⁶⁴ Nachdem zumindest das Szintillatormaterial (bei indirekt konvertierenden Detektoren) und das Röhrentargetmaterial meist bekannt sind, kann man die entsprechenden Kanten und Linien der Literatur entnehmen. Der Anwendbarkeit des Verfahrens schadet diese Notwendigkeit also nicht.

⁶⁵ Die Beobachtung bezüglich der nicht gut wiedergegebenen Wolframabsorptionskante (gemeint ist der Sprung direkt rechts der K-Linien bei etwa 70 keV) bei dem Initialspektrum mit sin-Funktion deutet das auch an.

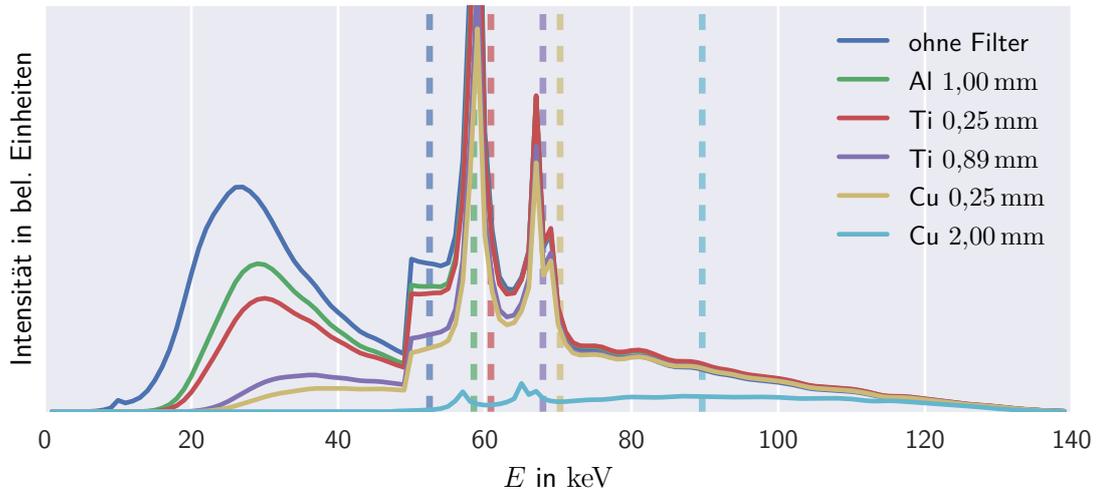


Abb. 4.5.: Ergebnisse der Spektrenschätzung für eine Messreihe mit verschiedenen Röntgenquellfiltern. Die vertikalen, gestrichelten Linien markieren jeweils die Schwerpunktenenergie des zugehörigen Systemspektrums. Man beobachtet die erwartete Aufhärtung der Röntgenquellspektren, welche sich in die hier empirisch bestimmten Systemspektren fortsetzt. Die Schwerpunktenenergien bzw. deren Verschiebung durch Aufhärtung sind in Tab. 4.1 zusammengefasst.

tenergie, im Vergleich zur theoretischen Erwartung, kann die experimentelle Validierung für die Filterserie durchgeführt werden.

Tab. 4.1.: Verschiebung der Schwerpunktenenergien durch den Einsatz von Röntgenfiltern in keV.

Initialspektrum	Filtermaterial Dicke in mm	Al 1,00	Cu 0,25	Cu 2,00	Ti 0,25	Ti 0,89
MC-Modell	$D(E)_{\text{ohne Filter}} \cdot T_{\text{Filter}}(E)$	4,0	14,9	23,8	6,7	18,5
	$D(E)_{\text{mit Filter}}$	5,9	17,7	39,0	8,2	15,3
	Absolutdifferenz	1,9	2,8	15,2	1,5	3,2
TBC-Modell	$D(E)_{\text{ohne Filter}} \cdot T_{\text{Filter}}(E)$	4,1	15,0	24,0	6,8	18,5
	$D(E)_{\text{mit Filter}}$	5,8	17,8	39,0	8,1	15,4
	Absolutdifferenz	1,7	2,8	15,0	1,3	3,1

Tabelle 4.1 listet die entsprechenden Verschiebungen der Schwerpunktenenergien. Dazu wird zusätzlich geprüft, ob sich eine Abhängigkeit bezüglich des Initialspektrums beobachten lässt (bezüglich der beiden realistischen Quellspektrenmodelle). Bezüglich der Verschiebung

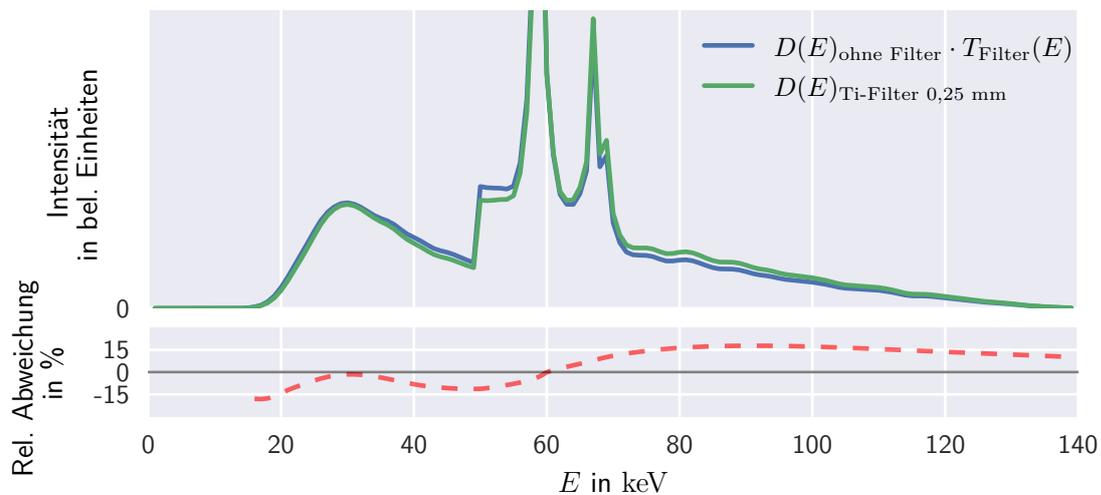


Abb. 4.6.: Experimentelle Validierung eines EM-Ergebnisses. Indem ein durch einen Röntgenfilter aufgehärtetes Systemspektrum auf zwei verschiedenen Wegen bestimmt wird, kann ein quantitativer Vergleich gezogen werden. Der Graph zeigt das Systemspektrum mit MC-Initialspektrum aus Abb. 4.4 welches durch Multiplikation mit der Transmissionsfunktion eines 0,25 mm dicken Titanfilters aufgehärtet wurde. Dadurch kann ein direkter quantitativer Vergleich zu dem Systemspektrum vorgenommen werden, welches durch einen an der Röntgenröhre angebrachten Ti-Filter aufgehärtet wurde. Die rote, gestrichelte Linie unten zeigt die relative Abweichung der beiden Spektren.

der Schwerpunktenenergie stellt man keine wesentlichen Unterschiede zwischen den verschiedenen Initialspektren fest. Das deckt sich mit der Beobachtung aus letztem Abschnitt. Mit Ausnahme der 2 mm Cu-Filter Messung ist die Verschiebung der Schwerpunktenenergie jeweils bis auf wenige keV genau wiedergegeben. Das ist im Sinne einer experimentellen Validierung des EM-Verfahrens ein gutes Ergebnis, wenn man gegenüberstellt, dass die Energieabstbreite 1 keV war und die Methode an sich keinen Zugang zur Angabe einer Energieauflösung bietet. Die größere Abweichung bei 2 mm Cu-Filter lässt sich damit begründen, dass die zugrundeliegenden Transmissionsmessungen wegen sehr kleiner Primärintensität bereits stark fehlerbehaftet sind. Dieser Filter absorbiert viel Intensität und die Röntgenröhre des verwendeten CT-Systems wurde bereits am Leistungslimit betrieben.

Spektrenschätzung aus MC-simulierten Transmissionsdaten und weitere Fehlerbetrachtung

In realen Messdaten ist grundsätzlich Quantenrauschen sowie Rauschen aus anderen Rauschquellen, wie etwa der Detektorelektronik, enthalten. Demzufolge muss das EM-Verfahren auch darauf hin untersucht werden, wie sich die stochastischen Fehler der Transmissionsmessungen in das Ergebnis fortpflanzen. Eine solche Fehlerbetrachtung wird in diesem Abschnitt an einem Beispiel durchgeführt. Dazu soll auch die Möglichkeit bestehen, einen systematischen Fehler zu erkennen. Weil es sich um ein ML-Verfahren handelt, benötigt man eine Initialschätzung. Es ist nicht ausgeschlossen, dass auch unter idealen Bedingungen („gute“ Messdaten und „korrekte“ Initialschätzung) ein systematischer Fehler entsteht.

Um ideale Testdaten zu erhalten wird in diesem Abschnitt auf eine Reihe von MC Simulationen zurückgegriffen. Dazu sind die Stufenkeile aus Aluminium und Eisen (in der Simulation als Reinstmaterial) mit dem MC-Simulationsprogramm „ROSI“ modelliert worden. Die Stufendicken sind Tab. B.3 zu entnehmen. Die beiden Keile sind auf einem virtuellen Flachbilddetektor 90° zueinander gedreht abgebildet, siehe Abb. 4.7. Der Flachbilddetektor ist als idealer energieintegrierender Detektor mit 256×256 Pixeln ausgeführt. Jede der $16^2 = 256$ Transmissionsmessungen wird auf einen Bereich von etwa 10×10 Pixeln abgebildet. Nachdem der virtuelle Detektor fehlerfrei ist, bedeutet das, dass jedes Transmissionsexperiment in einer einzelnen simulierten Radiographie 100 mal durchgeführt wurde. Die MC-Simulation ist mehrfach durchgeführt worden. Dabei ist die Zahl der Primärphotonen variiert, um verschieden stark ausgeprägtes Quantenrauschen in den Radiographien zu erhalten. Nachdem es sich um einen idealen MC-simulierten Detektor handelt, kommt tatsächlich nur Quantenrauschen vor. Anstelle der simulierten Photonenzahl wird das SNR im ungeschwächten Bereich angegeben, um die verschieden starken Rauschanteile zu quantifizieren, weil diese Maßzahl auch aus realen Messdaten leicht ermittelt werden kann. Das SNR im ungeschwächten Bereich ist das maximal mögliche SNR der jeweiligen

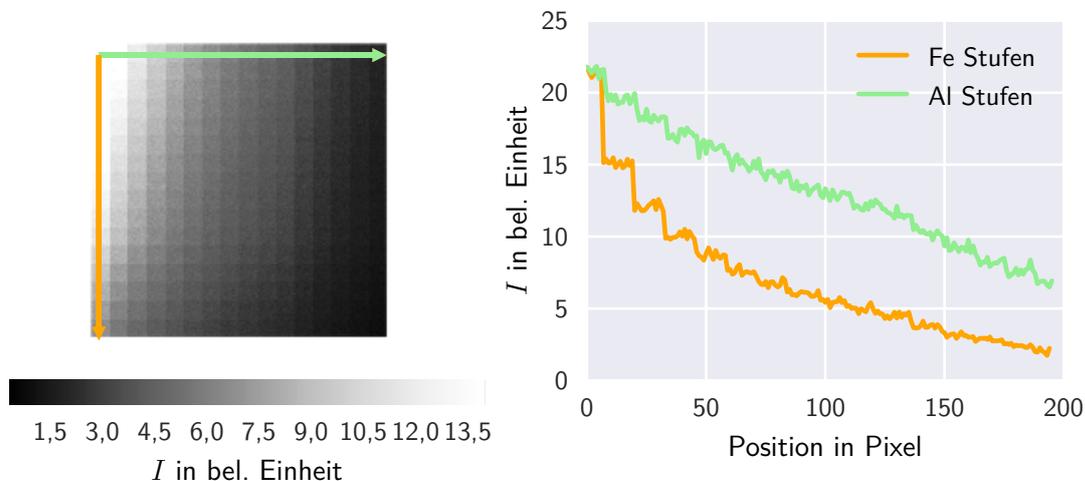


Abb. 4.7.: Die Abbildung zeigt die Radiographie aus einer MC-Simulation (durchgeführt mit dem Simulationsprogramm „ROSI“, Ref. [41]) und Linienprofile. Hier wurde ein idealer energieintegrierender Detektor (jedes Photon deponiert seine gesamte Energie im Detektorpixel auf den es trifft) simuliert. Im Anhang (Abb. B.9) ist zum Vergleich eine Radiographie mit einem realistischeren energieintegrierenden Detektor gezeigt (jedes Photon deponiert die Energie welche im Szintillator in optische Photonen umgewandelt wird).

Radiographie.

Für die virtuelle Röntgenquelle ist ein Wolframanoden-Spektrum $S^{W,300\text{keV}}(E)$ mit einer Maximalenergie von 300 keV gewählt worden. Das verwendete Spektrum stammt aus einer früheren MC-Simulation. Damit ist $D(E) = S^{W,300\text{keV}}(E) \cdot E$, also die Lösung des SSP, bekannt. Dabei wurde eingesetzt, dass für einen idealen energieintegrierenden Detektor $R(E) = E$ gilt.

Abb. 4.7 zeigt eine MC-simulierte Radiographie sowie Profillinien entlang der Keilstufen.

Mittels des *Bootstrapping*-Verfahrens (gemeint ist die Resampling Methode, wie sie von Efron in Ref. [29] publiziert wurde) kann eine Fehlerabschätzung des Systemspektrums durchgeführt werden. Das Verfahren funktioniert hier so: Aus den jeweils 100 Realisierungen der 256 verschiedenen Transmissionsexperimente werden randomisiert⁶⁶ sehr viele verschiedene Realisierungen der 256 Transmissionsexperimente erzeugt (hier $3 \cdot 10^6$) und jeweils ein Systemspektrum bezüglich jeder der Realisierungen bestimmt. Die Menge der Ergebnisse für jedes Energiebin ist jeweils näherungsweise Normalverteilt⁶⁷. Als Abschätzung der

⁶⁶ Hier immer: *Ziehen mit Zurücklegen*.

⁶⁷ Das ist eine Eigenschaft der Bootstrapping-Methode. Das folgt letztlich aus dem Gesetz der großen Zahlen.

stochastischen Fehler ist die Standardabweichung aller Ergebnisse verwendet. Das Ergebnis der Spektrenschätzung ist das arithmetische Mittel aller einzelnen Spektrenschätzungen. In Abb. 4.8 ist das Ergebnis der Spektrenschätzung, gemeinsam mit der Fehlerabschätzung aus dem Bootstrapping und der tatsächlichen Lösung dargestellt. Alle Initialspektren (auch die für die einzelnen Bootstrappingschritte) waren identisch. Es wurde hier jeweils die Lösung als Initialspektrum gewählt. Aus dem oben vorgestellten Verfahren zur Parameterwahl folgt, dass die Transmissionsmessungen mit kleiner Absorption signifikanter für das Ergebnis sind. Um die Auswirkung dessen auf die Ergebnisse beobachten zu können ist die Spektrenschätzung und Fehlerbetrachtung einmal mit und einmal ohne die signifikantesten Transmissionsmessungen durchgeführt worden („ausgedünnter Datensatz“). Dadurch kann obiges Verfahren zur Parameterwahl nochmals überprüft werden. Dazu sind alle Transmissionsmessungen aus dem Datensatz ausgeschlossen, welche nur ein Material haben oder deren summierte Transmissionslänge kleiner als 6 mm ist. Beide Ergebnisse sind gemeinsam in Abb. 4.8 dargestellt. Man beobachtet, dass das Fehlerintervall für den ausgedünnten Datensatz im Bereich zwischen 40 keV und 140 keV größer wird. Ein ähnliches Bild ergibt der Vergleich zwischen Schätzungen aus Radiographien verschiedenem SNR. Erwartungsgemäß beobachtet man, dass das Fehlerintervall kleiner wird, wenn die Radiographie weniger Rauschanteil hatte.

Man stellt jedoch auch fest, dass es zwischen der Lösung und der Spektrenschätzung Abweichungen gibt, die größer sind als durch die Fehlerabschätzung erklärbar. Es gibt also eine systematische Abweichung zwischen dem Ergebnis der Spektrenschätzung und der tatsächlichen Lösung. Wobei die größten hier auftretenden Abweichungen bei 90 keV relativ etwa 10 % betragen.

Die systematischen Abweichungen können zwei Ursachen haben. Zum einen kann man nicht völlig ausschließen, dass die MC Simulation einen Fehler enthält. Es gibt eine Reihe von mehr oder weniger gut steuerbaren Approximationen, die ein solches Simulationswerkzeug verwendet. Im Hinblick auf die Simulation von CT-Systemen mit Primärenergie < 10 MeV haben Kiunke et al. einen Vergleich der beiden MC-Werkzeuge ROSI und Geant4 vorgenommen (Ref. [60]) und kommen zu dem Schluss, dass die Ergebnisse weitestgehend vergleichbar sind. Es können sich allerdings Unterschiede durch die verwendeten Materialdatenbanken ergeben, vor allem wenn die Röntgenstreuungseffekte einzeln betrachtet werden⁶⁸. Die Implementierung in sämtlichen Details zu prüfen kann für diese Arbeit nicht gewährleistet werden. Ein vergleichbarer Test unter Verwendung von Transmissionsdaten aus einer analytischen Simulation (durchgeführt mit Scorpius XLab[®]) ohne Rauschanteil zeigt keine systematische Abweichung die sich nicht durch Rundungsfehler erklären ließe (Ref. [6]).

⁶⁸ Hier wurden letztlich dieselben Materialdatenbanken die Kiunke et al. [60] verglichen haben für die Implementierung des EM-Verfahrens verwendet. Hier allerdings die Implementierung aus Ref. [87]

Zum anderen war die Iterationszahl hier recht hoch gewählt (400 Iterationen), sodass es möglich ist, dass das EM-Verfahren wegen numerischer Unzulänglichkeiten divergiert ist. Letztgenannter Fehler konnte durch eine systematische Untersuchung für kleinere und größere Iterationszahlen jedoch ausgeschlossen werden. Es liegt keine Abhängigkeit von der Iterationszahl vor. Konkret getestet wurden Iterationszahlen zwischen 90 und 600.

Ohne den Ursprung des systematischen Fehlers restlos aufklären zu können, kann man festhalten: Bezüglich der für diesen Abschnitt interessierenden Frage nach den stochastischen Fehlern, deren Ausprägung auch eine Aussage über die Stabilität des EM-Verfahrens an sich enthält lässt sich feststellen: Die Fortpflanzung des Quanten- bzw. Detektorrauschens in das Ergebnis einer Spektrenschätzung führt im Rahmen realistischer $\text{SNR}(I_0)$ Werte zu mittleren, stochastisch bedingten Fehlern von wenigen Prozent. Insbesondere wenn Flächendetektoren eingesetzt werden kann durch Mittelwertbildung über benachbarte Pixel, die zum selben Transmissionsexperiment gehören, das SNR maximiert werden, sodass das SSP für typische CT-Systeme mittels dem EM-Verfahren lösbar ist.

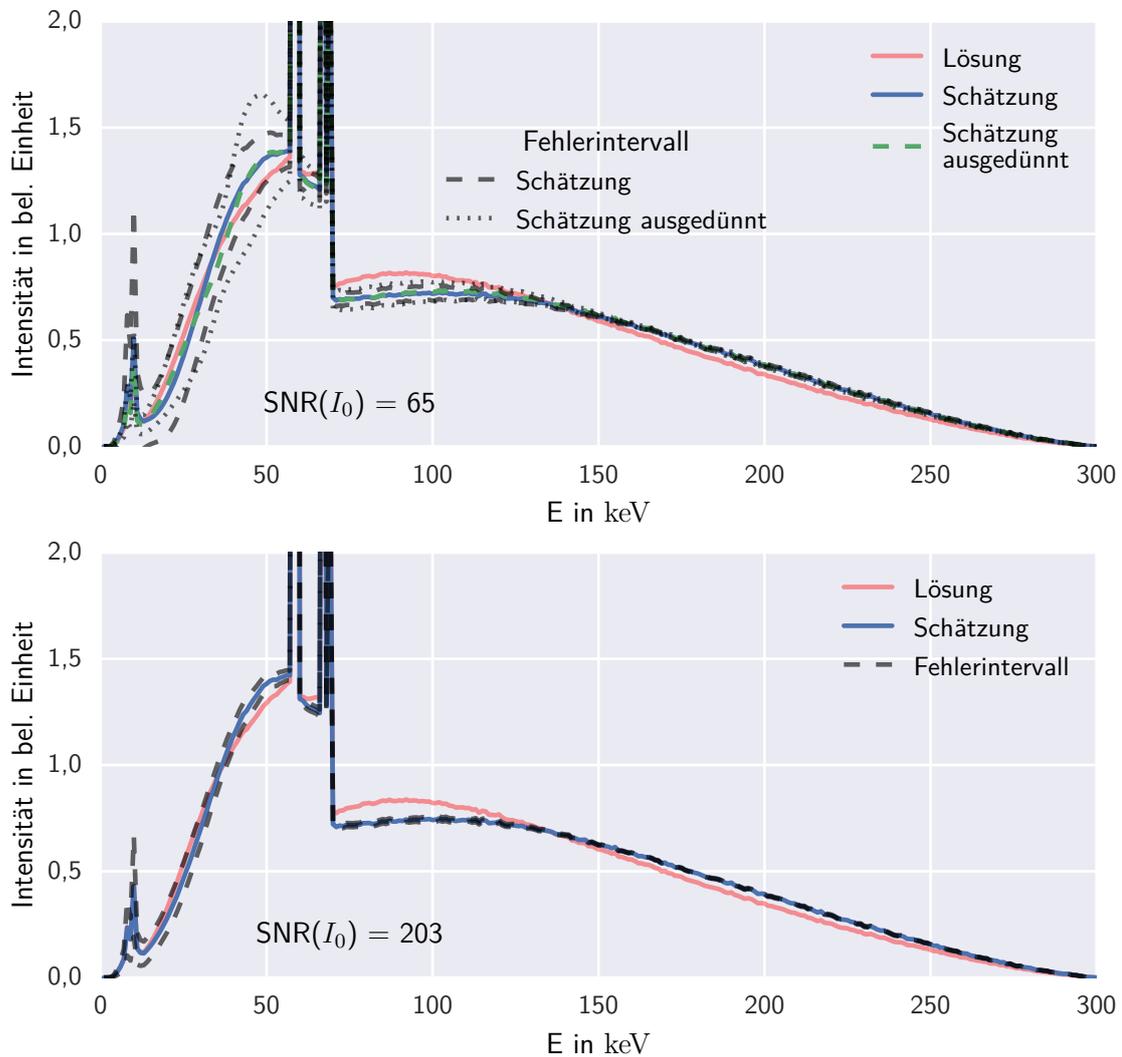


Abb. 4.8.: Bootstrapping basierte Fehlerabschätzung für die Spektrenschätzung aus verschiedenartigen Transmissionsdaten. Die Grafik oben zeigt das Ergebnis für eine Radiographie mit $SNR(I_0) = 65$ für zwei verschiedene Parameterwahlen des SSP. Blau dargestellt (mit Fehlerintervall breit gestrichelt) ist das Ergebnis welches aus der vollen Datenmenge (256 Transmissionsmessungen) erzeugt wurde. Grün dargestellt (mit Fehlerintervall klein gestrichelt) ist die Spektrenschätzung aus einer Transmissionsdatenmenge, bei der die signifikantesten Transmissionsmessungen fehlen. Also das Ergebnis nach einer schlechten Parameterwahl. Die untere Grafik zeigt die Spektrenschätzung aus der vollen Datenmenge bei wenig Rauschanteil in der Radiographie sowie die zugehörige Fehlerabschätzung.

Spektrenschätzung aus Messdaten mit einer Röntgenkamera

Dieser Abschnitt zeigt zwei Spektrenschätzungen für ein CT-System mit einer Röntgenkamera vom Typ „Xeye 2020“ [86] mit CsI-Szintillator (Caesiumiodid). Die beiden hier erzeugten Systemspektren werden im folgenden Abschnitt zur Durchführung kalibrierter Simulationen verwendet. Beide Spektrenschätzungen sind mit derselben Röntgenröhre mit Wolframtarget und Beschleunigungsspannung 100 kV durchgeführt worden. Für eine der beiden Spektrenschätzungen wurde ein 0,30 mm Kupferfilter an der Röntgenquelle eingesetzt. In Abb. 4.9 (bzw. Abb. B.4) ist die Radiographie der Stufenkeil-Kombination sowie die Menge der verwendeten Intensitäten welche für die Spektrenmessung verwendet wurden dargestellt. Die Parameterwahl des SSP für diese Spektrenschätzung ist: 100 keV abgetastet mit 1 keV breiten Energiebins; Transmissionsmessungen an den 90° zueinander verdrehten Stufenkeilen aus POM und Al.

Geometriebedingt konnte nur ein Teil der Stufenkeil-Kombination in einer einzelnen Radiographie abgebildet werden (die letztlich verwendeten 13×13 Kombinationen). Wie oben beobachtet tragen die Transmissionsmessungen bei großer Absorption nur wenig zur Kondition des SSP bei, deshalb sind diese Messungen hier nicht mittels einer weiteren Radiographie bestimmt und dem Datensatz hinzugefügt worden.

In Abb. 4.10 sind die Ergebnisse der beiden Spektrenschätzungen nach jeweils 120 Iterationen dargestellt. Das Initialspektrum, erzeugt mittels einer MC Simulation für $S(E)$ und der CsI-Charakteristik für $D(E)$, hat relativ breite charakteristische Linien die sich ähnlich auch in das Ergebnis fortpflanzen. Hätte man ein $S(E)$ mit höherer Energieauflösung (sodass die Linien aufspalten) gewählt, hätte sich das entsprechend in das Ergebnis des EM-Verfahrens fortgepflanzt⁶⁹. Die Wahl, wie hier geschehen, die Linien der K_α - und K_β -Serie zusammenzufassen soll vermeiden, dass eine Energieauflösung in den Systemspektren auftritt, die gar nicht erreichbar bzw. realistisch ist⁷⁰.

Es sei an dieser Stelle noch ein Test eingeführt der aufzeigen kann, ob eine Spektrenschätzung korrekt konvergiert ist. Der Test soll für solche Fälle, wie hier, tauglich sein, wo außer der Transmissionen keine weiteren Daten vorliegen. Dazu kann man betrachten, wie sich die Lösung des SSP zu den Messdaten verhält. Zweckmäßig ist dabei der Vergleich mit dem Initialspektrum. In Abb. 4.11 sind dazu alle mittels in Glg. 4.4 berechneten Intensitäten gegen die gemessenen Intensitäten aufgetragen, jeweils für das Initialspektrum und für das Ergebnis⁷¹. Das Ergebnis der Spektrumsschätzung ist genau dann im Einklang

⁶⁹ So wie es teilweise in den übrigen Spektren dieses Abschnittes zu sehen ist.

⁷⁰ Letztlich ist die erreichbare Energieauflösung des EM-Verfahrens nicht einfach bestimmbar bzw. muss eine Funktion des Initialspektrums sein.

⁷¹ Es handelt sich also um eine einfache „Einsetzprobe“ in ein lin. Gleichungssystem.

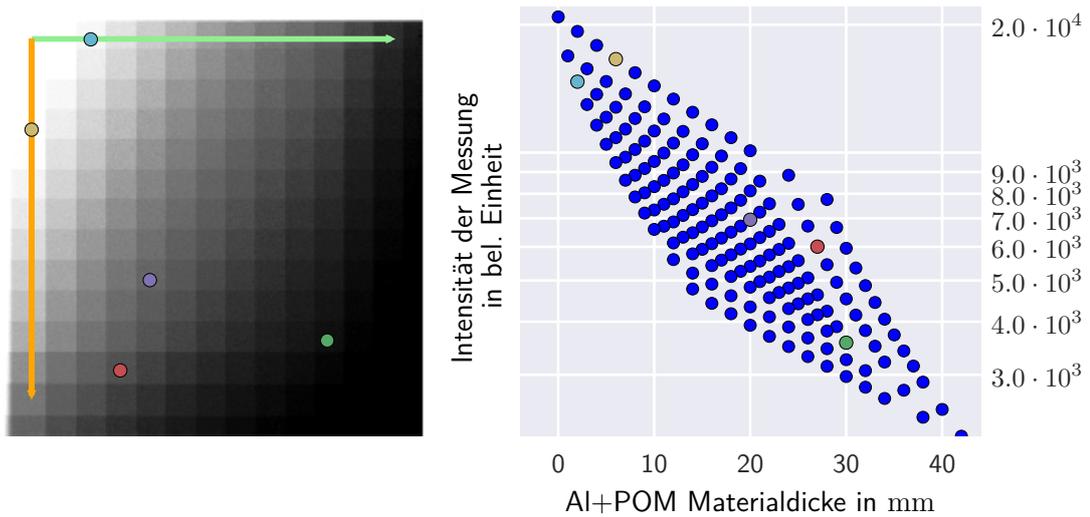


Abb. 4.9.: Die Radiographie (links) zeigt zwei um 90° zueinander verdrehte Stufenkeile. In horizontaler Richtung (grüner Pfeil) nimmt die Stufendicke des Aluminiumkeils zu; in vertikaler Richtung die Dicke des POM-Keils (oranger Pfeil). In der rechten Grafik sind die Intensitäten der 169 einzelnen Transmissionsmessungen (jeweils 13 Dicken pro Material bzw. Keil) als Funktion der summierten Materialdicke dargestellt. Um die Intensitäten zu bestimmen, wurde jeweils über einen 25×25 Pixel großen Bereich der Radiographie gemittelt. Die verschiedenfarbigen Markierungen der linken und rechten Graphik markieren jeweils dieselben Transmissionsmessungen. Ein aus dem Rauschen abgeschätzter Fehler der Intensitätsmessung wäre deutlich kleiner als die Symbolgröße. Die hier gezeigten Daten sind mit einer Röntgenkamera vom Typ Xeye aufgenommen, die Beschleunigungsspannung der Röntgenröhre war 100 kV und es wurde kein Röntgenfilter verwendet. In selber Konfiguration mit einem 0,30 mm dicken Röntgenfilter aus Kupfer wurde eine zweite Messung durchgeführt, siehe Anhang B.2 Abb. B.4.

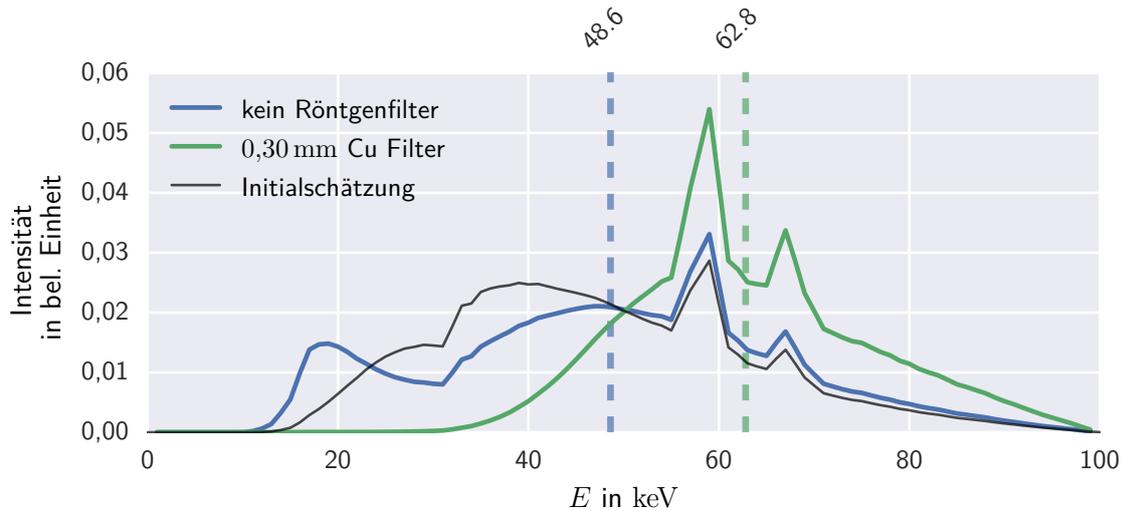


Abb. 4.10.: Ergebnis zweier Spektrenschätzungen nach 120 Iterationsschritten. Die Systemspektren sind für die Darstellung jeweils so normiert, dass ihre Gesamtintensität Eins ist. Die beiden Systemspektren für 100 keV ohne und mit 0,30 mm dicken Cu-Filter, sind aus Stufenkeilmessungen einer CT-Anlage mit einer Röntgenkamera vom Typ XEye und einer Röntgenröhre mit Wolframtarget durchgeführt worden (siehe auch Abb. 4.9 bzw. B.4). Die verwendete Initialschätzung setzt sich aus einer MC-Simulation für $S(E)$ und aus einer Schätzung der Szintillatoreffizienz (wie in Abb. 2.6 für einen CsI-Szintillator gezeigt) für $R(E)$ zusammen. Die Linienbreite der charakteristischen Strahlung ist bereits in der Initialschätzung sehr groß, die hier auftretenden Linien enthalten die Summe der Intensitäten der K_α - und K_β -Linien. Die vertikalen, gestrichelten Linien markieren die Schwerpunktenenergien der beiden Systemspektren.

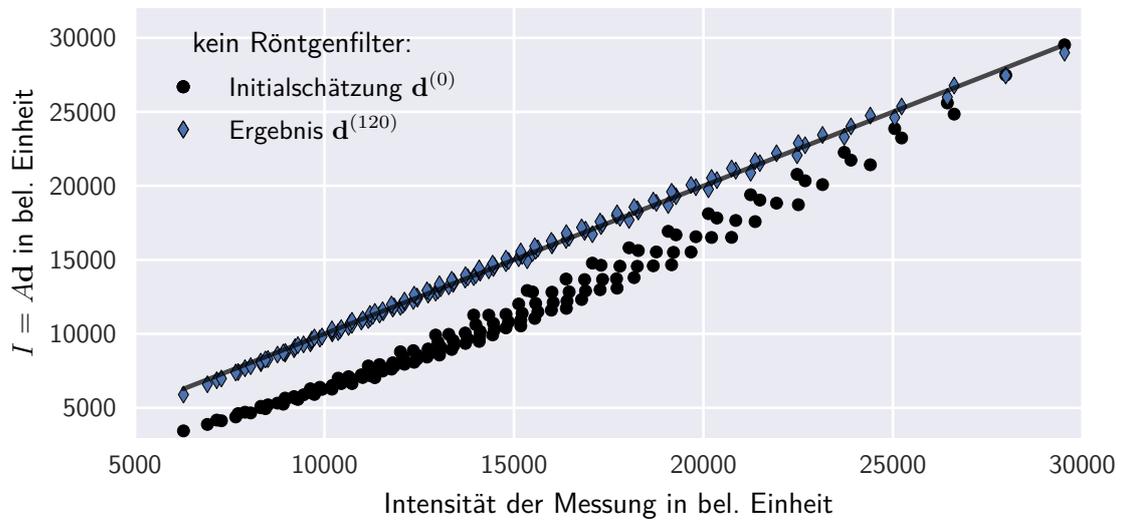


Abb. 4.11.: Lokales Residuum der Transmissionsmessungen. Das Streudiagramm zeigt die Transmissionsintensitäten, welche sich mittels Gleichung 4.3 berechnen lassen als Funktion der zugehörigen, durch Messung bestimmten, Intensitäten. Die Kreise entsprechen dem Ergebnis, welches sich aus der Initialschätzung (siehe Abb. 4.10) ergibt. Die Rauten zeigen das Ergebnis der Spektrenschätzung nach 120 Iterationsschritten. Eine ideale Lösung, bezüglich der gemessenen Datenpunkte, des SSP ist erreicht, wenn die Punkte entlang der Hauptdiagonalen verteilt sind (schwarze Linie). Anhand der Darstellung lässt sich die Qualität des EM-Ergebnisses beurteilen. Zeigen einzelne Datenpunkte oder Serien von Datenpunkten (hier nicht der Fall) deutliche Abweichung von der Diagonalen, so erhält man ein Indiz dafür, dass entweder die Messdaten zueinander inkonsistent sind oder die Spektrenschätzung kein gültiges Ergebnis hat. In diesem Beispiel kann man also erwartungsgemäß feststellen, dass die Initialschätzung nicht zu den Messdaten *passt*, während das Ergebnis gut mit den Messdaten in Einklang zu bringen ist.

mit den Messdaten, wenn die Punkte in diesem Streudiagramm entlang der Identität verteilt sind. Anhand der Darstellung kann man auch ablesen, ob das Ergebnis des EM-Verfahrens die Messdaten besser „erklärt“, als die Startschätzung.

4.4. Bewertung der Ergebnisse und Durchführung einer kalibrierten analytischen Simulation

Ziel der Spektrenschätzung, wie oben beschrieben, ist eine kalibrierte analytische CT-Simulation zu ermöglichen. Ob dies mit der angewandten Methode erreicht wird, kann auch anhand der Ergebnisse einer kalibrierten Simulation überprüft werden. Dazu werden

in diesem Abschnitt zwei kalibrierte CT-Simulationen gezeigt und mit CT-Messungen, welche mit den entsprechenden CT-System durchgeführt wurden, verglichen.

Das CT-System, für das die folgenden Simulationen kalibriert wurden, ist dasselbe an dem die Spektrenschätzungen aus Abb. 4.10 durchgeführt wurden.

Kalibrierte Simulation des Testkörpers „Lochplatte“

In Anhang B.2 ist der Testkörper „Lochplatte“ beschrieben. Es handelt sich um einen Testkörper, welcher in anderer Größe und anderem Material als Normierungskörper vorgeschlagen wurde, Ref. [7]. Die Ausführung dieser Lochplatte aus POM und in verkleinertem Maßstab führt zu einem Testkörper mit insgesamt recht kleiner Röntgenschwächung, für die beiden Spektren aus Abb. 4.10 erwartet man also kein oder nur sehr wenig Strahl-aufhärtungsartefakt. Ein Beispiel, bei dem das anders ist, ist der unten gezeigte PVC-Testkörper. Die CT-Messung und die analytische Simulation sind in Kegelstrahlgeometrie ausgeführt worden mit einer geometrischen Vergrößerung von 1,9 und einem Objekt-Detektor-Abstand von 48 cm. Die Tomogramme haben eine Voxelkantenlänge von 53 μm und sind aus jeweils 800 Projektionen rekonstruiert worden. Die Lochplatte war in Messung und Simulation so positioniert, dass ihr Normalenvektor mit dem Normalenvektor der Rotationsachse zusammenfällt. Die Simulation ist, abgesehen von den verwendeten Systemspektren, idealisiert ausgeführt worden, d.h. keine Simulation von Rauschen, Streuung und Geometriefehlern (insbesondere ein punktförmiger Brennfleck). In Abb. 4.12 sind die Tomogramme der beiden CT-Messungen (mit und ohne Cu-Filter) sowie der beiden kalibrierten Simulationen dargestellt.

Alle vier Tomogramme wurden mit derselben gefilterten Rückprojektion berechnet. Um die Verteilung der rekonstruierten, effektiven Schwächungskoeffizienten $\mu_{\text{eff}}^{\text{Cu,Sim}}$, $\mu_{\text{eff}}^{\text{Cu,Mess}}$, $\mu_{\text{eff}}^{\text{Sim}}$, $\mu_{\text{eff}}^{\text{Mess}}$ von POM beurteilen zu können wertet man das Volumenhistogramm der vier Tomogramme in der Umgebung des Materialpeaks aus, Abb. 4.12. Dazu sind auch die Schwerpunkte der Materialpeaks in Abb. 4.12 berechnet. Zum Vergleich finden sich diese Werte, die relativen Abweichungen jeweils zwischen Messung und Simulation und die Halbwertsbreiten der Materialpeaks in Tab. 4.2.

Man beobachtet erwartungsgemäß, dass $\mu_{\text{eff}}^{\text{Cu,Sim}}$, $\mu_{\text{eff}}^{\text{Cu,Mess}}$ kleiner sind als $\mu_{\text{eff}}^{\text{Sim}}$, $\mu_{\text{eff}}^{\text{Mess}}$. Die relative Abweichung der Schwerpunkte der Verteilungen betragen 1,2 % für das Cu-Filter Spektrum und 2,1 % für das nicht aufgehärtete Spektrum. Die beiden Materialpeaks aus den Simulationen sind den jeweiligen Materialpeaks der Messungen einbeschrieben. Man liest die Halbwertsbreiten der Materialpeaks ab⁷².

⁷² Dabei sei vernachlässigt, dass die Peaks ein wenig schief sind.

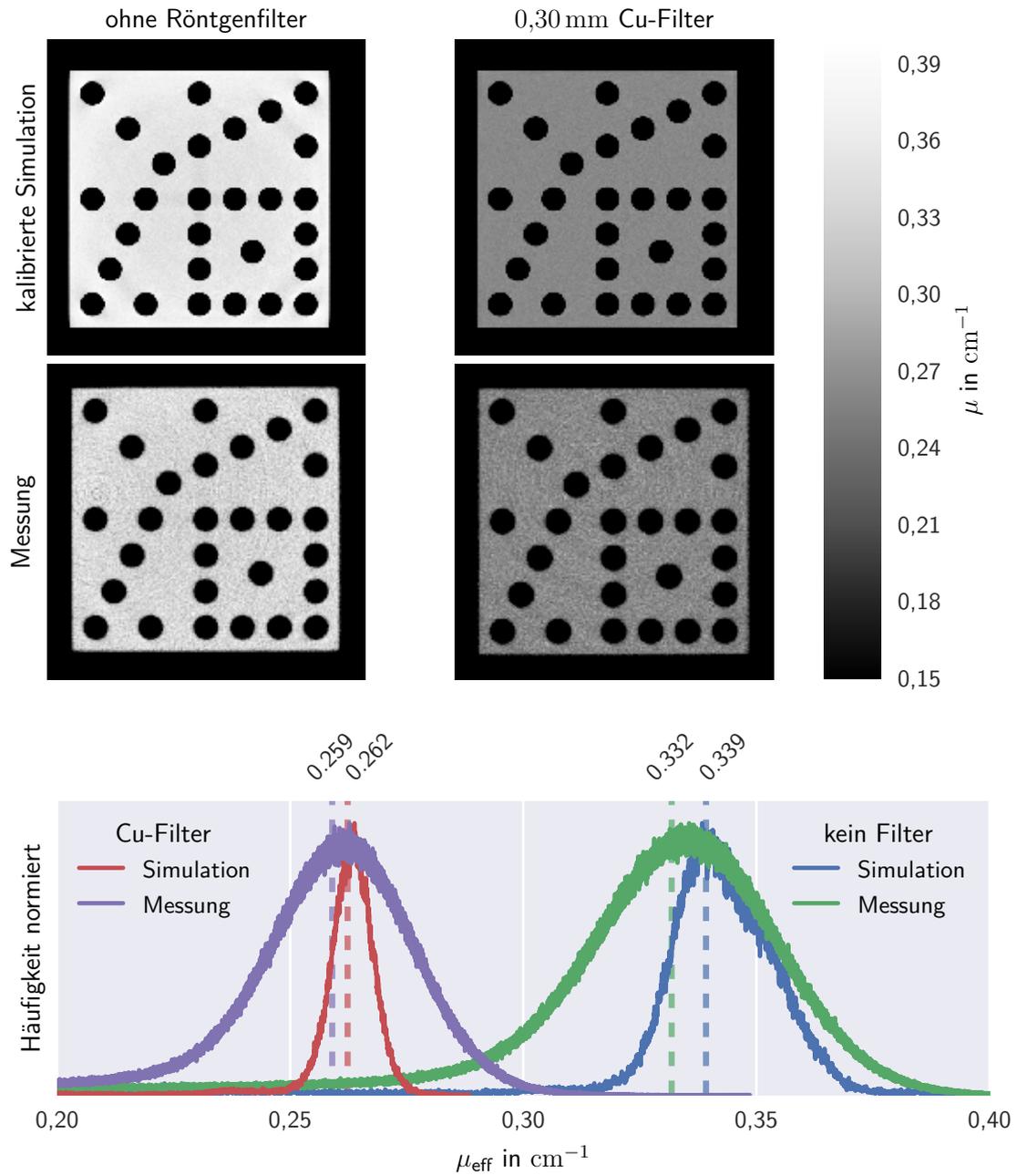


Abb. 4.12.: POM Ausfertigung der ISO-Lochplatte (Kantenlänge 22 mm, Dicke 8 mm, Lochdurchmesser 2 mm), siehe Anhang B.2 (Abb. B.3). Die Histogramme wurden jeweils mit 2^{16} Bins auf dem Wertebereich der Tomogramme berechnet. Für bessere Vergleichbarkeit sind die Histogramme so normiert, dass die Materialpeaks etwa dieselbe Höhe haben.

Tab. 4.2.: Vergleich der Materialpeaks für POM aus den Histogrammen in Abb. 4.12.

Tomogramm	Schwerpunkt μ_{eff} in cm^{-1}	rel. Abweichung in %	Halbwertsbreite μ_{eff} in cm^{-1}
kein Filter Simulation	0,339		0,022
kein Filter Messung	0,332	2,10	0,044
Cu-Filter Simulation	0,262		0,009
Cu-Filter Messung	0,259	1,20	0,034

Die Beobachtung, dass die Materialpeaks der idealisierten Simulation nicht ideal dünn sind, kann durch zwei Effekte erklärt werden. Zum einen erzeugen die numerischen Ungenauigkeiten des Rekonstruktionsalgorithmus *Rauschen*. Diesem Effekt sei hier auch das Teilvolumenartefakt zugeordnet, welches bei der verwendeten Auflösung bezüglich der Oberfläche der Lochplatte auftritt (beides ist nicht in der Abbildung dargestellt). Zum anderen kann man, vor allem bei der Simulation ohne Filterung, eine kleine Rechtsschiefheit des Materialpeaks ablesen. Diese resultiert aus dem Strahlaufhärtingsartefakt, welches allerdings sehr klein ausfällt und im Tomogramm (bei der gewählten Fensterung) nicht erkennbar ist (siehe dazu auch das Tomogramm und Histogramm in Abb. 4.13).

Die Materialpeaks der beiden gemessenen Datensätze sind um das Doppelte bzw. Dreifache breiter als die jeweiligen Peaks der jeweiligen Simulation. Die Peak-Verbreiterung gegenüber der Simulation stammt im Wesentlichen aus dem Rauschen der Röntgenprojektionen, welches sich in das Tomogramm fortpflanzt. Kleinere, zusätzliche Anteile der Verbreiterung lassen sich durch die Ring-Artefakte sowie durch die nicht ideale Ortsauflösung des CT-Systems (im Vergleich zur Simulation) erklären.

Kalibrierte Simulation eines PVC-Testkörpers

Eine Kalibration des Systemspektrums wirkt sich in einer analytischen Simulation nicht nur dadurch aus, dass die Schwächungskoeffizienten korrekt wiedergegeben werden, sondern auch dadurch, dass der durch Strahlaufhärtung bedingte Teil des Cupping-Artefakts nachgestellt werden kann. Dazu soll ein zweiter Testkörper mit dem oben beschriebenen CT-System gemessen und entsprechend simuliert werden. Um einen Testkörper zu erhalten, für den ein Strahlaufhärtingsartefakt zu erwarten ist, kann z.B. auf Metalle (Al) zurückgegriffen werden. Allerdings dürfen die Testkörper dann nicht sonderlich ausgedehnt sein, wenn sie mit dem 100 keV Spektrum noch durchdrungen werden sollen; oder anders ausgedrückt man muss ein „kurzreichweitiges“ Cuppingartefakt erwarten.

Ein Material, welches sich für diesen Test besser eignet, da es eine kleinere Dichte ($1,39 \text{ g cm}^{-3}$) als Aluminium hat aber dennoch eine vergleichbare effektive Atomzahl von

$Z_{\text{eff}} = 13,9$, ist Polyvinylchlorid (PVC). Abb. 4.13 zeigt Tomogramme eines Quaders aus PVC sowie den Vergleich der Histogramme und den zwischen Strahlaufhärtungsartefakt in Messung und Simulation.

Man beobachtet, analog zu der Beobachtung bei dem POM-Testkörper, dass die Schwerpunkte der Materialpeaks nur wenig voneinander abweichen (rel. Abweichung 3,1%). Deutlicher ist der Formunterschied der beiden Materialpeaks. Nachdem die Simulation ohne artefakterzeugende Einflüsse durchgeführt wurde, mit Ausnahme des Röntgenspektrums (und kleinerer Effekte wie oben bereits beschrieben), hat der Materialpeak eine asymmetrische, zu großen Absorptionskoeffizienten hin auslaufende Form. Die Verbreiterung des Materialpeaks der Messung ist in diesem Beispiel im Wesentlichen durch das Rauschen gegeben. Ein Einfluss durch Streustrahlung ist nicht ausgeschlossen, kann jedoch in diesem Energiebereich als ein untergeordneter Effekt angenommen werden. Man beobachtet in den Linienprofilen entlang der Diagonale der dargestellten Schicht sowohl eine kleine systematische Verschiebung der Simulation gegenüber der Messung, als auch einen deutlich steileren Anstieg der Profillinie der Simulation zu den Rändern hin. Letzteres resultiert daher, dass die Simulation eine ideale Ortsauflösung hat, während die Ortsauflösung und damit auch die Wiedergabe der Oberfläche in der Messung (hier insbesondere der Ecken) begrenzt ist⁷³. Sowohl aus dem visuellen Eindruck der Tomogramme, als auch aus dem Verlauf der Linienprofile kann man zusammenfassend ableiten, dass die kalibrierte Simulation die strahlaufhärtungsbedingten Artefakte für den PVC-Quader korrekt wiedergibt.

Fazit

Für die beiden hier gezeigten Beispiele einer kalibrierten Simulation sei abschließend festgehalten, dass

- sich mittels des vorgestellten Kalibrationsverfahrens die Absorptionskoeffizienten in einer analytischen Simulation bis auf wenige Prozent genau vorhersagen lassen.
- die beobachteten Abweichungen (wenn auch nur wenige Prozent) der Simulation waren jeweils $\mu_{\text{eff}}^{\text{Sim}} > \mu_{\text{eff}}^{\text{Mess}}$. Das ist mutmaßlich darin begründet, dass die Schwerpunktenenergie der Systemspektren aus Abb. 4.10 mit ähnlich kleinem Fehler zu klein waren.
- das in diesem Kapitel gefundene Verfahren zur Kalibration einer analytischen Simulation hinreichend ist, um Strahlaufhärtungsartefakte in guter Näherung korrekt zu simulieren.

⁷³ Das Rauschen begünstigt diesen Effekt zusätzlich.

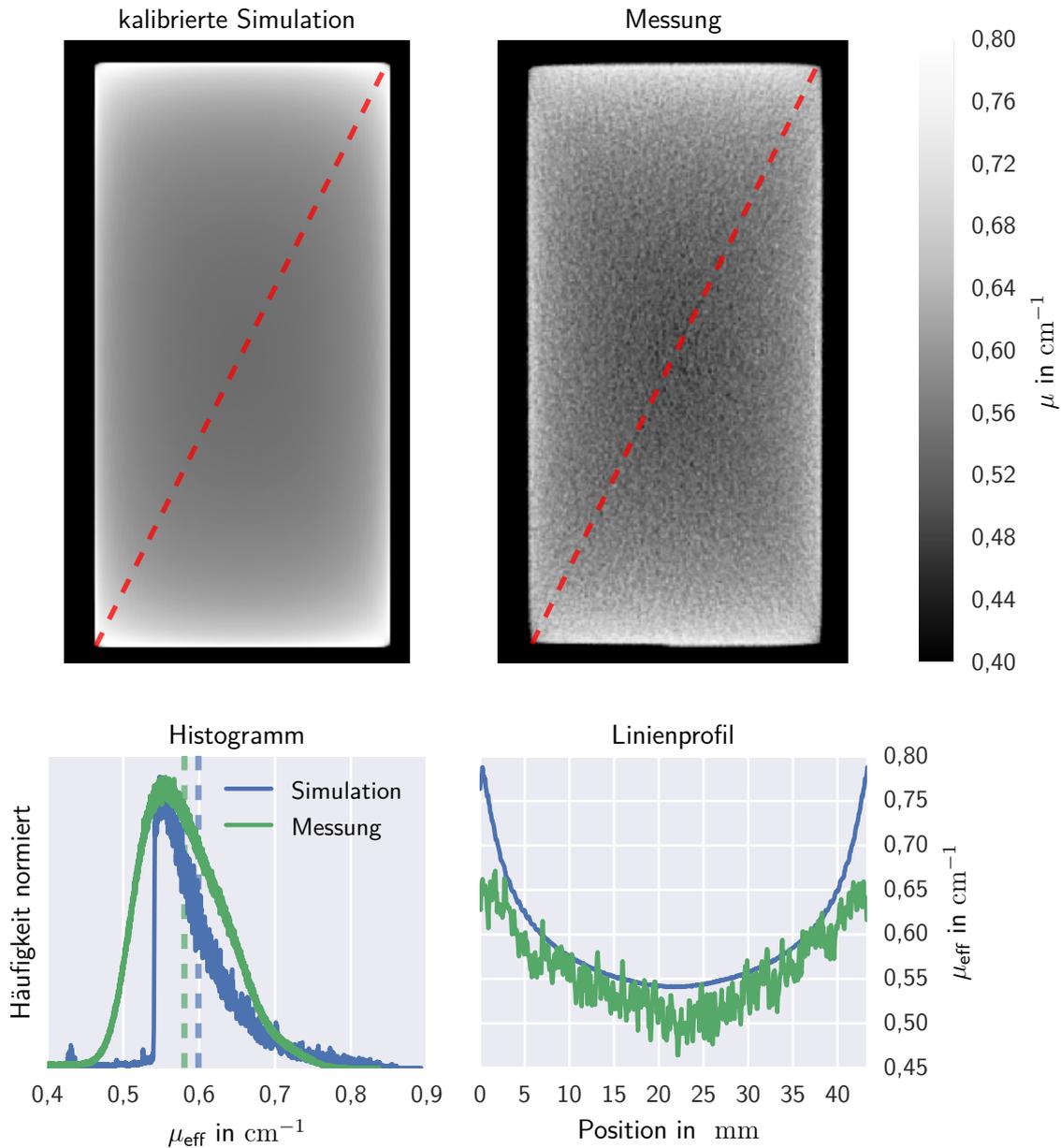


Abb. 4.13.: Simuliertes und gemessenes Tomogramm eines PVC Quaders $4 \times 2 \times 2$ cm. Das Linienprofil (unten rechts) ist jeweils entlang der Diagonale des Quaders entnommen. Die Volumenhistogramme sind jeweils über das gesamte Tomogramm berechnet und ausschnittsweise im Bereich des Materialpeaks gezeigt. Für die Darstellung wurden die Peakhöhen jeweils auf Eins normiert. Die vertikalen gestrichelten Linien markieren die Schwerpunkte der jeweiligen Verteilung: $0,581 \text{ cm}^{-1}$ für die Messung und $0,599 \text{ cm}^{-1}$ für die Simulation.

5. Entwicklung eines analytischen Streumodells

In diesem Kapitel wird ein analytisches Streumodell entwickelt. Das Modell wird die Röntgenstreuung, bestehend aus Compton- und Rayleighstreuung, bis zur zweiten Ordnung berücksichtigen. Wie bei deterministischen oder analytischen Modellen üblich, sind einige Annahmen zu treffen. Die Annahmen bzw. Approximationen stellen sicher, dass einfache analytische Formeln zur Berechnung der Streuintensität gefunden werden können und dass die algorithmische Umsetzung möglichst effizient gelingt. Der numerische Aufwand zu Streustrahlberechnung soll möglichst klein sein⁷⁴. Dazu werde ich einen zusätzlichen Algorithmus einführen, welcher den numerischen Aufwand für ein bereits bestehendes analytisches Streusimulationsmodell reduziert. Letzteres ist, zusammen mit der Rauschfreiheit der analytischen Simulationsdaten, wesentliches Abgrenzungsmerkmal gegenüber MC-basierten Verfahren.

In Abb. 5.1 ist schematisch dargestellt, welche Strahlenbündel (bzw. -pfade) im Folgenden modelliert werden. Erste und zweite Ordnung bezeichnen die Zahl der Richtungsänderungen (Zahl der Streuereignisse) die Photonen eines entsprechenden Strahlenbündels auf ihrem Weg von Quelle zu Detektorpixel erfahren. Die Modellierung wird von Streuorten P_j im Objekt ausgehen, anhand derer die Strahlenpfade (vor allem die Streuwinkel) festgelegt sind. Diese Orte werden im Folgenden als Streuzentren bezeichnet.

⁷⁴ Ich werde durchgehend von *numerischem Aufwand* sprechen und nicht von der, in der Informatik eigentlich gebräuchlichen, Komplexität. Das liegt daran, dass ich dazu nur sehr grobe Abschätzungen gebe, welche nicht exakt dem entsprechen, was man unter Komplexität versteht.

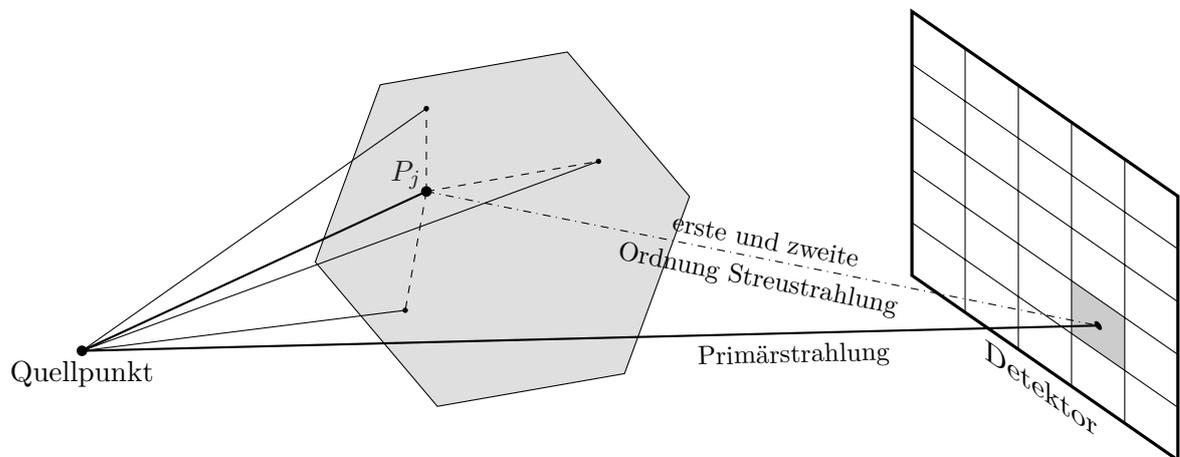


Abb. 5.1.: Schematische Darstellung zum analytischen Streumodell. Die Röntgenintensität, welche ein Detektorpixel erreicht, ist die Summe aus drei Anteilen. Als Primärstrahlung wird der Anteil bezeichnet, der direkt aus der Quelle stammt und im Objekt geschwächt wird. Die Streustrahlung erster Ordnung entsteht an allen Punkten P_j im Objekt. Sie resultiert in Richtung und Intensität aus der Primärstrahlung die im Punkt P_j einfällt und den materialspezifischen Wechselwirkungsquerschnitten. Die Streustrahlung zweiter Ordnung entsteht dadurch, dass in P_j zusätzlich zur Primärstrahlung auch Streustrahlung erster Ordnung aus allen anderen Orten im Objekt einfällt und dort in Richtung Detektor ein zweites Mal gestreut wird.

5.1. Bestandsaufnahme der Methoden zur Simulation von Röntgenstreuung

Die exakteste und am besten akzeptierte Methode Röntgenstreustrahlung zu simulieren ist eine Monte-Carlo-Simulation. Allerdings sind MC-Simulationen für die Simulation der Röntgenbildgebung, insbesondere von CT-Aufnahmen, wegen der enorm großen Rechenzeiten nicht praktikabel. Um mit geringerem numerischen Aufwand Röntgenstreuung zu simulieren, gibt es grundsätzlich zwei verschiedene Ansätze: hybride Verfahren und rein analytische Verfahren.

Die Hybride Streusimulation wurde von Freud et al. [37, 38] sowie von Kyriakou et al. [68] entwickelt und publiziert. Hybride Simulationsmodelle sind zweistufig. Im ersten Schritt wird eine MC-Simulation mit wenigen Primärphotonen ($< 10^5$) durchgeführt. Dabei werden die Wechselwirkungspfade im Objekt aufgezeichnet und gespeichert. Im zweiten Schritt wird an jedem Ort, an dem im ersten Schritt ein Streuereignis stattgefunden hat, ein *Streupunkt* gesetzt. Man wechselt ins analytische Modell. Es werden in Schritt zwei also Strahlenbündel modelliert, nicht einzelne Photonen. Jeder Streupunkt wird als im Objekt liegende Röntgenquelle betrachtet. Jede dieser (Punkt-) Quellen ist eine anisotrop strahlende Röntgenquelle. Aus Schritt eins ist für den jeweiligen Streupunkt bekannt: der Streueffekt sowie die Richtung und die Energie des am Streupunkt einlaufenden Photons. Daraus lässt sich, unter Verwendung der analytischen Modelle für Compton- und Rayleighstreuung unter Berücksichtigung der tabellierten Korrekturfaktoren, die Intensität als Funktion der Streurichtung berechnen. Dies wird für jede Richtung, in der ein Detektorpixel liegt, getan. Die Pfadlänge, die ein solcher Strahl im Objekt zurücklegt, wird mit der entsprechenden Transmission berücksichtigt. Zusätzlich muss, wie im analytischen Modell nötig, das quadratische Abstandsgesetz sowie die effektive Pixelfläche berücksichtigt werden. Dieses hybride Verfahren kann mit Objekten aus mehr als einem Material umgehen. Je nach Objektgeometrie und Primärphotonenzahl im ersten Schritt ist das Simulationsergebnis jedoch nicht frei von Rauschen.

Die rein analytischen Streumodelle basieren auf der Beobachtung⁷⁵, dass in der Bildgebung der Streuanteil eines Bildes keine klaren Objektstrukturen, wie z.B. Kanten, aufweist.

⁷⁵ Die entsprechenden Beobachtungen kann man experimentell machen, indem Radiographien eines Objektes, bei denen ein Teil des Detektors im Schatten eines Total-Absorbers steht, angefertigt werden. Der Absorber befindet sich dann vor dem Objekt im Strahlengang, sodass die Intensität, welche in seinem Schatten detektiert wird, aus der Streustrahlung des beleuchteten Teils des Objektes resultieren muss. Experimentelle Daten dazu finden sich beispielsweise in Ref. [19]. Man kann die Beobachtung auch direkt aus MC-Simulationen ablesen.

Besonders wenn die Röntgenenergien klein sind, bzw. wenn das Objekt nicht sehr nahe am Detektor steht, sind *Streubilder* sehr „verwaschen“. Insofern gibt es drei rein analytische Methoden zur Abschätzung von Streubildern. Die einfachste Methode verwendet gar keine Objektinformation. Es wird eine konstante Menge an Streustrahlung angenommen⁷⁶. Für medizinische Kegelstrahl-CT beispielsweise ist der Quotient aus Streustrahlenenergie zu Primärenergie im Bereich von 2 % bis 120 % gefunden⁷⁷ worden [92]. Unabhängig vom Ort auf dem virtuellen Detektor wird dieser Wert zu jedem Pixel der simulierten Primärstrahlradiographie (Radiographie ohne Streueffekte) addiert. Das Ergebnis ist eine sehr ungenaue Abschätzung der Streustrahlung, die allerdings die Messung der Schwächungskoeffizienten korrigiert.

In diesem Zusammenhang sei der in der Medizinphysik übliche Begriff „Buildup-Faktor“ angemerkt [48]. Dieser wird angewendet, um den streustrahlbedingten Intensitätszuwachs, welcher sich gegenüber der reinen Extinktion ergibt, zu beschreiben.

Ein weiterer Ansatz ist es Streustrahlung durch eine Faltung der Primärstrahlbilder mit einem Filter mit Tiefpass-Charakter darzustellen [72, 88]. Das Modell verwendet bezüglich der Morphologie des Streubildes die Objektinformation, die in der Primärstrahlradiographie vorhanden ist. Um das Streubild zu berechnen wird ein 2D-Faltungskern berechnet und mit der Primärstrahlradiographie gefaltet. Der Faltungskern wirkt glättend auf die Primärstrahlradiographie. Es sei angemerkt, dass diese Methode mit Blick auf den umgekehrten Zweck erfunden wurde: Entfaltung streustrahlenbehafteter, gemessener Projektionen. Nachteil dieses Ansatzes ist, dass die Streuintensitäten nicht von der Reihenfolge der Objekte (bzw. verschiedener Materialien eines Objektes) im Strahlengang abhängen können, weil diese Information in der Primärstrahlprojektion nicht vorhanden ist. Die Streuintensität wird allerdings im Objekt selbst teilweise wieder absorbiert und ist daher durchaus von der Materialreihenfolge abhängig.

Ein weiteres analytisches Streumodell ist die sogenannte *Längenbasierte Streuapproximation (LBSA)*. Die LBSA ist bei M. Franz und S. Kasperl in den Ref. [35, 59] beschrieben⁷⁸. Die Vorgehensweise für die LBSA ist, knapp zusammengefasst, wie folgt. Man geht davon aus, dass das Objekt aus nur einem Material besteht oder es wird ein *effektives Material* zur Berechnung der Streustrahlung angenommen. Durch Quellpunkt und eine Detektorpixelmitte wird eine Gerade definiert. Auf dem Abschnitt dieser Gerade, auf dem sie das Objekt schneidet, wird ein Punkt definiert, welcher als effektiver Quellpunkt der Streustrahlung dient. Ausgehend von der Materialinformation und dem Primärspektrum

⁷⁶ Für diese Methode ist mir keine systematische Untersuchung und Publikation bekannt. Ich kenne sie aus praktischen Anwendungen.

⁷⁷ Bei großer Extinktion besteht das detektierte Signal überwiegend aus Streustrahlung.

⁷⁸ Eine Implementierung der LBSA findet sich in dem Simulationsprogramm Scorpius XLab®.

wird zu diesem Streustrahl-Quellpunkt die Intensität berechnet, welche den (gesamten) Detektor erreicht. Die Streuintensität, ebenfalls von Material und Energie abhängig, wird als kegelförmiges Strahlenbündel modelliert. Der Öffnungswinkel dieses Kegels bestimmt sich aus den differentiellen Streuquerschnitten für Rayleigh- und Comptonstreuung. Der oben beschriebenen Geraden wird damit ein kegelförmiges Strahlenbündel zugeordnet, welches die Streustrahlung repräsentiert, die von den Elementarstreuern entlang der Geraden ausgeht. Die Kumulation dieser Streustrahlenbündel ergibt das Streubild. Die LBSA ist prinzipiell für die Modellierung der Streustrahlung erster Ordnung geeignet, wurde jedoch mittels kleiner Korrekturen im Absorptionsverhalten auch für eine Abschätzung der zweiten Ordnung angepasst. Die Ergebnisse der LBSA werden in Kap. 5.6 mit dem in dieser Arbeit entwickelten Modell verglichen.

Ein weiteres analytisches Streumodell, das im Rahmen dieser Arbeit untersucht wird, entsteht durch eine dreidimensionale Zerlegung des Objektes in kleine Volumenelemente (meist in Voxel), wobei der Schwerpunkt eines jeden Raumabschnittes effektiver Quellpunkt für die Röntgenstreustrahlung ist, welche im entsprechenden Raumabschnitt entsteht. Dieses Modell, welches die Streustrahlung in erster Ordnung modelliert, ist Grundlage für die Arbeiten in diesem Kapitel, weshalb es in Abschnitt 5.3 genauer beschrieben wird.

5.2. Approximationen und Konstruktionsidee für die Entwicklung des Streumodelles

Bevor die konkrete Berechnung der Streustrahlung durchgeführt wird, möchte ich die Approximationen mit den teils pragmatischen Gründen motivieren. Das analytische Streumodell soll mit dem Ziel entwickelt werden, die positiven Eigenschaften, die eine analytische Simulation von der MC-Simulation unterscheidet, zu erhalten. Die wesensgebenden Eigenschaften seien hier nochmals genannt:

die Möglichkeit rauschfreie Simulationsergebnisse zu erhalten und der geringere numerische Aufwand bzw. die deutlich kürzeren Simulationsdauern. Solche Eigenschaften werden nur erreichbar sein, wenn man die Röntgenphysik in geeigneter Weise approximiert und infolge dessen auch mit weniger exakten Ergebnissen auskommt als im MC-Modell.

Das hier zu entwickelnde Streumodell soll die Eigenschaften haben,

- i dass es die gestreute Intensität analytisch bis zur zweiten Ordnung entwickelt.
- ii dass Multi-Material-Objekte simuliert werden können.

- iii dass die Möglichkeit zur Spektren-Kalibration der Simulation erhalten bleibt, wie in Kapitel 4 gezeigt. Das bedeutet, dass sämtliche Intensitätsintegrale nur vom Produkt aus dem Quellspektrum und der Detektorantwort abhängen dürfen.
- iv dass der numerische Aufwand, respektive die Simulationsdauer, deutlich kleiner als bei MC-Simulationen ist. Das soll insbesondere dann gelten, wenn eine CT-Messung im Ganzen simuliert werden soll, das heißt wenn ein kompletter Stapel von Röntgenprojektionen entlang einer Trajektorie berechnet werden soll.

Mit den Punkten i und ii sind zwei Forderungen genannt, welche jeweils eine Erweiterung der LBSA, der faltungsbasierten und der hybriden Verfahren fordern. Mit dem voxelbasierten Streumodell von Freud et al. [36] ist bereits ein Streumodell erster Ordnung vorhanden, welches fähig ist Multi-Materialien zu berücksichtigen. Dieses Modell wird deshalb übernommen, um Streustrahlung in erster Ordnung zu berechnen. Allerdings wird das Modell im Rahmen dieser Arbeit mit einem neuen Algorithmus und mit zusätzlichen Möglichkeiten zur geometrischen Approximation erweitert. Das geschieht, um den numerischen Aufwand weiter zu reduzieren und um Forderung iv zu erfüllen.

Die Forderung nach einer besseren Wiedergabe der zweiten Streuordnung ist in Kapitel 2.1.4 begründet. Punkt iii ist eher von pragmatischem Interesse. Ist es auch mit einer Streusimulation möglich die vorgestellte Kalibrationsmethode zu verwenden, gewinnt die Methode an Relevanz. Wegen des Comptoneffektes ist diese Forderung prinzipiell nicht erfüllbar, denn das (ein- oder zweifach) gestreute Photon hat eine kleinere Energie als das Primärphoton, es gilt $E' < E$. Es kann demnach keine Rechenvorschrift geben, die analog zur Berechnung der Primärintensität in Gleichung 2.34 ist. An die Stelle eines Terms der Gestalt $D(E) \cdot W(E)$, wobei das Systemspektrum $D(E)$ mit einer Streuwahrscheinlichkeitsfunktion $W(E)$ multipliziert wird, muss also ein Term der Gestalt $S(E) \cdot W(E) \cdot R(E'(E))$ treten. Wobei $E'(E)$ den Energieübertrag des Comptoneffektes berücksichtigt⁷⁹ (Glg. 2.13). Dieser Forderung wird deshalb zunächst keine weitere Beachtung geschenkt. Man kann, als Abschätzung der Comptonstreustrahlung in einer kalibrierten Streustrahl-Simulation, den Comptoneffekt „energieerhaltend“ modellieren, indem man einfach den Energieübertrag ignoriert und den Photonen des gestreuten Strahlenbündels die entsprechende Primärenergie $E' \stackrel{!}{=} E$ zuordnet. Der dadurch induzierte Fehler ist in Abschnitt 5.8 berechnet.

Punkt iv zielt darauf hin, dass das Wissen über eine zu simulierende Trajektorie im Falle einer analytischen Simulation in besonderer Weise genutzt werden kann. Durch Speichern und Wiederverwenden von Zwischenergebnissen (Bildung sogenannter *Lookup-Tabellen*)

⁷⁹ Die Abhängigkeit vom Streuwinkel ist hier der Übersichtlichkeit halber weggelassen. Für die Streuung zweiter Ordnung würde gelten: $S(E) \cdot W'(E'(E), W(E)) \cdot R(E''(E'(E)))$; allerdings werde ich die zweite Ordnung nicht strikt von der ersten abhängig modellieren, also $W'(E'(E)) \neq W'(E'(E), W(E))$.

lässt sich das realisieren. Das ist bei MC-Verfahren konzeptionsgemäß nicht möglich.

Zur Entwicklung des analytischen Streumodells sind folgende Annahmen bzw. Näherungen notwendig:

- Geometrische Exaktheit bei der Berechnung der Streustrahlung ist nur begrenzt nötig. Streustrahlprojektionen enthalten keine scharfen Kanten. Das gilt vor allem in Aufnahme-Geometrien, in denen das Objekt nicht direkt vor dem Detektor platziert ist. Es ist nicht nötig scharfe Materialübergänge, z.B. Objektkanten, in der Berechnung der Streustrahlprojektionen exakt wiederzugeben.
- Die Entwicklung der Streustrahlung bis zur zweiten Ordnung ist notwendig zur Simulation von CT in Kegelstrahlgeometrie im Energiebereich von 30 keV bis 10 MeV. Es genügt außerdem Compton- und Rayleigh-Effekt zu berücksichtigen. Siehe dazu auch die Abschätzungen in Kap. 2.1.4 und die Untersuchungen in Ref. [96], welche diese Approximation rechtfertigen.
- Die Streustrahlung erster Ordnung, aus dem sich die zweite Ordnung Streuung bildet, ist über die Verteilung der Materie um den Streupunkt bestimmbar, und nur dadurch. Dies impliziert die Annahme, dass in der Umgebung eines Punktes, welcher Quellpunkt von Streustrahlung zweiter Ordnung ist, dasselbe Primärstrahlspektrum einfällt, wie an dem Punkt selbst.

Die durch die Näherungen induzierten Fehler werden in Kap. 5.8 untersucht.

Unterteilung des Objektes in Streugebiete und Vorberechnung der Transmissionslängen

Jeder Punkt eines Objektes, der von der Primärstrahlung erfasst wird, ist Quellpunkt P_j von Streustrahlung. Die Intensität und Richtungsverteilung der Streustrahlung ist damit im Allgemeinen eine Funktion der Objektform sowie der Quellposition Q . Um in den beiden folgenden Kapiteln die Integrale über das Objektvolumen in numerische Integrale überführen zu können, werde ich an dieser Stelle einige Bezeichnungen sowie die nötigen Diskretisierungen einführen. Die Vorberechnungen, die dieser Abschnitt einführt, kommen ohne Kenntnis einer konkreten CT Trajektorie aus. Vorberechnet werden alle später benötigten Strahlwege im Objekt. Dadurch wird es möglich, redundante Raytracing Schritte bei der Simulation von Streuprojektionen für eine komplette CT Trajektorie zu vermeiden.

Es sei ein Objekt durch seine Form und Materialzusammensetzung beschrieben. Um Integrale über das Objektvolumen näherungsweise ausführen zu können, wird das Objekt in

N_S Teilvolumina zerlegt. Für jedes Teilvolumen sei dessen Schwerpunktkoordinate \mathbf{P}_j , sein Volumen V_j , sowie das Material im Punkt P_j bekannt. Man nimmt das Material innerhalb des Teilvolumens als konstant an. Für das Material in P_j wird der doppelt differenzielle Streuquerschnitt für Compton- und Rayleighstreuung bestimmt:

$$\frac{d\sigma_C}{d\Omega dE}(P_j) \quad \text{und} \quad \frac{d\sigma_R}{d\Omega dE}(P_j). \quad (5.1)$$

Die Zerlegung ist also durch N_S Tupel $(\mathbf{P}_j, V_j, \frac{d\sigma_{C,R}}{d\Omega dE})$ beschrieben. Für die Zwecke der analytischen Streusimulation habe ich ein Punktgitter der Form

$$\mathbf{P}_j = h\mathbf{a} + k\mathbf{b} + l\mathbf{c} \quad \text{mit} \quad h, k, l \in \mathbb{Z} \quad \text{und} \quad \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3, \quad \text{lin. unabhängig} \quad (5.2)$$

verwendet. Dabei sind nur jene h, k, l zugelassen, für die der zugehörige Punkt P_j im Objektvolumen liegt; die Umgebung des Objektes (Luft) streut in diesem Modell keine Röntgenstrahlung. Ein Punkt P_j wird im Folgenden als *Streupunkt* bzw. *Streuzentrum* bezeichnet. Ein Streuzentrum repräsentiert alle Elementarstreuer (Atome, Moleküle etc.) im Volumen der umgebenden Zelle. Für das Punktgitter aus Glg. 5.2 gilt, dass der Betrag des Spatprodukts gleich dem Zellvolumen ist, also dem Volumen, welches das Streuzentrum repräsentiert $|(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}| = V$. Nachdem die (Elementar-)Zellen eines solchen Punktgitters immer Spate sind, sind die P_j immer die Schwerpunkte der Zelle⁸⁰. Bei Streupunkten nahe der Oberfläche des Objektes kann es vorkommen, dass die Zelle aus dem Objektvolumen heraus ragt. In diesem Fall gilt, dass nur das Volumen berücksichtigt wird, welches im Objekt liegt. Für die Implementierung des Streumodells ist es praktisch, das Tupel $(\mathbf{P}_j, v_j, \frac{d\sigma_{C,R}}{d\Omega dE})$ statt dem oben genannten zu verwenden. Dabei ist $v_j = V_j/V \in [0, 1]$ der einheitenfreie Volumenanteil⁸¹.

Zur Berechnung der gestreuten Röntgenintensität ist es nötig die Transmissionslänge, welche die Strahlenbündel in Materie zurücklegen, zu kennen. Das gilt sowohl für die Primärstrahlung, also von Q zu allen P_j , als auch für die gestreute Strahlung, also von allen P_j zu einem Detektorpixel⁸² D . Es wird (zunächst) nicht unterschieden, ob ein Streuzentrum P_j in erster oder in zweiter Ordnung Streustrahlung emittiert. Q und D sind abhängig von der Trajektorie, es wären demnach $N_S N_P (1 + N_{\text{Pixel}})$ solcher Raytracing Schritte nötig (N_P ist die Anzahl der Projektionen und N_{Pixel} die Pixelzahl). Ein

⁸⁰ Die Zellen sind über das Voronoi-Diagramm des Punktgitters berechnet. Zu einer Zelle gehören alle Punkte $P \in \{(h + \lambda_1)\mathbf{a} + (k + \lambda_2)\mathbf{b} + (l + \lambda_3)\mathbf{c} \mid \lambda_{1,2,3} \in [-1/2; 1/2[\}$

⁸¹ v_j ist nur bei den oberflächennahen Streuzentren von eins verschieden. Es ist somit effizienter nur die von eins verschiedenen v_j zu speichern als tatsächlich alle V_j zu betrachten.

⁸² Es gibt natürlich viele Detektorpixel; um die Schreibweise etwas kürzer zu halten verzichte ich hier auf einen weiteren Index zur Nummerierung der Detektorpixel.

Beispiel: 1024^2 Pixel, 800 Projektionen, 800 Streupunkte ergibt $\sim 6,71 \cdot 10^{11}$ Raytracing Schritte. Diese Anzahl von Raytracing Schritten würde die praktische Anwendbarkeit des Streumodells verhindern, da die Zahl der Rechenschritte (hier sind die Rechenschritte zur Berechnung der Streuquerschnitte und die Energieintegration noch nicht mitgezählt) in der Größenordnung von MC-Simulationen liegt, siehe Kap. 2.4.3.

Unter Anwendung der oben genannten Annahme, dass Geometriefehler in gewissem Umfang erlaubt sind, kann auch die Längenberechnung approximativ ausgeführt werden. Dazu wird für jedes P_j das Raytracing für eine Menge von N_R radialen Halbgeraden ausgeführt und das Ergebnis gespeichert. Man wählt eine diskrete Abtastung der Azimut- und Polarwinkel $\gamma_k = (\phi_k, \theta_k)$ mit $k = 0 \dots N_R$, sodass die Oberfläche der Einheitssphäre möglichst homogen abgetastet wird. Homogen sei in diesem Fall gleichbedeutend damit, dass jeder Strahl denselben Raumwinkel $\Delta\Omega_k = 4\pi/N_R$ aufspannt. Eine solche Abtastung kann beispielsweise über ein sogenanntes Fibonacci-Gitter erreicht werden⁸³. Diese Art der Abtastung erfordert, dass N_R ungerade gewählt wird. In Abb. 5.2 ist eine solche Abtastung dargestellt. Eine Untersuchung über die erreichte Homogenität von Kugelabtastungen mittels des Fibonacci-Gitters findet sich in Ref. [42]. Der dort vorgestellte Algorithmus, in Python umgesetzt, findet sich in Anhang A.1.

Damit ist sowohl eine Diskretisierung des Objektvolumens, als auch eine Diskretisierung aller möglichen radial von einem Streupunkt ausgehenden Halbgeraden H_k gewählt. Mittels dieser Diskretisierungen werden in einem Vorverarbeitungsschritt Daten-Tupel der Form

$$(\mathbf{P}_j, \gamma_k, v_j, \frac{d\sigma_{C,R}}{d\Omega dE}, \mathbf{T}_{\text{Mat}}, \boldsymbol{\mu}_{\text{Mat}}) \quad (5.3)$$

berechnet und gespeichert. Dabei bezeichnet $\mathbf{T}_{\text{Mat}} := (t_{\text{Mat}_A}, t_{\text{Mat}_B}, \dots)$ den Vektor der Transmissionslängen pro Materialklasse auf der Halbgeraden

$$H_k = \mathbf{P}_j + \lambda \cdot (\sin \theta_k \cos \phi_k, \sin \theta_k \sin \phi_k, \cos \theta_k)^T \quad \lambda \geq 0, \quad (5.4)$$

welche durch den Richtungsvektor γ_k festgelegt ist. $\boldsymbol{\mu}_{\text{Mat}} := (\mu_{\text{Mat}_A}, \mu_{\text{Mat}_B}, \dots)$ bezeichnet entsprechend den Vektor der linearen Absorptionskoeffizienten pro Materialklasse. Die Strahlsumme entlang H_k schreibt sich als Skalarprodukt

$$M(\gamma_k) = \langle \mathbf{T}_{\text{Mat}}, \boldsymbol{\mu}_{\text{Mat}} \rangle. \quad (5.5)$$

⁸³ Das Gitter entsteht durch die Abtastung einer um die Kugel gewundenen Spirale in Schritten des *goldenen Winkels*; ähnlich wie das besser bekannte 2D Fibonacci Gitter, welches z.B. die Verteilung der Sonnenblumenkerne beschreibt.

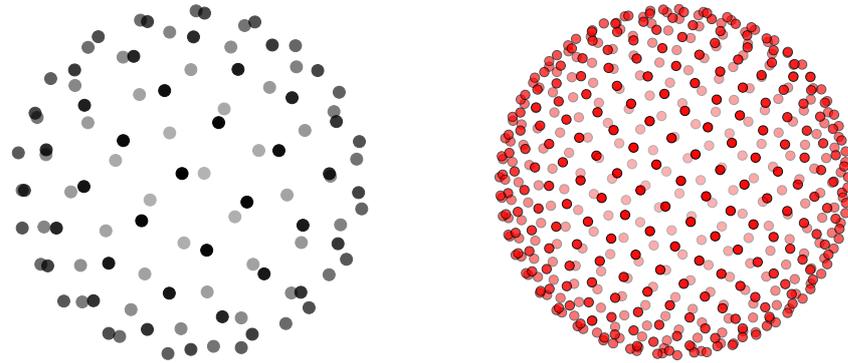


Abb. 5.2.: Regelmäßige Abtastung der Kugeloberfläche mittels eines Fibonacci-Gitters in den beiden Winkelkoordinaten (ϕ, θ) . In Schwarz ist eine Abtastung in 101, in Rot eine Abtastung in 501 Punkten dargestellt.

Für die Streusimulation eines *industriellen* Objektes ist zu erwarten, dass nur wenige verschiedene Materialklassen nötig sind. Luft als Materialklasse wird (für dieses Modell) nur dann berücksichtigt, wenn die Transmissionslänge sich innerhalb des Objektes befindet, beispielsweise für eine Bohrung. Das ist immer dann gegeben, wenn sich entlang einer Halbgeraden eine Luft-zu-Material Grenzfläche finden lässt. Findet sich lediglich eine Material-zu-Luft Grenzfläche, so ist diese die Oberfläche des Objektes; nachdem die Umgebungsluft nicht als Ursprung von Streustrahlung betrachtet wird, endet das Raytracing entlang der Halbgerade an der Objektoberfläche. Abbildung 5.3 veranschaulicht die Diskretisierung des Objektes.

Die Datentupel der Form 5.3 lassen sich unter Verwendung von Indizierungen für wiederkehrende Elemente (wie Abtastwinkel und materialbezogene Informationen) effizient abspeichern und wieder abrufen. Um \mathbf{T}_{Mat} für eine beliebige Richtung γ zu erhalten, die nicht Teil des Fibonacci-Gitters ist, kann eine Interpolation der Daten erfolgen. Für die Implementierung im Rahmen dieser Arbeit wurde eine *next-neighbour* Interpolation verwendet. Im Rahmen der geometrischen Approximationen ist dies ausreichend. Diese kann sehr effizient mittels Suchbaum-Datenstrukturen umgesetzt werden. Hier bietet sich ein *vantage-point tree* (siehe Ref. [99]) an. Unter Verwendung der Großkreismetrik als Abstandsmaß für die γ_k kann mittels dieses Algorithmus ein binärer Suchbaum aufgebaut werden, der schnelle Suche von tabellierten γ_k erlaubt, was für die unten beschriebene Algorithmik notwendig ist.

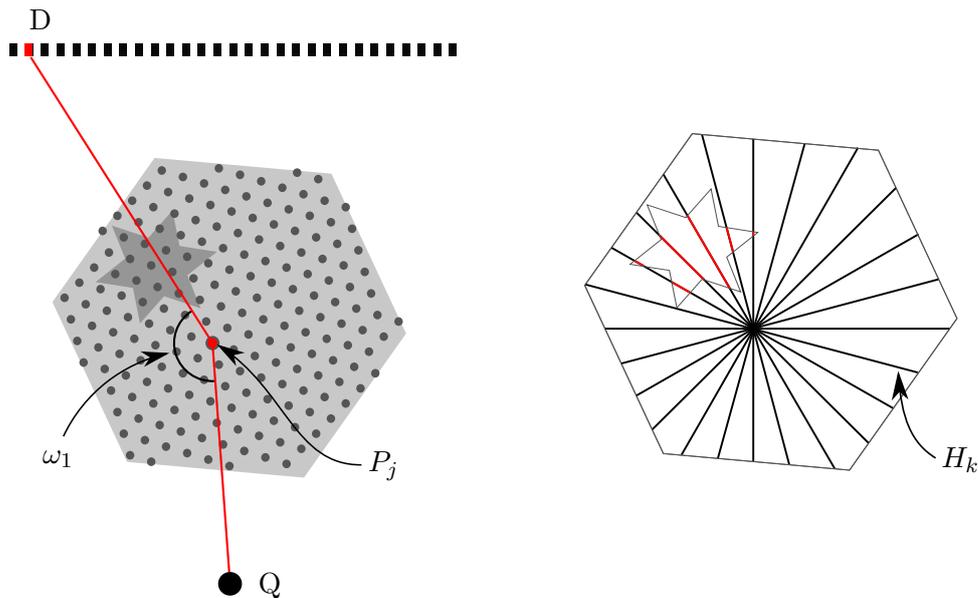


Abb. 5.3.: Schematische Darstellung: Objekt und Streuzentren P_j . Das Sternförmige Gebiet ist ein zweites Material, welches eingebettet ist. D bezeichnet ein beliebiges Detektorpixel, Q den Röntgenquellort. Der rot eingezeichnete Pfad $Q \rightarrow P_j \rightarrow D$ beschreibt den Weg von Photonen, welche in D als Streustrahlung erster Ordnung aus dem Teilvolumen um P_j detektiert werden. Der Streuwinkel erster Ordnung ist damit ebenfalls festgelegt: $\omega_1 = \sphericalangle(QP_jD)$. Rechts ist schematisch das Vorgehen zur Berechnung des Datentupels 5.3 dargestellt: Ausgehend von einem P_j werden für alle Richtungen γ_k Halbgeraden H_k gebildet. Schließlich werden die Wegstrecken, auf denen die Halbgeraden das Objekt schneiden, Materialabhängig summiert (hier angedeutet durch rote und schwarze Streckenabschnitte).

5.3. Modellierung der ersten Streuordnung

Zur Modellierung der Streustrahlung erster Ordnung folge ich den Ausführungen von Freud et al. in Ref. [36]. Dieselbe Formel, die im Folgenden hergeleitet wird, ist allerdings mehrfach publiziert worden, unter anderem zur Berechnung der sogenannten *fixed forced detection* in den hybriden Verfahren zur Streusimulation, Ref. [38, 68]. In den hybriden Ansätzen ist allerdings die Berechnung der Primärstrahlungsintensität durch eine MC-Simulation gegeben.

Eine Erweiterung des Verfahrens von Freud et al. ist, dass ich die Berechnung der T_{Mat} in den oben beschriebenen Vorberechnungsschritt ausgelagert habe. Durch diesen Schritt wird es auch möglich, die Berechnung der Streustrahlung zu beschreiben, ohne sich auf einen Voxeldatensatz als Objektbeschreibung (Form und Material) festzulegen. Es ist möglich, ein Raytracing für allgemeine Objektbeschreibungen (z.B. CAD-Daten, computer-aided design) zu verwenden.

Mit dem Vorschlag, allgemeine Punktgitter als Ursprungsorte der Streustrahlung zu verwenden, führe ich eine Verbesserung des Algorithmus von Freud et al. ein, die sich besonders dann auswirkt, wenn komplette CT-Simulationen durchgeführt werden: Freud et al. verwenden eine Raumzerlegung in Voxel, also ein kubisch primitives Gitter, um die Streuzentren festzulegen. Das kubische Gitter ist so orientiert, dass mindestens ein Gittervektor parallel zu einer der Kanten des Detektors liegt⁸⁴. Diese Konfiguration führt, abhängig vom Verhältnis der Voxelgröße zur Pixelgröße und der geometrischen Vergrößerung, zu einem Moiré-Artefakt. Dieses ist, je nach Position von Quelle und Detektor, verschieden stark ausgeprägt. Das Artefakt haben Freud et al. anhand der Streuprojektionen beobachtet und daraus Empfehlungen für die Wahl der Voxelgröße abgeleitet. Verwendet man Streuprojektionen, die dieses Artefakt aufweisen, in einer CT-Simulation, so pflanzt sich das Moiré-Artefakt auch in das Tomogramm fort. Durch die Einführung der allgemeinen Punktgitter in Abschnitt 5.2 wird es möglich die Gittervektoren so zu orientieren, dass sie nicht mehr parallel zu den Detektorkanten (bzw. zur Drehachse) liegen. Das Moiré-Artefakt verschwindet dadurch zwar nicht⁸⁵, es lässt sich jedoch deutlich mindern. Besonders die Fortpflanzung des Artefakts in das Tomogramm wird geringer, wenn keiner der Gittervektoren parallel zu einer Detektorkante steht (in Standard Kreisgeometrie ist die Rotationsachse parallel zu einer der Detektorkanten). Man kann durch geeignete Wahl der allgemeinen Punktgitter mit weniger Streuzentren auskommen als unter Verwendung des kubischen

⁸⁴ Bei Simulation einer Standard Kreistrajektorie liegt ein zweiter Gittervektor nach je 90° parallel zur zweiten Detektorkante.

⁸⁵ Die Periode des Moiré-Musters vergrößert sich und die Richtung, in der es verläuft, kann verändert werden.

Gitters. Der Vorteil, der sich durch diese Neuerung ergibt, ist eine kürzere Simulationsdauer.

Das Objekt sei in N_S Streuzentren mit deren Schwerpunktkoordinaten \mathbf{P}_j aufgeteilt. Die (isotrop strahlende) Röntgenquelle, welche das Objekt bestrahlt, habe ihren Quellpunkt in Q . Die in erster Ordnung vom Objekt gestreute Röntgenintensität, die ein Detektorpixel D erreicht, ist die Summe

$$I' = \sum_{j=1}^{N_S} I'(P_j) \quad (5.6)$$

aller Intensitäten, welche von den einzelnen Streuzentren P_j zu D gelangen.

Ziel der folgenden Herleitung ist es, die Intensität $I'(P_j)$ der Streustrahlung erster Ordnung, welche von einem Punkt P_j ausgeht und in einem Detektorpixel am Ort D detektiert wird, zu berechnen. P_j ist ein beliebiger Streupunkt im Objekt aus der Menge der Gitterpunkte, siehe Abbildung 5.3.

Die Zahl der Photonen dN , die in P_j gestreut werden, ist das Produkt aus der Zahl der einfallenden Primärphotonen dN_0 und der Streuwahrscheinlichkeit dp :

$$d^2N = dN_0 dp. \quad (5.7)$$

Zwecks Übersichtlichkeit verzichte ich zunächst auf die Notation der Energieabhängigkeit (eigentlich heißt es $I'(P_j, E)$). Die Wahrscheinlichkeit dp , dass ein Photon aus einem Strahlenbündel in einen Raumwinkel $d\Omega$ gestreut wird, ist proportional zum atomaren differentiellen Wirkungsquerschnitt des betrachteten Streuprozesses (Compton- oder Rayleighstreuung), proportional zur Zahl der Elementarstreuer und indirekt proportional zum Querschnitt des Strahlenbündels dS :

$$dp = \frac{dN_{\text{Atome}}}{dS} \frac{d\sigma_{C,R}}{d\Omega} d\Omega. \quad (5.8)$$

Der Wirkungsquerschnitt σ ist eine Funktion des Streuwinkels und der Energie der gestreuten Photonen. Die Anzahl der Elementarstreuer berechnet sich aus dem Volumen, welches geometrisch von P_j repräsentiert wird, sowie aus den Materialkennndaten zu

$$dN_{\text{Atome}} = \frac{\rho dV}{\sum_Z \alpha_Z M_Z} N_A = n dV. \quad (5.9)$$

Die Materialkennndaten sind über die Massendichte ρ , die Massenanteile α_Z aller im Material vorkommenden Elemente und deren molare Masse M_Z gegeben (n bezeichnet die Anzahldichte). N_A bezeichnet die Avogadro-Konstante. Der Primärfluss, welcher P_j erreicht, berechnet sich nach dem deterministischen Simulationsmodell. Es wird also die Absorption sowie das quadratische Abstandsgesetz für die Strecke $\overrightarrow{QP_j}$ berücksichtigt. Vom Streupunkt P_j aus betrachtet, liegt die Röntgenquelle in der Richtung γ_Q und das Detektorpixel in Richtung γ_D . Die hier beschriebenen Strahlenbündel sind in Abb. 5.3 dargestellt.

Man schreibt den Primärfluss im Streuzentrum

$$\Phi_P = \Phi_I \frac{1}{QP_j^2} \exp\left(-\langle \mathbf{T}_{\text{Mat}}, \boldsymbol{\mu}_{\text{Mat}} \rangle \Big|_{\gamma_Q}\right) = \Gamma_{QP} \cdot \Phi_I \quad (5.10)$$

mit Hilfe der Information aus dem Tupel 5.3. Der Primärfluss der Quelle ist Φ_I . Auf ähnliche Weise berechnet sich die effektive Intensität, welche der Detektorpixel D mit der effektiven Pixelfläche $A_{\text{Pixel}} \cos \beta / P_j D^2$ integriert:

$$I'_D(P_j) = \frac{A_{\text{Pixel}} \cos \beta}{P_j D^2} \exp\left(-\langle \mathbf{T}_{\text{Mat}}, \boldsymbol{\mu}_{\text{Mat}} \rangle \Big|_{\gamma_D}\right) \cdot I'_P(\omega_1) = \Gamma_{PD} \cdot I'(\omega_1). \quad (5.11)$$

Dabei bezeichnet $I'_P(\omega_1)$ die Intensität, welche unter dem Streuwinkel erster Ordnung

$$\omega_1 = \arccos\left(\frac{\langle \overrightarrow{QP_j}, \overrightarrow{P_j D} \rangle}{QP_j \cdot P_j D}\right) \quad (5.12)$$

gestreut wird⁸⁶. In Γ_{QP} und Γ_{PD} ist die Abschwächung der Intensität bzw. des Flusses infolge des quadratischen Abstandsgesetzes, der effektiven Pixelfläche sowie der Abschwächung des Objektes von Quelle zu Streupunkt bzw. von Streupunkt zu Pixel zusammengefasst.

Die einfach gestreute Intensität im Punkt P_j lässt sich unter Anwendung von Glg. 2.4 berechnen:

$$I'_{P_j}(\omega_1, E) = \Gamma_{QP} \Phi_I(E) E' p(E, \omega_1). \quad (5.13)$$

E' bezeichnet die Energie der Photonen nach dem Streueignis. Schreibt man nun die Energieabhängigkeiten aus und setzt in Gleichung 5.11 ein, so ergibt sich die Intensität der

⁸⁶ Für eine Implementierung ist es zweckmäßig die Vektoren von P_j zu D und Q in einem Kugelkoordinatensystem mit P_j als Nullpunkt darzustellen. Der Streuwinkel berechnet sich dann mittels Großkreismetrik der beiden Richtungsvektoren: $\omega_1 = 180^\circ - \|\gamma_D, \gamma_Q\|$.

Rayleighstreuung (unter Anwendung von $E = E'$ für den Rayleigheffekt) erster Ordnung zu

$$I'_R(P_j, E, \omega_1) = \Gamma_{QP} \Gamma_{PD} E \Phi_I(E) dN_{\text{Atome}} \frac{d\sigma_R(E, \omega_1)}{d\Omega}. \quad (5.14)$$

Analog berechnet sich die Intensität, die aus dem Comptoneffekt hervorgeht. Mit dem Unterschied, dass die Energie der Sekundärphotonen korrekt berechnet werden muss. Man setzt also zusätzlich die Beziehung 2.13 ein.

$$I'_C(P_j, E, \omega_1) = \Gamma_{QP} \Gamma_{PD} E'(E, \omega_1) \Phi_I(E) dN_{\text{Atome}} \frac{d\sigma_C(E, \omega_1)}{d\Omega}. \quad (5.15)$$

Die gesamte Streuintensität erster Ordnung ist schließlich die Summe

$$I'(P_j, E, \omega_1) = I'_R(P_j, E, \omega_1) + I'_C(P_j, E, \omega_1) \quad (5.16)$$

aus Rayleigh- und Comptonintensität.

5.4. Modellierung der zweiten Streuordnung

Basierend auf dem Modell zur Streuung in erster Ordnung werde ich in diesem Abschnitt ein analytisches Modell herleiten, welches die Streuung in zweiter Ordnung berücksichtigt. Unter der Annahme, dass Streustrahlung nur bis zur zweiten Ordnung relevant ist, ergibt sich die gesamte Streuintensität, welche von einem Körper ausgeht als Summe der ersten und zweiten Ordnung

$$I_{\text{Streuung}} = I' + I'' \quad (5.17)$$

Man verwendet erneut die Diskretisierung des Objektes aus Kap. 5.2. Die gesamte Streuung zweiter Ordnung ist dann die Summe der Streuintensität zweiter Ordnung aller Streuzentren:

$$I'' = \sum_{j=1}^{N_S} I''(P_j). \quad (5.18)$$

In analytischen Röntgensimulationsmodellen werden Strahlenbündel modelliert. Zur Berechnung der zweiten Ordnung Streustrahlung betrachtet man demnach Strahlenbündel,

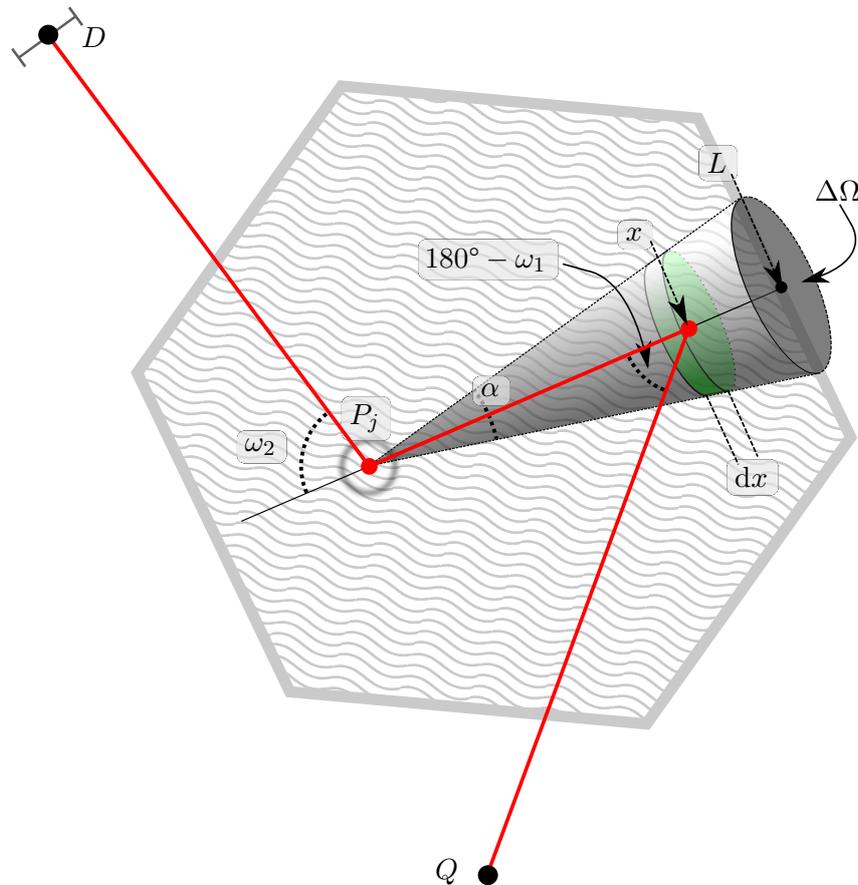


Abb. 5.4.: Die Abbildung verdeutlicht das Modell zur Berechnung der Streustrahlung in zweiter Ordnung und führt einige Bezeichnungen ein. Man betrachtet einen beliebigen Punkt P_j aus einer Menge von Punkten die das Objekt füllen. Streustrahlung erster Ordnung aus einer bestimmten Richtung der Umgebung des Punktes P_j entsteht innerhalb eines kegelförmigen Raumsegments. Die gesamte Streustrahlung erster Ordnung, die P_j erreicht, ist die Summe aus $N_K \in \mathbb{N}$ solchen Raumsegmenten. Der Raumwinkel, den ein solcher Kegel aufspannt, ist $\Delta\Omega = \frac{4\pi}{N_K}$. Der rote Pfad verfolgt einen Röntgenstrahl von der Röntgenquelle Q bis zur Mitte eines Detektorelements D . Der Strahl erfährt zwei Richtungsänderungen. Die Photonen des Strahls werden zweimal gestreut. Die Streuwinkel für die erste bzw. zweite Streuordnung sind mit ω_1 und ω_2 bezeichnet. Streustrahlung erster Ordnung entsteht an allen Orten x entlang der Strecke $\overrightarrow{P_j L}$. L ist der Punkt, in dem die Mittelachse des Kegels die Oberfläche des Objektes durchstößt. Der Punkt x ist von einem zylinderförmigen Volumen umgeben. Höhe dieses Zylinders ist dx , sein Radius berechnet sich aus dem Öffnungswinkel des Kegels und x .

die zwei Richtungsänderungen mit den Streuwinkeln ω_1 und ω_2 aufweisen. Ein solches Strahlenbündel ist in Abb. 5.4 als roter Pfad dargestellt. Die Röntgenstrahlung breitet sich

von der Röntgenquelle Q zu einem beliebigen Punkt x im Objekt aus und wird an diesem Punkt in Richtung P_j gestreut (in erster Ordnung). In P_j wird die Strahlung ein zweites Mal in Richtung des Detektorpixels D gestreut.

Jeder Punkt x des Objektes, außer P_j selbst, kann Quellpunkt von Streustrahlung erster Ordnung sein, welche zu P_j propagiert.

Für die Berechnung der Streustrahlung zweiter Ordnung wird P_j als Streuzentrum zweiter Ordnung bezeichnet und x als Streuzentrum erster Ordnung.

Die gesamte Streustrahlungsintensität zweiter Ordnung, die von P_j ausgeht, ist abhängig von der ersten Streuordnung und damit abhängig von der Quellposition. Letztlich hängt sie also von der Trajektorie ab. Die Abhängigkeit von der Quellposition ergibt sich über die Definition des Streuwinkels erster Ordnung $\omega_1 = \omega_1(Q, x, P_j)$. Die Abhängigkeit vom Ort des Detektorpixels ergibt sich aus $\omega_2 = \omega_2(D, x, P_j)$. Um $I''(P_j)$ zu berechnen, muss man den *Strahlungstransport* entlang aller Pfade

$$\mathbf{Q} \xrightarrow{\text{Transmission}} \mathbf{x} \xrightarrow[\text{Transmission}]{\text{Streuung um } \omega_1} \mathbf{P}_j \xrightarrow[\text{Transmission}]{\text{Streuung um } \omega_2} \mathbf{D} \quad (5.19)$$

$\forall \mathbf{x} \in \{\text{Objekt ohne } P_j\}$

berechnen und die in D resultierenden Intensitäten summieren. Wählt man die x aus derselben Diskretisierung des Objektes wie die P_j , ergibt sich in Gleichung 5.18 eine Doppelsumme über die Streuzentren. Jedes P_j hängt von jedem $x \neq P_j$ ab. Damit wäre der Rechenaufwand für die zweite Ordnung Streustrahlung von der Ordnung $\mathcal{O}(N_{\text{Streuer}}^2)$, während die Berechnung der ersten Ordnung, wie oben beschrieben, mit $\mathcal{O}(N_{\text{Streuer}})$ auskommt. Für eine konkrete Implementierung wäre sogar noch ein zusätzlicher Raytracing Schritt nötig, denn die Transmissionslängen pro Materialklasse für die Strecken $\overrightarrow{xP_j}$ sind in dem vorberechneten Datentupel 5.3 nicht enthalten. Dieser Raytracing Schritt, der $N_{\text{Streuer}}^2/2$ mal ausgeführt werden müsste⁸⁷, wäre besonders „teuer“ im Sinne der Rechenzeit.

Ich will nun zwei Abschätzungen vornehmen, sodass eine analytische Berechnung der zweiten Ordnung Streustrahlung effizienter als $\mathcal{O}(N_{\text{Streuer}}^2)$ Rechenschritte wird und ohne weiteres Raytracing auskommt. Die Information aus den Tupeln 5.3 wird damit weiterhin ausreichend sein.

1. Der Primärfluss, welcher einen Punkt x in der Umgebung von P_j erreicht, ist gleich dem Fluss in P_j . Das soll auch dann gelten, wenn x weit von P_j entfernt ist. Man

⁸⁷ Hin- und Rückrichtung zwischen zwei Punkten haben dasselbe Ergebnis, wenn nur nach der Summe der Transmissionslängen pro Materialklasse gefragt ist, deshalb kann die Hälfte der Raytracing-Schritte gespart werden.

nimmt also an, dass die Transmission auf allen Wegen $Q \rightarrow x$ gleich der Transmission auf dem Weg $Q \rightarrow P_j$ ist, das heißt

$$I(I_0, x, Q) = I(I_0, P_j, Q). \quad (5.20)$$

2. Für alle Punkte x auf einer Strecke $\overrightarrow{P_j L}$ vom Streuzentrum zweiter Ordnung zur Objektoberfläche ändert sich der Streuwinkel erster Ordnung $\omega_1 = \sphericalangle(QxP_j)$ nicht.

Die beiden Näherungen sind umso schlechter erfüllt, je ausgedehnter das Objekt ist, beziehungsweise je größer der Öffnungswinkel ist, wenn Kegelstrahlgeometrie⁸⁸ simuliert wird. Sie ermöglichen jedoch die nun folgende näherungsweise Berechnung von $I''(P_j)$. Die durch die Abschätzungen induzierten Fehler werden in Abschnitt 5.8 untersucht.

Um den Strahlungstransport, wie in Gleichung 5.19 eingeführt, beschreiben zu können, seien drei Richtungsvektoren definiert. Bezüglich dieser wird jeweils das Datentupel 5.3 ausgewertet. Die Richtung von Streuzentrum zweiter Ordnung P_j zum Detektorelement D ist γ_D . Die Richtung von Streuzentrum zweiter Ordnung P_j zum Streuzentrum erster Ordnung x ist γ_k . Die Richtung von Streuzentrum erster Ordnung x zur Röntgenquelle ist γ_x . Die beiden Abschätzungen beinhalten allerdings, dass sich der Strahlungstransport von Q zu x verhält wie der von Q zu P_j (mit Richtungsvektor γ_Q). Es gilt daher $\gamma_x = \gamma_Q$.

Es sei ein festes Streuzentrum P_j gewählt, für welches $I''(P_j)$ zu berechnen ist. Um die Streustrahlung erster Ordnung zu berechnen, wird das Objekt bezüglich P_j in kegelförmige Gebiete zerlegt. Es sei eine Zerlegung des Objektes in N_k Kegel gegeben. Alle Kegelspitzen fallen in P_j zusammen. Ein solcher Kegel ist in Abb. 5.4 eingezeichnet. Im Folgenden sind die x auf den Mittelachsen der Kegel verteilt und repräsentieren jeweils alle Elementarstreuer in einer scheibenförmigen Umgebung innerhalb des Kegels. Die Kegelmittelachsen sind über die γ_k gegeben. Damit betrachtet man also zwei verschiedene Zerlegungen des Objektes. Zum einen die Zerlegung des Objektes in Kegel (bezüglich des gegebenen P_j), wobei die Kegelmittelachsen alle Repräsentanten für Elementarstreuer, die in erster Ordnung streuen, enthalten.

Zum anderen, für die zweite Streuordnung, die Zerlegung bei der die Streuzentren P_j die Elementarstreuer in ihrer Umgebung repräsentieren.

Im Folgenden sei für N_k Richtungen γ_k einer gleichmäßigen Diskretisierung in Kugelkoordinaten je ein Kegel definiert. Die Diskretisierung erfolgt so, wie sie im vorigen Abschnitt für die Berechnung des Datentupels 5.3 definiert wurde. Jeder Kegel spannt dann den

⁸⁸ Oder auch Fächerstrahlgeometrie.

Raumwinkel $\Delta\Omega = 4\pi/N_k$ auf. Der ebene Öffnungswinkel aller Kegel ist

$$\alpha = 4 \arcsin \left(\sqrt{\frac{\Delta\Omega}{4\pi}} \right) = 4 \arcsin \left(\frac{1}{\sqrt{N_k}} \right). \quad (5.21)$$

Die Strecken $\overrightarrow{P_j\vec{L}}\Big|_{\gamma_k}$ sind die Mittelachsen der so definierten Kegel. L bezeichnet den Punkt, an dem die Kegelmittelachse die Objektoberfläche durchstößt.

Die Kegel, so wie in 5.21 definiert, überlappen einander, bzw. es entstehen Lücken zwischen den Kegeln. Es wird aber durch die Definition erreicht, dass in Summe aller Kegel möglichst kein Volumendefekt bei der Zerlegung des Objektes entsteht⁸⁹. Denn aus den Kegelvolumina wird im Folgenden die Zahl der Elementarstreuer berechnet und damit skaliert die Streustrahlintensität linear.

Für jeden Kegel kann man ein effektives Material annehmen⁹⁰. Mit den Daten aus dem Tupel 5.3 berechnet sich die Strahlsumme $M(\gamma_k)$ und die Höhe

$$t(\gamma_k) := \left\| \overrightarrow{P_j\vec{L}}\Big|_{\gamma_k} \right\| = \sum_{\text{Mat}_i} t_{\text{Mat}_i} \quad (5.22)$$

des Kegels. Damit definiert man einen effektiven Schwächungskoeffizienten, eine effektive Anzahldichte im Kegelvolumen und den effektiven differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung um ω_1

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{M(\gamma_k)}{t(\gamma_k)} \quad (5.23)$$

$$n_{\text{eff}} = \frac{1}{t(\gamma_k)} \sum_{\text{Mat}_i} t_{\text{Mat}_i} n_{\text{Mat}_i} \quad (5.24)$$

$$\frac{d\sigma(\omega_1)}{d\Omega} = \frac{1}{t(\gamma_k)} \sum_{\text{Mat}_i} t_{\text{Mat}_i} \frac{d\sigma(\omega_1, \text{Mat}_i)}{d\Omega}. \quad (5.25)$$

Man betrachte einen Ort x auf der Kegelmittelachse $\overrightarrow{P_j\vec{L}}$. Das Koordinatensystem sei so gewählt, dass der Nullpunkt in P_j liegt. x ist damit der Abstand zu P_j . Diese Größen sind entsprechend in Abb. 5.4 eingezeichnet. Für jeden Abschnitt dx auf der Mittelachse des

⁸⁹ Vollständig wird die Kugel natürlich nur durch unendlich viele Kegel abgedeckt.

⁹⁰ Das ist ebenfalls eine Approximation. Diese Approximation wäre nicht nötig, wenn man in Tupel 5.3 die konkrete Abfolge der Transmissionslängen pro Material (z.B. (2 cm Al, 1 cm Fe, 0,50 cm Al)) statt der Summe pro Materialklasse (1 cm Fe, 2,50 cm Al) speichert. Entsprechend könnte eine Erweiterung dieses Modells aussehen.

Kegels sei ein zugehöriges differentielles Volumenelement

$$dV(x) = \pi \tan^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) x^2 dx \quad (5.26)$$

definiert. Ein Streuzentrum x repräsentiert alle Elementarstreuer im zugehörigen Volumenelement. Deren Anzahl pro Abschnitt ist

$$\frac{dN_{\text{Atome}}^x}{dx} = n_{\text{eff}} \frac{dV(x)}{dx}. \quad (5.27)$$

Zunächst sei ein bestimmter Kegel und ein Abschnitt dx (um den Ort x) auf dessen Mittelachse betrachtet. Die Zahl der Photonen, die pro Abschnitt dx in Richtung P_j gestreut werden und P_j erreichen, ist

$$\frac{d^2 N'}{dx} = dN_0 \frac{dp(x)}{dx} T(x). \quad (5.28)$$

Hier bezeichnet N_0 die Zahl der Primärphotonen, die x erreichen, und $T(x)$ die Transmission von x nach P_j

$$T(x) = \exp(-\mu_{\text{eff}} x). \quad (5.29)$$

Die Streuwahrscheinlichkeit am Punkt x pro Abschnitt dx ist

$$\frac{dp(x)}{dx} = \frac{dN_{\text{Atome}}^x}{dx} \frac{d\sigma(\omega_1)}{d\Omega} d\Omega_{P_j} \frac{1}{dS} \quad (5.30)$$

Dabei bezeichnet dS die effektive Fläche des Zylinders im Primärstrahlenbündel und $d\Omega_{P_j}$ ist der Raumwinkel auf den die gestreuten Photonen treffen. Bei weit entfernt stehender Röntgenquelle ist der Primärstrahl ein Parallelstrahl und der Primärfluss am Ort x ist $\Phi_I = \frac{dN_0}{dS}$. Nach obiger Näherung gilt allerdings, dass der Primärfluss in x gleich dem Primärfluss in P_j ist. Bei gegebener Quell-Photonenzahl pro Raumwinkel lässt sich unter Berücksichtigung der Transmission von Q nach x schreiben

$$\Phi_I = \frac{dN_Q}{d\Omega} \frac{1}{QP_j^2} \exp\left(-\langle \mathbf{T}_{\text{Mat}}, \boldsymbol{\mu}_{\text{Mat}} \rangle \Big|_{\gamma_Q}\right). \quad (5.31)$$

Der Raumwinkel $d\Omega_{P_j}$, auf den die Streustrahlung aus dem Zylinder einfällt, lässt sich mittels des Streuquerschnitts für die Streuung zweiter Ordnung berechnen. Dazu berechnet

man den Streuquerschnitt der Elementarstreuer, welche von P_j repräsentiert werden,

$$d\Omega_{P_j} = \frac{1}{x^2} N_{\text{Atome}}^{P_j} \frac{d\sigma(\omega_2)}{d\Omega} d\Omega_D \quad (5.32)$$

für den Streuwinkel ω_2 . $d\Omega_{P_j}$ entspricht also der *Wirksamfläche* der Elementarstreuer, die von P_j , auf der Kugel mit Radius x , repräsentiert werden und in den Raumwinkel des Detektorelements $d\Omega_D$ streuen. Der Raumwinkel, den der Detektorpixel bezüglich P_j einnimmt, schreibt sich (wieder unter Berücksichtigung der Transmissionsstrecke)

$$d\Omega_D = \frac{A_{\text{Pixel}} \cos \beta}{P_j D^2} \exp\left(-\langle \mathbf{T}_{\text{Mat}}, \boldsymbol{\mu}_{\text{Mat}} \rangle \Big|_{\gamma_D}\right) = A_{\text{Pixel}} \cos \beta \frac{T(\overrightarrow{P_j \vec{D}})}{P_j D^2}.$$

Dabei berücksichtigt $A_{\text{Pixel}} \cos \beta$ die effektive Pixelfläche. Für die Zahl der Elementarstreuer in P_j gilt Gleichung 5.9.

Setzt man Glg. 5.32 und Glg. 5.30 in 5.28 ein, so erhält man direkt den Ausdruck für die Photonenzahl nach zweimaliger Streuung und den Strahlungstransport auf der Strecke zwischen den Streuzentren

$$\begin{aligned} \frac{d^2 N''}{dx} &= \Phi_I T(x) \frac{n_{\text{eff}} \pi \tan^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) x^2 dx}{dx} \frac{d\sigma(\omega_1)}{d\Omega} \frac{1}{x^2} N_{\text{Atome}}^{P_j} \frac{d\sigma(\omega_2)}{d\Omega} d\Omega_D \\ &= T(x) \Phi_I \pi \tan^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) n_{\text{eff}} \frac{d\sigma(\omega_1)}{d\Omega} N_{\text{Atome}}^{P_j} \frac{d\sigma(\omega_2)}{d\Omega} d\Omega_D. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Weil ω_1 gemäß der Approximation nicht von x abhängt, ist der einzige verbliebene Faktor, welcher von x abhängt, die Transmission. Nach Integration von Gleichung 5.33 erhält man also die Zahl aller Photonen, die zweimal gestreut wurden, wobei das erste Streuereignis im Kegel k stattgefunden hat. Das Integral über die Transmission ergibt

$$\begin{aligned} \int_0^{t(\gamma_k)} T(x) dx &= \frac{1}{\mu_{\text{eff}}} (1 - \exp(-\mu_{\text{eff}} t(\gamma_k))) \\ &= \frac{1}{\mu_{\text{eff}}} (1 - T(t(\gamma_k))), \end{aligned} \quad (5.34)$$

es hängt also nur von der Höhe des Kegels ab.

Die Intensität am Pixelort für die Streustrahlung zweiter Ordnung kann nun aufgeschrieben werden. Dazu wird, analog zur Vorgehensweise für die erste Ordnung, die Energieabhängigkeit ausgeschrieben. Für den Comptoneffekt muss Glg. 2.13 zweimal nacheinander aufgeführt werden. Es sei $E'' = E''(\omega_2, E'(\omega_1, E))$ mit $E' = E'(\omega_1, E)$, damit erhält man

für zweimal nacheinander Rayleigheffekt

$$I''_{\text{R}}(P_j, E, \gamma_k) = \Phi_I(E) E \frac{d\sigma_{\text{R}}(\omega_1, E)}{d\Omega} N_{\text{Atome}}^{P_j} \frac{d\sigma_{\text{R}}(\omega_2, E)}{d\Omega} A_{\text{Pixel}} \cos \beta \cdot \\ \cdot \pi \tan^2(\alpha/2) \frac{n_{\text{eff}}}{\mu_{\text{eff}}} \frac{T(E, \overrightarrow{P_j D})}{P_j D^2} (1 - T(E, t(\gamma_k))), \quad (5.35)$$

für zweimal nacheinander Comptoneffekt

$$I''_{\text{C}}(P_j, E, \gamma_k) = \Phi_I(E) E' \frac{d\sigma_{\text{C}}(\omega_1, E)}{d\Omega} N_{\text{Atome}}^{P_j} \frac{d\sigma_{\text{C}}(\omega_2, E')}{d\Omega} A_{\text{Pixel}} \cos \beta \cdot \\ \cdot \pi \tan^2(\alpha/2) \frac{n_{\text{eff}}}{\mu_{\text{eff}}} \frac{T(E', \overrightarrow{P_j D})}{P_j D^2} (1 - T(E', t(\gamma_k))) \quad (5.36)$$

und schließlich die beiden gemischten Varianten (Compton-Rayleigh und Rayleigh-Compton)

$$I''_{\text{CR}}(P_j, E, \gamma_k) = \Phi_I(E) E' \frac{d\sigma_{\text{C}}(\omega_1, E)}{d\Omega} N_{\text{Atome}}^{P_j} \frac{d\sigma_{\text{R}}(\omega_2, E')}{d\Omega} A_{\text{Pixel}} \cos \beta \cdot \\ \cdot \pi \tan^2(\alpha/2) \frac{n_{\text{eff}}}{\mu_{\text{eff}}} \frac{T(E', \overrightarrow{P_j D})}{P_j D^2} (1 - T(E, t(\gamma_k))) \quad (5.37)$$

$$I''_{\text{RC}}(P_j, E, \gamma_k) = \Phi_I(E) E' \frac{d\sigma_{\text{R}}(\omega_1, E)}{d\Omega} N_{\text{Atome}}^{P_j} \frac{d\sigma_{\text{C}}(\omega_2, E)}{d\Omega} A_{\text{Pixel}} \cos \beta \cdot \\ \cdot \pi \tan^2(\alpha/2) \frac{n_{\text{eff}}}{\mu_{\text{eff}}} \frac{T(E', \overrightarrow{P_j D})}{P_j D^2} (1 - T(E, t(\gamma_k))). \quad (5.38)$$

Für die beiden letzten Formeln bezieht sich die Comptonenergie E' jeweils auf den Winkel unter dem die Comptonstreuung stattfindet. Die gesamte Intensität der zweiten Streuordnung für einen Kegel in Richtung γ_k ist die Summe der beiden Streueffekte

$$I''(P_j, E, \omega_2(\gamma_k)) = I''_{\text{R}}(P_j, E, \omega_2(\gamma_k)) \\ + I''_{\text{C}}(P_j, E, \omega_2(\gamma_k)) + I''_{\text{CR}}(P_j, E, \omega_2(\gamma_k)) + I''_{\text{RC}}(P_j, E, \omega_2(\gamma_k)). \quad (5.39)$$

Für $\omega_2(\gamma_k)$ gilt $\angle \gamma_k, \gamma_D = \omega_2$. Die gesamte Intensität der zweiten Ordnung im Pixel D ist die Summe

$$I''(P_j, E) = \sum_k^{N_{\text{Kegel}}} I''(P_j, \omega_2(\gamma_k), E). \quad (5.40)$$

5.5. Algorithmus zur Berechnung von Streuprojektionen

In den Kapiteln 5.2, 5.3 und 5.4 sind alle nötigen Ergebnisse enthalten, um eine Implementierung des Streumodells vorzunehmen. Nachdem die Ergebnisse nicht in der nötigen Reihenfolge aufgeführt sind und auch sonst kein Hinweis zum konkreten Ablauf einer Streusimulation gegeben wurde, wird dies hier ergänzt.

Wie bereits erwähnt, können die Datentupel 5.3 in einem einmalig für ein Objekt ausgeführten Schritt erzeugt werden. Der Algorithmus 1 kann verwendet werden, um die Liste dieser Datentupel zu erzeugen und zu speichern. In Algorithmus 2 wird eine solche Liste geladen. Diese Information wird in Algorithmus 2 genutzt, um für eine beliebige Trajektorie die Streuprojektionen zu berechnen. Das Ergebnis von Algorithmus 2 ist dementsprechend die Summe der Streuintensitäten erster und zweiter Ordnung für jedes Detektorpixel. Die folgenden Pseudocodes geben ein „Kochrezept“ für eine konkrete Implementierung des Streumodells, ich habe hier zugunsten der Übersichtlichkeit darauf verzichtet mögliche Nebenläufigkeit sowie algorithmische Vereinfachungen anzugeben⁹¹. Insofern sollen die Pseudocodes nicht als Grundlage einer Implementierung dienen, sondern das Verständnis des in den vorigen Kapiteln ausgeführten Konzeptes erleichtern bzw. ergänzend dazu sein. Die konkrete Implementierung die ich verwendet habe⁹², um die Ergebnisse der folgenden Abschnitte zu erzeugen, ist in python ausgeführt. Nachdem python, vor allem bei den hier notwendigen verschachtelten Schleifen und vielfachen Kopieroperationen nicht besonders performant ist, erübrigt sich eine Diskussion der Rechenzeiten⁹³.

⁹¹ Man kann beispielsweise durch geschickte Zwischenspeicherung der (energieabhängigen) Streuquerschnitte leicht wiederholte Berechnungen vermeiden. Ein Softwaredesign auszuführen ist jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit.

⁹² Der Quellcode ist leider deutlich zu groß, um ihn diesem Dokument sinnvoll anhängen zu können (ca. 1900 Zeilen). Ich habe ihn nach bestem Gewissen daraufhin geprüft, dass er die Formeln des Streumodells korrekt wiedergibt.

⁹³ Dennoch: Die python Implementierung ist bereits deutlich schneller, als die MC-Simulation mit GEANT4 (eine C++ Implementierung).

Algorithmus 1 Vorberechnungsschritt für das Streumodell. Gemäß dieser Prozedur wird das Datentupel 5.3 erzeugt.

```
 $M \leftarrow$  Zahl der Materialklassen im Objekt  
 $N_{\text{Richtungen}} \leftarrow$  Zahl der Richtungsvektoren pro Streupunkt  
for  $P_j$ ;  $j \leftarrow 1$  bis  $N_{\text{Streuer}}$  do  
   $v_j \leftarrow$  berechne Volumenanteil den  $P_j$  repräsentiert  
  Bestimme Material am Ort  $P_j$ ; damit folgt  $d\sigma_{C,R}/d\Omega$   
  for  $\gamma_k$ ;  $k \leftarrow 1$  bis  $N_{\text{Richtungen}}$  do ▷Fibonacci-Kugelabtastung  
    for  $m \leftarrow 1$  bis  $M$  do ▷Materialklassen  
       $T[m] \leftarrow$  Summe der Transmissionslängen für die Materialklasse  $m$   
       $\mu_{\text{Mat}}[m] \leftarrow$  bestimme Zuordnung der Materialklassen zu den  
        tabellierten Absorptionskoeffizienten  
    end for  
  end for  
end for  
return Datentupel Liste ▷Speichere die Liste der Datentupel 5.3
```

Algorithmus 2 Berechnung der Streuintensität. Gemäß dieser Prozedur werden Streuprojektionen für eine CT-Simulation erzeugt.

Require: Datentupel Liste ▷Lade die Liste der Datentupel 5.3

▷ j indiziert die Streuzentren, k die Richtungsvektoren

▷z.B. eine Standard Kreistrajektorie

for Trajektorienposition **do**

$Q \leftarrow$ aktualisiere Quellort

$D_{\text{Mitte}} \leftarrow$ aktualisiere Detektormittelpunkt

for P_j ; $j \leftarrow 1$ bis N_{Streuer} **do**

$\gamma_Q \leftarrow$ berechne Richtungsvektor zur Quelle

$k_Q \leftarrow$ finde $\gamma_k \approx \gamma_Q$ ▷Tupelindex Quellrichtung

for alle Pixel des Detektors **do** ▷die Pixelnormale resultiert aus der Trajektorie

$D \leftarrow$ berechne Pixelmittelpunkt

$\gamma_D \leftarrow$ berechne Richtungsvektor zum Pixel

$k_D \leftarrow$ finde $\gamma_k \approx \gamma_Q$ ▷Tupelindex Detektorrichtung

$\omega_1 \leftarrow$ berechne Streuwinkel erster Ordnung

for Φ_I, E im Quellspektrum **do** ▷Iteriere Energie-Diskretisierung

$\Gamma_{\text{PD}}, \Gamma_{\text{QP}} \leftarrow$ berechne Transmissionen

$I'|_D \leftarrow$ berechne Glg. 5.16 ▷Intensität erster Ordnung für den Pixel D

end for

$\omega_2 \leftarrow$ berechne Streuwinkel zweiter Ordnung

for γ_k ; $k \leftarrow 1$ bis $N_{\text{Richtungen}}$ **do** ▷Fibonacci-Kugelabtastung

$\omega_1^k \leftarrow$ berechne Streuwinkel erster Ordnung ▷Streuwinkel erster Ordnung hängt von γ_k ab.

for Φ_I, E im Quellspektrum **do**

$\mu_{\text{eff}}(E) \leftarrow$ berechne effektiven Schwächungskoeffizient

$\frac{d\sigma_{C,R}(E)}{d\Omega} \leftarrow$ Berechne effektive Streuquerschnitte

$I''|_D \leftarrow$ berechne Glg. 5.39 ▷Intensität zweiter Ordnung für den Pixel D

end for

$I|_D \leftarrow I'|_D + I''|_D$

end for

end for

end for

end for

5.6. Ergebnisse der analytischen Streusimulation

Für zwei Testkörper werden die erste und zweite Ordnung Streubilder gezeigt und quantitativ untersucht. Beides jeweils bei monochromatischer (400 keV) und polychromatischer hochenergetischer Strahlung (MeV Regime). Das streustrahlungsbedingte Artefakt wird im Tomogramm gezeigt⁹⁴. Die Ergebnisse dieses Abschnittes werden in dem Abschnitt 5.7 um einen Vergleich mit der „Goldstandardmethode“, der MC-Simulation, ergänzt.

Multimaterialphantom: Al-Fe-Kugel

Um das hier entwickelte Streumodell zu testen wird ein Multi-Materialien-Objekt untersucht. Nachdem Röntgenstreuung die Bildgebung vor allem dann beeinflusst, wenn hohe Röntgenenergien im Primärstrahl vorliegen und der Primärstrahl stark geschwächt wird, soll das Testobjekt so gestaltet sein, dass dieser Effekt gut beobachtet werden kann.

In Abb. 5.5 ist ein geeignetes Testobjekt (im Folgenden als „Al-Fe-Kugel“ bezeichnet) gezeigt. Es handelt sich um eine Kugel aus zwei aneinander liegenden Halbkugeln aus Aluminium bzw. Eisen, jeweils mit Radius 30 mm. Die Al-Fe-Kugel ist so im virtuellen CT-System positioniert, dass die Rotationsachse in der Ebene liegt, in der sich die Halbkugeln berühren. Durch Rotation der Al-Fe-Kugel (wie bei der Aufnahme einer Standard Kreistrajektorie) erhält man in der Radiographie verschieden starke Überdeckungen der beiden Materialien und kann dadurch die Fähigkeiten des Streumodells testen, Multimaterialphantome zu simulieren. Die Al-Fe-Kugel wurde in der Röntgensimulation in Parallelstrahlgeometrie auf einem $11 \times 11 \text{ cm}^2$ großen Detektor mit 64×64 Pixeln abgebildet (siehe auch die Skizze in Abb. 5.5). Der Detektor ist als idealer energieintegrierender Detektor ausgeführt. Sofern die absoluten Werte verglichen werden sollen, sind die Pixel-Intensitäten als deponierte Energie angegeben.

Sämtliche Simulationen für die Al-Fe-Kugel sind mit monochromatischen Primärphotonen mit der Energie 400 keV durchgeführt worden. Für diese Energie ergibt sich bei maximaler Strahlsumme (das sind 60 mm Eisen für die nicht rotierte Kugel) beinahe totale Auslöschung des Primärstrahls. Man kann also davon ausgehen, dass für die Pixel, die den entsprechenden Bereich der Kugel abbilden, das Gesamtsignal ausschließlich aus Streustrahlung besteht. Die Parameter der Streusimulation sind:

- Zahl der Streuzentren $N_S = 2400$ auf einem kubisch primitiven Gitter verteilt, welches so ausgerichtet ist, dass einer der drei Gittervektoren mit der Vertikalachse des Detektors einen 20° -Winkel einschließt. Ein Streuzentrum repräsentiert etwa 47 mm^3 der Al-Fe-Kugel (insgesamt $113 \cdot 10^3 \text{ mm}^3$).

⁹⁴ Bei einer typischen gefilterten Rückprojektion ohne besondere Artefaktkorrekturen.

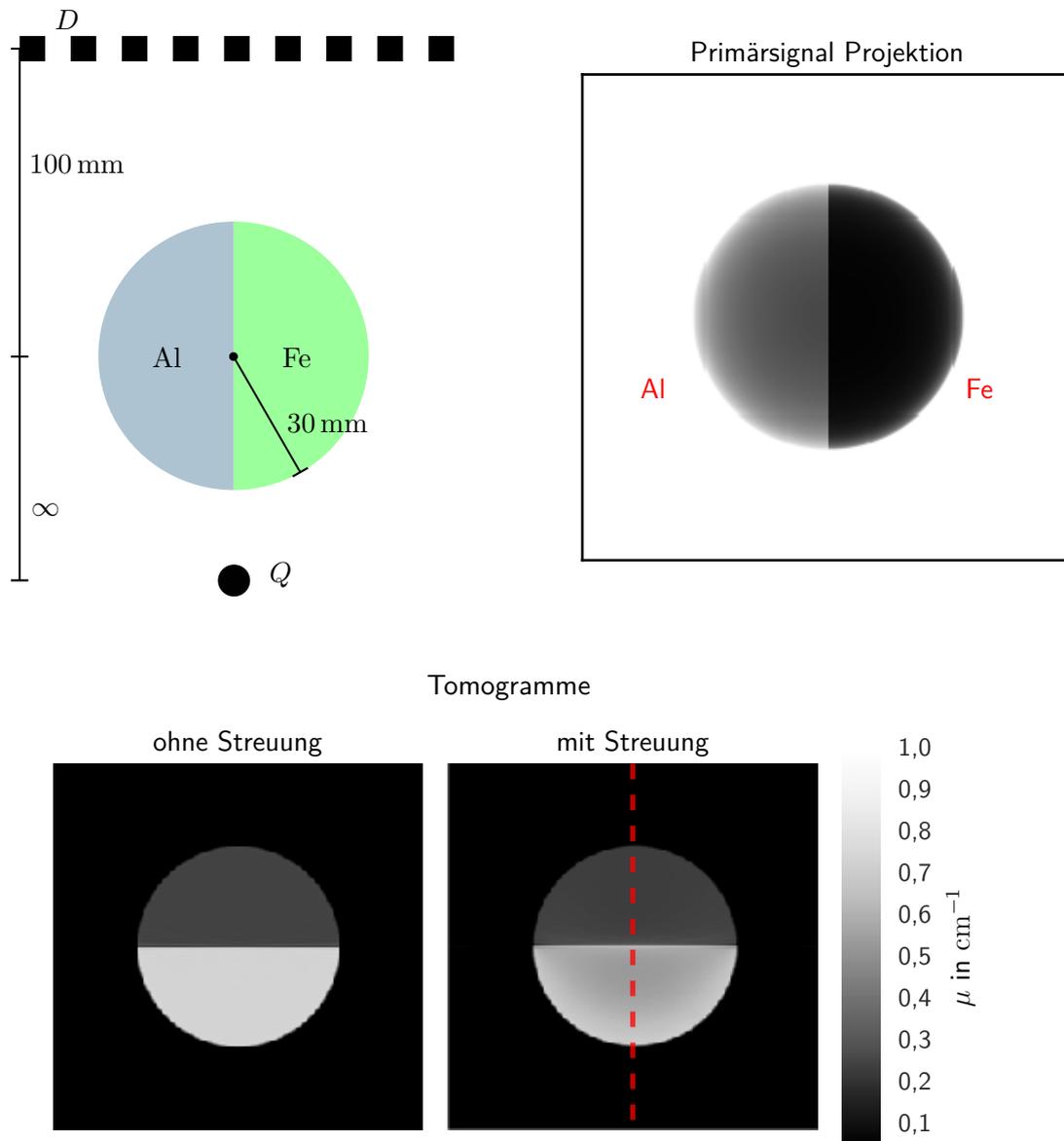


Abb. 5.5.: Der abgebildete Testkörper besteht aus zwei Halbkugeln mit Radius 30 mm. Eine Hälfte besteht aus Aluminium, die andere aus Eisen (jeweils als Reinmaterialien modelliert). Die abgebildete Röntgenprojektion dieses Testkörpers stammt aus einer Simulation mit 400 keV monochromatischem Primärspektrum. Diese Projektion ist ohne Streustrahlung berechnet, es ist also die Primärstrahlprojektion. Unten sind zwei simulierte Tomogramme der Al-Fe-Kugel abgebildet. Es wurde jeweils die zentrale Schicht der Kugel (Äquator) aus einem analytisch simulierten Projektionsdatensatz rekonstruiert, einmal mit und einmal ohne das analytisch berechnete Streusignal.

- Zahl der Streukegel $N_k = 901$. Der ebene Öffnungswinkel beträgt jeweils etwa $7,6^\circ$.

Im Folgenden werden die Ergebnisse aus der analytischen Simulation der Streustrahlung beschrieben. Um verschiedene Überdeckungen der beiden Materialien zu erhalten werden die Projektionen für die nicht rotierte Kugel sowie nach 45° und 90° Rotation betrachtet. Die Rotation ist gegen den Uhrzeigersinn gewählt, sodass nach 90° -Drehung die Fe-Hälfte der Kugel detektornah ist.

Die einzelnen Streubeiträge sind sowohl nach Compton- und Rayleigh Effekt getrennt, als auch jeweils nach der Streuordnung. Um die doppelt gestreuten Photonen bezeichnen zu können wird wieder auf die Nomenklatur die die Reihenfolge der Streueignisse angibt zurückgegriffen: CC, CR, RC und RR. Allerdings fehlt im Folgenden die zweite Ordnung Rayleighstreuung (RR). Für diese kann nach dem obigen Modell kein sinnvolles Ergebnis berechnet werden. Es ergeben sich Streubilder mit nur einzelnen mehr oder weniger zufällig verteilten Pixeln, die Intensität tragen. Für die übrigen Pixel gilt $I''_R \approx 0$, obwohl man eine gleichmäßigere Verteilung der Streustrahlung erwarten muss. Das lässt sich begründen, wenn man die Abtastbreite der ω_1 betrachtet: der Rayleigh-Wirkungsquerschnitt variiert auf dem Intervall $[\omega_1; \omega_1 + \alpha]$ zwischen zwei Kegelmittelachsen so stark, dass benachbarte Streukegel signifikant verschiedene Streuintensitäten erster Ordnung tragen. Das geht damit einher, dass insgesamt nur wenige ω_1 auftreten, welche den Wirkungsquerschnitt bei hohem Betrag „treffen“. Die Abtastung von $\frac{d\sigma_R(\omega_1)}{d\Omega}$ ist also zu grob gewählt bzw. N_k zu klein. Um dem entgegen zu wirken, müsste N_k viel größer gewählt werden, siehe dazu auch die Diskussion in Abschnitt 5.8.

Man kann aus den Streuquerschnitten abschätzen, dass der Rayleigh Effekt hier ohnehin keinen signifikanten Intensitätsanteil trägt: Bei 400 keV gilt für Eisen das Verhältnis der totalen Streuquerschnitte $\frac{\sigma_C}{\sigma_R} \approx 33$. Die Ergebnisse der MC-Simulation aus dem nächsten Abschnitt bestätigen diese Interpretation. Hierzu sei als Fazit festgehalten, dass der Rayleigh Effekt der zweiten Ordnung nur bei deutlich kleineren Energien berücksichtigt werden kann bzw. sollte (bei 40 keV gilt beispielsweise $\frac{\sigma_C}{\sigma_R} \approx 0.74$). Insofern sei der Rayleigh Effekt der zweiten Ordnung gegenüber der zweiten Ordnung Comptonstreuung vernachlässigt.

In Abb. 5.6 sind die Streuprojektionen, nach den einzelnen Beiträgen der ersten Ordnung aufgeschlüsselt, gezeigt.

In Abb. 5.7 ist die Intensitätsverteilung entlang der Projektion des Äquators der Al-Fe-Kugel für die Comptonstreuung dargestellt. Dazu sind die „gekreuzten“ Effekte CR und RC der Einfachheit halber dem Comptoneffekt zugeordnet.

Abb. 5.8 zeigt entsprechendes für die Rayleighstreuung.

Aus den Streuprojektionen und den Intensitätsprofilen liest man ab, dass

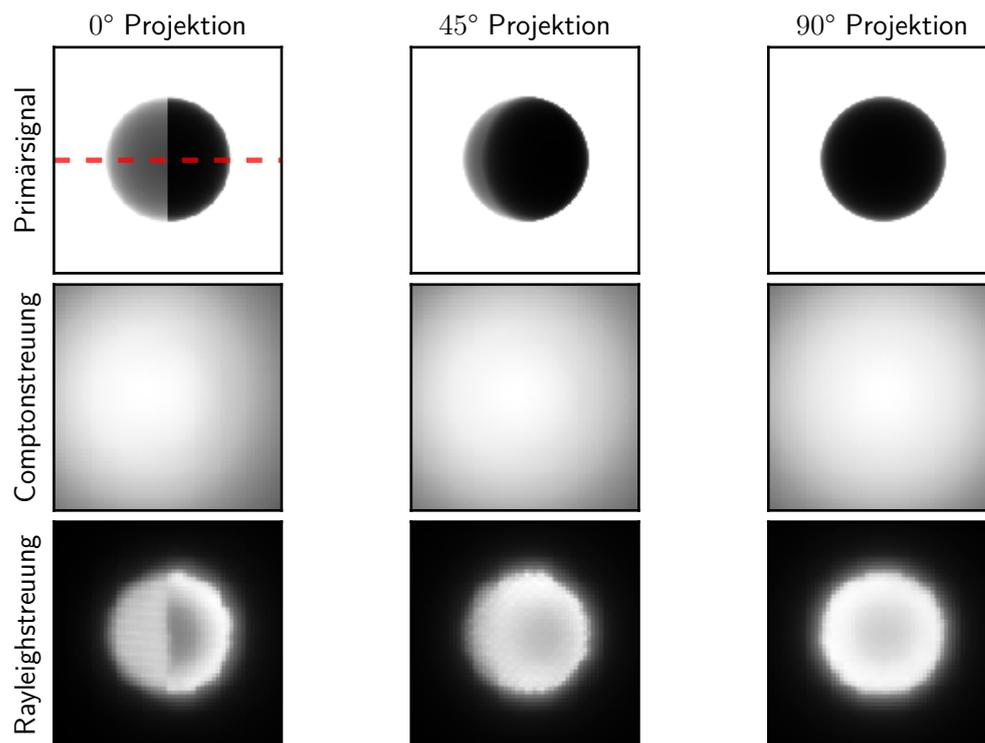


Abb. 5.6.: Analytisch berechnete Primärstrahl- und Streuprojektionen der Al-Fe-Kugel für die erste Streuordnung. Die Abbildung zeigt die Ergebnisse analytischer Simulationen für den Testkörper aus Abb. 5.5. Die Kugel wird (wie zur Durchführung einer CT-Simulation) um die vertikale Achse rotiert. Dargestellt sind jeweils die Projektionen der Compton- und Rayleighstreuung für die Ausgangsposition, sowie nach Rotation um die vertikale Achse um 45° und 90°. Durch Rotation gegen den Uhrzeigersinn ist die „90°-Projektion“ diejenige, bei der die Fe-Hälfte detektornah ist.

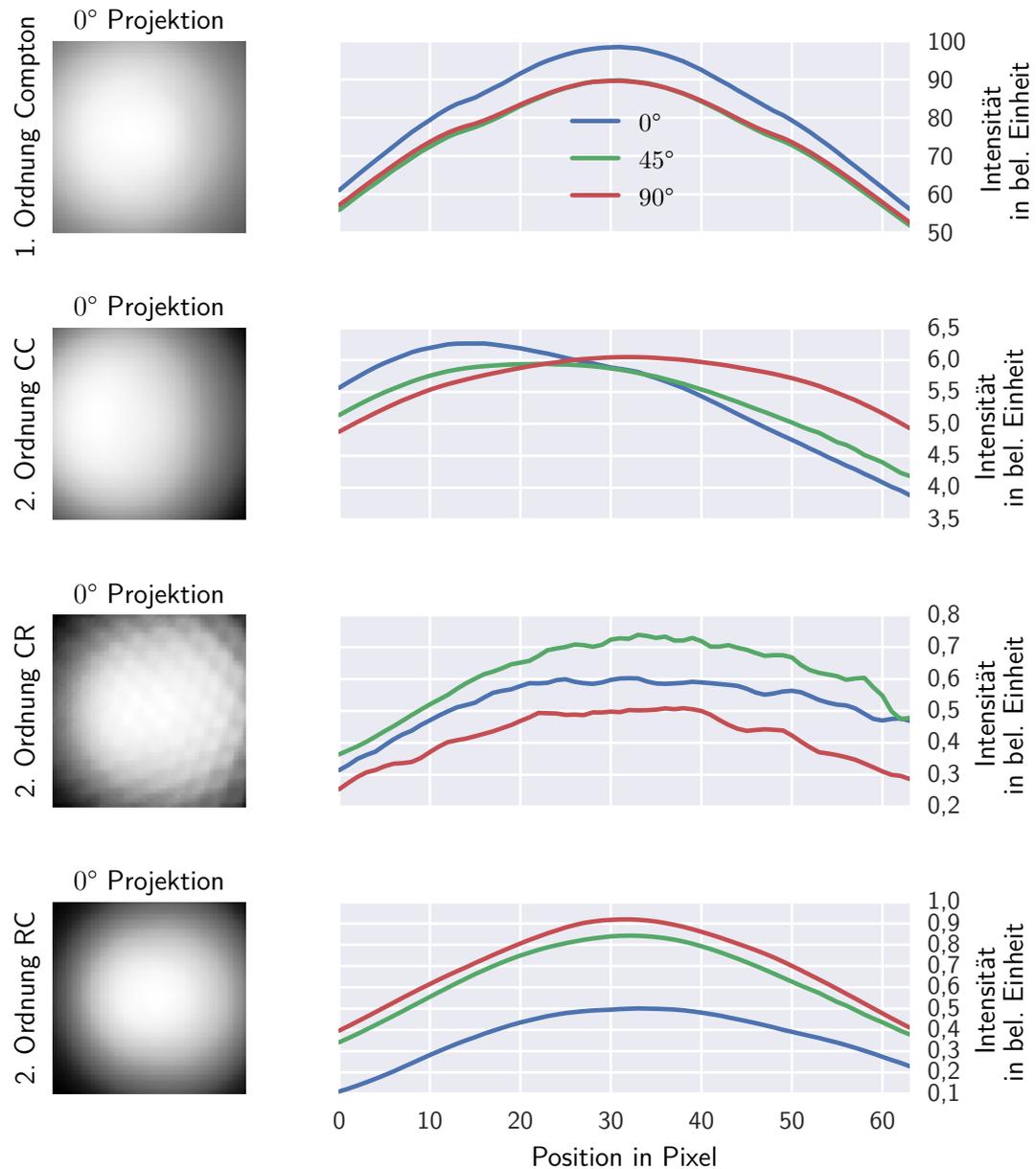


Abb. 5.7.: Comptonstreuprojektionen der Al-Fe-Kugel für die erste und zweite Streuordnung getrennt nach Einzelbeiträgen. Die Intensitätsprofile sind jeweils der mittleren Pixelzeile entnommen (rot gestrichelte Linie in Abb. 5.6). Die abgebildeten Projektionen zeigen die Verteilung der Streustrahlung bei nicht rotierter Kugel (0°-Projektion). Alle Intensitäten sind auf das Maximum der 0° Projektion erster Ordnung normiert.

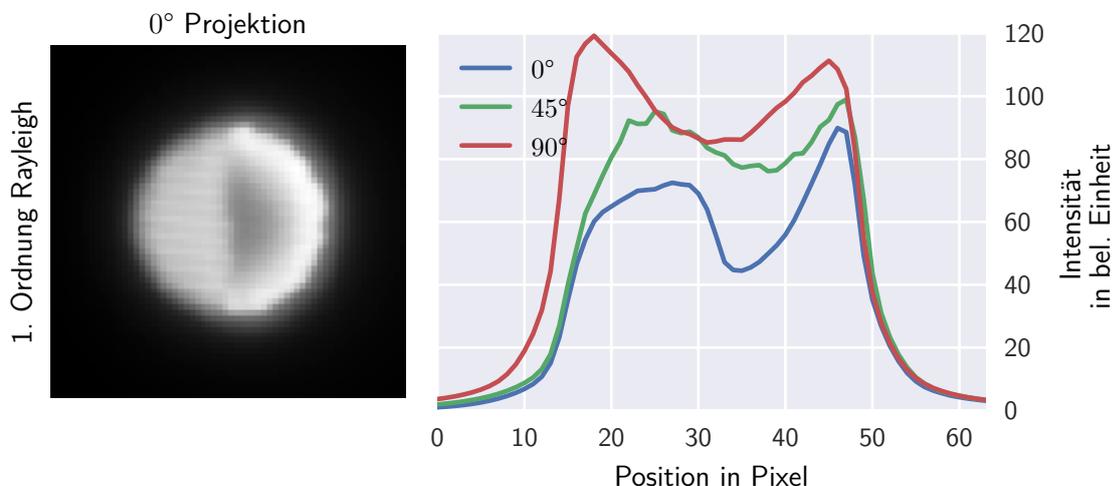


Abb. 5.8.: Rayleighstreuprojektionen der Al-Fe-Kugel für die nicht rotierte Kugel und Intensitätsprofile bei verschiedener Rotation. Die Intensitätsprofile sind (ähnlich wie in Abb. 5.7) entlang der mittleren Pixelzeile aufgenommen.

- die Rayleighstreuung erster Ordnung sehr stark vorwärtsgerichtet ist. Man erkennt sowohl in den Streuprojektionen als auch in den Linienprofilen die Kontur der Kugel bzw. die Schnittebene zwischen den beiden Hälften.
- die Absorption in der Fe-Hälfte groß genug ist, um die entstandene Streustrahlung noch in der Kugel wieder zu absorbieren. Besonders deutlich erkennt man dies in den Rayleigh-Streustrahlprojektionen, in den Compton-Streustrahlprojektionen drückt sich dieser Effekt durch eine leicht asymmetrische Verteilung aus.
- die Verteilung der Comptonstreuung zweiter Ordnung über den Detektor noch homogener ist als die der ersten Ordnung. Beide Comptonanteile zeigen nahezu keine Objektstruktur (allerdings ist eine Kugel auch nicht mit allzu viel struktureller Information versehen).

Diese Beobachtungen sind weitestgehend erwartungsgemäß. Um zu einer präziseren Aussage über die Qualität der Ergebnisse zu kommen, ist im folgenden Abschnitt der quantitative Vergleich zu einer MC-Simulation vorgenommen worden.

Der quantitative Vergleich der Gesamtintensitäten der einzelnen Streubeiträge folgt im nächsten Abschnitt gemeinsam mit den MC-Ergebnissen (Tab. 5.1 und die dortigen Abbildungen). Der dominierende Beitrag ist die Comptonstreuung erster Ordnung. Die Rayleighstreuung erster Ordnung und die Comptonstreuung zweiter Ordnung tragen etwa gleich viel zur gesamten Streuintensität bei. Es sei an dieser Stelle vorweggenommen, dass

die Intensität der zweiten Ordnung vom analytischen Modell systematisch zu klein berechnet (unterschätzt) wird. Das gilt auch mit der Korrektur, die in Abschnitt 5.8 vorgestellt wird.

Das analytische Streumodell ist mit dem Ziel entwickelt worden, für eine CT-Simulation anwendbar zu sein. Dementsprechend kann auch eine „volle“ Standard Kreistrajektorie jeweils in den einzelnen Streuanteilen simuliert werden. Dies eröffnet, am Beispiel der Al-Fe-Kugel mit monochromatischer Primärstrahlung, die Möglichkeit den Teil des cupping-Artefakts, der von Streustrahlung verursacht wird, isoliert zu betrachten. In Abb. 5.9 sind Linienprofile durch simulierte Tomogramme der Al-Fe-Kugel für die einzelnen Streubeiträge, welche sukzessive zu den Primärstrahlprojektionen addiert wurden, dargestellt. In Abb. 5.5 ist je eine Schicht des Tomogramms mit dem gesamten Streusignal, sowie eine Schicht des idealen Tomogramms ohne Einfluss der Streustrahlung dargestellt.

Die deutlichste Veränderung durch Streustrahlung zeigt sich in der Fe-Hälfte der Kugel. Das ist aus zwei Gründen erwartungsgemäß: 1. das Eisen hat größere Streuquerschnitte und 2. wegen der höheren Absorption des Eisens ist der Quotient aus detektierter Streustrahlung und Primärsignal deutlich größer als im Aluminium. Dies führt gerade zu den Artefakten in der Rekonstruktion.

Nachdem das Streusignal einen niederfrequenten Signalanteil in den Projektionen darstellt, kann man erwarten, dass sich die Anwesenheit von Streustrahlung im Tomogramm negativ auf die Ortsauflösung auswirkt. Das lässt sich auch am Beispiel beobachten. Der Übergang zwischen den beiden Materialien wird umso unschärfer, je mehr Streuanteile zu den simulierten Projektionen addiert wurden. In den Linienprofilen beobachtet man entsprechend eine abgerundete Kante an der Sprungstelle der Schwächungskoeffizienten von Al zu Fe. Für die Außenkanten des Objektes gilt das prinzipiell auch. Der Effekt lässt sich hier jedoch nicht beobachten, weil das Objekt eine ungeeignete Form hat⁹⁵.

⁹⁵ Bei einem Würfel anstelle der Kugel könnte man dies beobachten

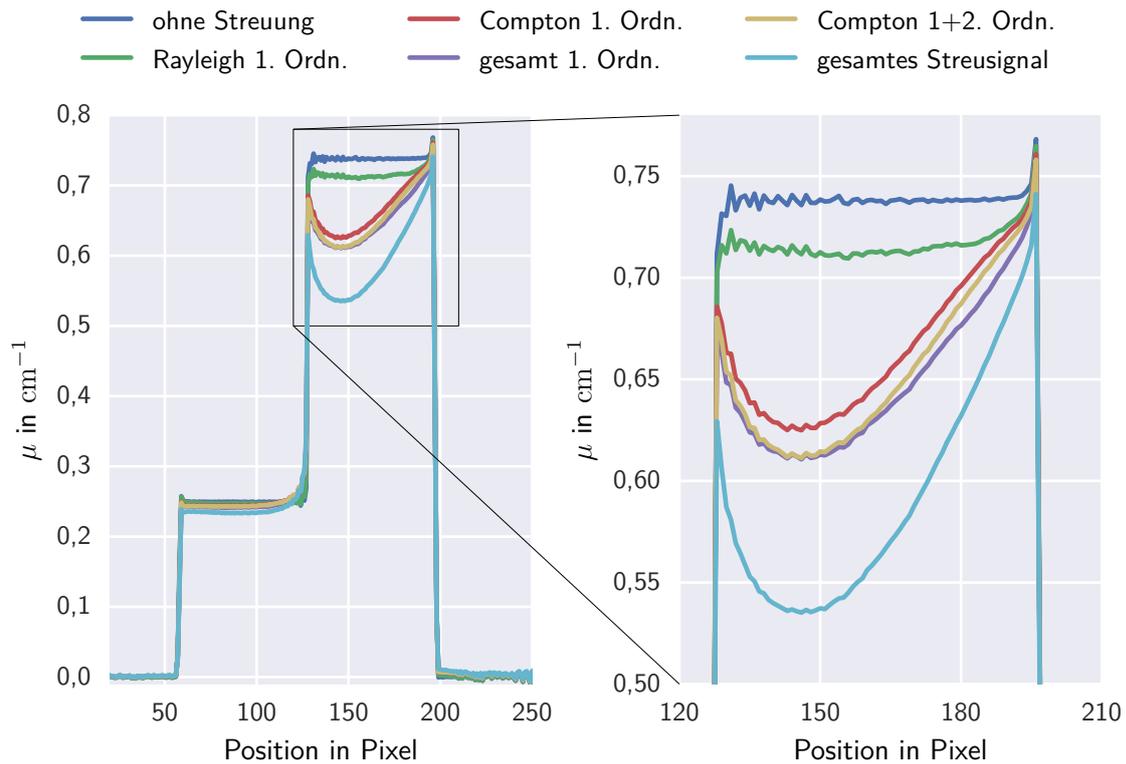


Abb. 5.9.: Einfluss der Streustrahlung auf das Rekonstruktionsergebnis bei monochromatischer Primärstrahlung (400 keV). Die Grafik zeigt die Linienprofile entlang der roten Linie in Abb. 5.5. Die zugehörigen Rekonstruktionen sind jeweils mit verschiedenen Streustrahlungsanteilen durchgeführt. Das hier als „Compton 1+2. Ordn.“ bezeichnete Linienprofil enthält alle Streueffekte mit mindestens einer Comptonstreuung. Also alle Anteile die in Abb. 5.7 dargestellt sind.

Hochenergiebeispiel: Stufenzylinder

Die Intensität der Streustrahlung tritt bei Röntgenenergien im MeV-Regime deutlich stärker hervor und die beiden betrachteten Streueffekte sind noch stärker vorwärtsgerichtet. Wobei der Rayleigheffekt noch kleinere Wirkungsquerschnitte aufweist und damit bereits in der ersten Ordnung vernachlässigbar wird. Dazu soll hier noch ein weiterer Testkörper betrachtet werden. Der in Abb. 5.10 gezeigte Stufenzylinder aus Eisen ist ein Testkörper, welcher für Hochenergieanwendungen realistische Abmessungen und Absorptionseigenschaften hat [96]. Für die Simulationen des Stufenzylinders wurde ein Röntgenspektrum einer LINAC-Röntgenquelle mit Transmissionstarget verwendet. Die Maximalenergie dieses Spektrums ist 6 MeV (dargestellt in Anhang B.3 Abb. B.12). Diese Simulation ist polychromatisch ausgeführt, es wurde ebenfalls in Parallelstrahlgeometrie simuliert. Der virtuelle Detektor ist ideal energieintegrierend und hat $25 \times 25 \text{ cm}^2$ mit 64×64 Pixeln. Der Objekt-zu-Detektorabstand ist 20 cm. Die Streusimulation wurde für $N_S = 8 \cdot 10^3$ und $N_k = 901$ durchgeführt.

Die analytisch berechneten Streustrahlprojektionen für den Stufenzylinder sind in Abb. 5.11 gezeigt.

Nachdem der Stufenzylinder rotationssymmetrisch ist, genügt es eine einzige Projektionsrichtung zu betrachten.

Ähnlich dem, was oben bereits für die Al-Fe-Kugel für die zweite Ordnung Rayleigheffekt beobachtet wurde, kann man hier bereits in der ersten Ordnung feststellen: Die Streuprojektion zeigt „Glanzwinkel“. Die Verteilung der Streustrahlung ist, trotz des analytischen Modells, „verrauscht“ bzw. unstetig. Immerhin zeigt der visuelle Vergleich mit den Ergebnissen der MC-Simulation (Abb. 5.15), dass die Orte, an denen Intensität vorhanden ist, korrekt sind.

Die Ursache für die stark inhomogene Verteilung ist ähnlich wie oben bereits für die zweite Ordnung Rayleigheffekt beschrieben: Vom Drehzentrum aus gesehen, sind zwei benachbarte Pixelzentren etwa $1,1^\circ$ voneinander entfernt. Bei 1 MeV gilt für Eisen $\frac{d\sigma_R(0^\circ)}{d\Omega} / \frac{d\sigma_R(1,10^\circ)}{d\Omega} \approx 10$, für höhere Energien steigt dieses Verhältnis schnell (bei 2 MeV gilt bereits ≈ 36). Insgesamt gilt auch hier, dass die totalen Wirkungsquerschnitte des Rayleigheffekts gegenüber dem Comptoneffekt vernachlässigt werden können. Das Modell wird bezüglich des Rayleigheffekts also genau dann schlecht, wenn der Effekt nicht mehr dominant ist. Auch hier könnte man durch deutlich höhere Abtastung, in diesem Fall der Detektorfläche, dem Simulationsartefakt entgegenwirken.

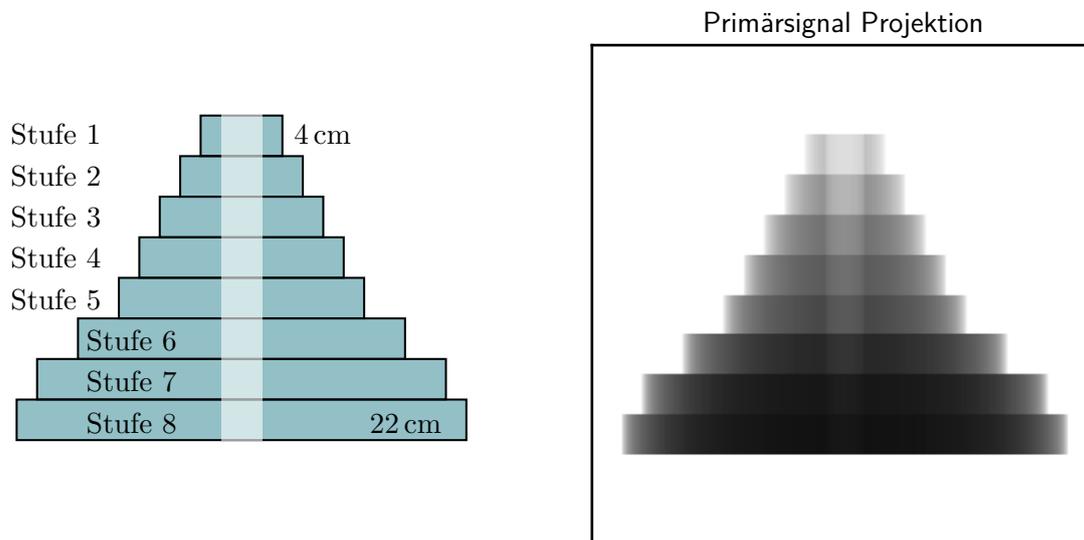


Abb. 5.10.: Der hier schematisch dargestellte Stufenzylinder weist ein Spektrum mit teilweise besonders großen Stufendurchmessern (4 cm bis 22 cm) auf und hat eine Bohrung entlang seiner Höhe (\varnothing 2 cm). Die Radien der einzelnen Stufen sind in Tab. B.4 (Anhang B.3) gelistet. Dieser Stufenzylinder ist als Testobjekt für Fragestellungen im MeV-Regime geeignet, siehe auch Ref. [96].

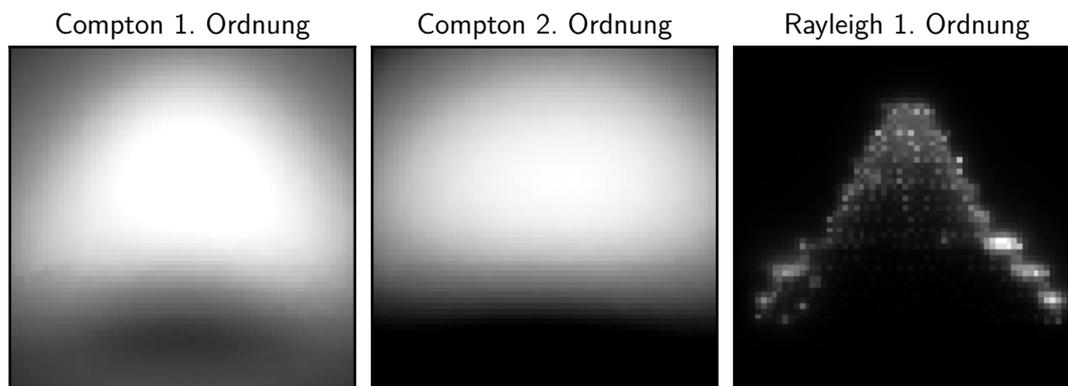


Abb. 5.11.: Streuprojektionen des Stufenzylinders. Der Comptoneffekt zweiter Ordnung ist hier „nur“ CC. Ein quantitativer Vergleich der Streuantteile ist in Abb. 5.17 vorgenommen.

5.7. Validierung des analytischen Modells mittels Monte-Carlo Simulation

Die Qualität des entwickelten Streumodells kann experimentell nicht geprüft werden. Das liegt daran, dass experimentell grundsätzlich nur die Summe aus der Primär- und Sekundärstrahlung zugänglich ist, es sei denn man verwendet quellseitige Kollimatoren, die einen Teil des untersuchten Objektes abschatten. Auch dann kann keine Trennung der verschiedenen Streuordnungen erfolgen, sodass man nur Abschätzungen für die gesamte Streuintensität erhalten kann.

Anstelle einer experimentellen Validierung wird deshalb der Vergleich mit einer MC-Simulation vorgenommen. Die MC-Simulationen, die im Folgenden gezeigt werden, sind mit dem Simulationsprogramm „GEANT4“ erzeugt worden, siehe die Ref. [2–4].

Die MC-Simulationen berücksichtigen die in Tab. B.5 gelisteten Streu- und Absorptionseffekte für Elektronen und Photonen. Wie die Ergebnisse aus den Ref. [95, 96] nahelegen, kann für diese MC-Simulationen der Paarbildungseffekt vernachlässigt werden. Die MC-Simulationen wurden jeweils mit 10^9 Primärphotonen pro Projektion durchgeführt⁹⁶ (sowohl bei dem Spektrum für den Stufenzylinder, als auch bei der monochromatischen Primärstrahlung für die Al-Fe-Kugel⁹⁷). Im Übrigen entspricht die MC-Modellierung genau den deterministischen Simulationen. Um aus der MC-Simulation die einzelnen Streueffekte getrennt voneinander zu erhalten, wurden die Teilchenhistorien der virtuellen Teilchen, welche ein Detektorpixel erreichen, analysiert. Ein Photon, welches einen bestimmten Detektorpixel erreicht hat, wird dort als Photon einer bestimmten Klasse (z.B. CC) detektiert, wenn in seiner Teilchenhistorie die entsprechende Anzahl an Streuereignissen und der Namensgebende Streueffekt mindestens einmal vorkommt. Durch diese Zählweise lassen sich die „gekreuzten“ Effekte nicht von den „doppelten“ Effekten unterscheiden. Dies ist eine Einschränkung⁹⁸ von GEANT4. Man erhält also nur Streubilder für die Fälle: C, R, (CC+CR+RC) und (RR+CR+RC). Dementsprechend können nicht alle Teilsignale einzeln verglichen werden. Es wird jeweils angegeben, welche Teilsignale gemeint bzw. summiert sind.

Die Streuprojektionen für die beiden Testkörper sind in den Abb. 5.12 und 5.15 dargestellt.

⁹⁶ Mein besonderer Dank gilt hier C. Stritt, welche die MC-Simulationsergebnisse erzeugt und zum Vergleich zur Verfügung gestellt hat.

⁹⁷ Die Winkelverteilung der Primärphotonen der MC-Simulation war so eingestellt, dass, bei Start in der virtuellen Quelle, genau die Detektorfläche „ausgeleuchtet“ wird.

⁹⁸ Diese Information stammt von C. Stritt, welche die Simulationsdaten erzeugt und zur Verfügung gestellt hat.

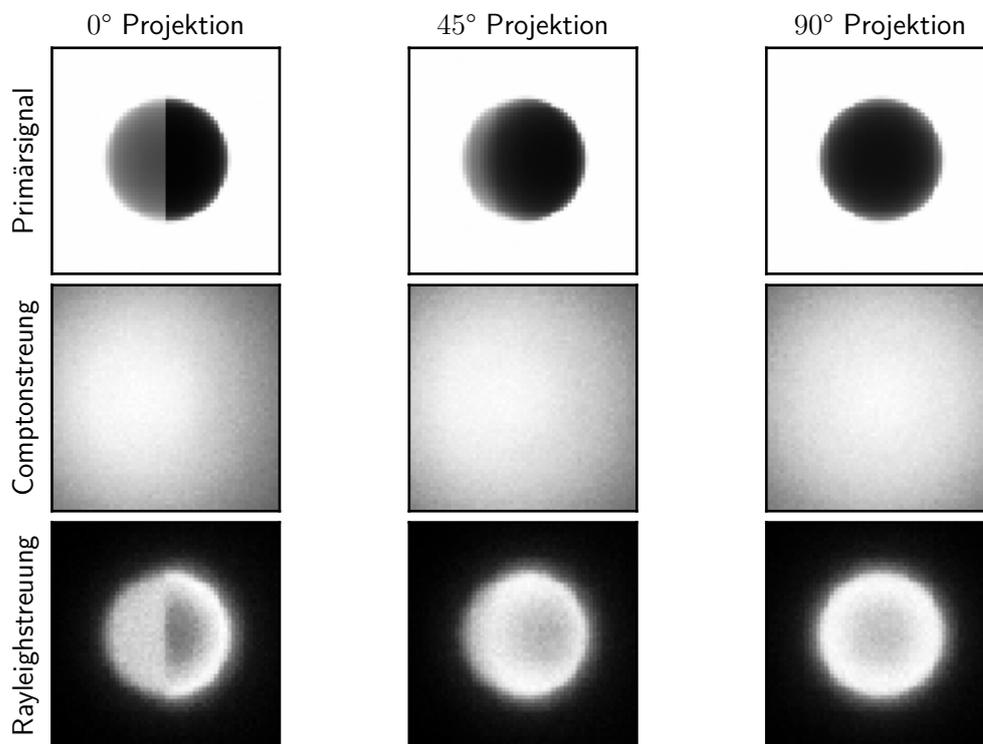


Abb. 5.12.: Analog zu den analytisch simulierten Streuprojektionen aus Abb. 5.6 sind hier die Ergebnisse der MC-Simulation dargestellt.

Multimaterialphantom: Al-Fe Kugel

Der visuelle Vergleich zwischen den MC-Ergebnissen und den analytisch berechneten Streuprojektionen aus Abb. 5.6 ergibt hohe Ähnlichkeit aller gezeigten Streuprojektionen. Insbesondere die stark strukturierte Verteilung der Rayleighstreuung findet sich gleichermaßen in den Ergebnissen der MC- und analytischen Simulation.

Neben dem visuellen Vergleich der Streuprojektionen kann auch ein quantitativer Vergleich der Intensitäten gezogen werden. Dazu sind die Linienprofile aus Abb. 5.8 und 5.7 erneut in Abb. 5.13 und 5.14 gemeinsam mit den MC-Ergebnissen gezeigt⁹⁹. Zusätzlich sind die integralen Intensitäten der 0°-Streuprojektionen in Tab. 5.1 zusammengestellt.

- Für die erste Ordnung Streustrahlung ergibt sich nahezu eine Deckung der Linienprofile. Das spiegelt sich auch in den integrierten Intensitäten wieder. Abweichungen von 5 bzw. 6 % sind verglichen mit der Einfachheit des Streumodells erster Ordnung als sehr gutes Ergebnis zu bewerten.

⁹⁹ Die hier fehlenden Linienprofile der 45° und 90° Projektion finden sich in Anhang B.3

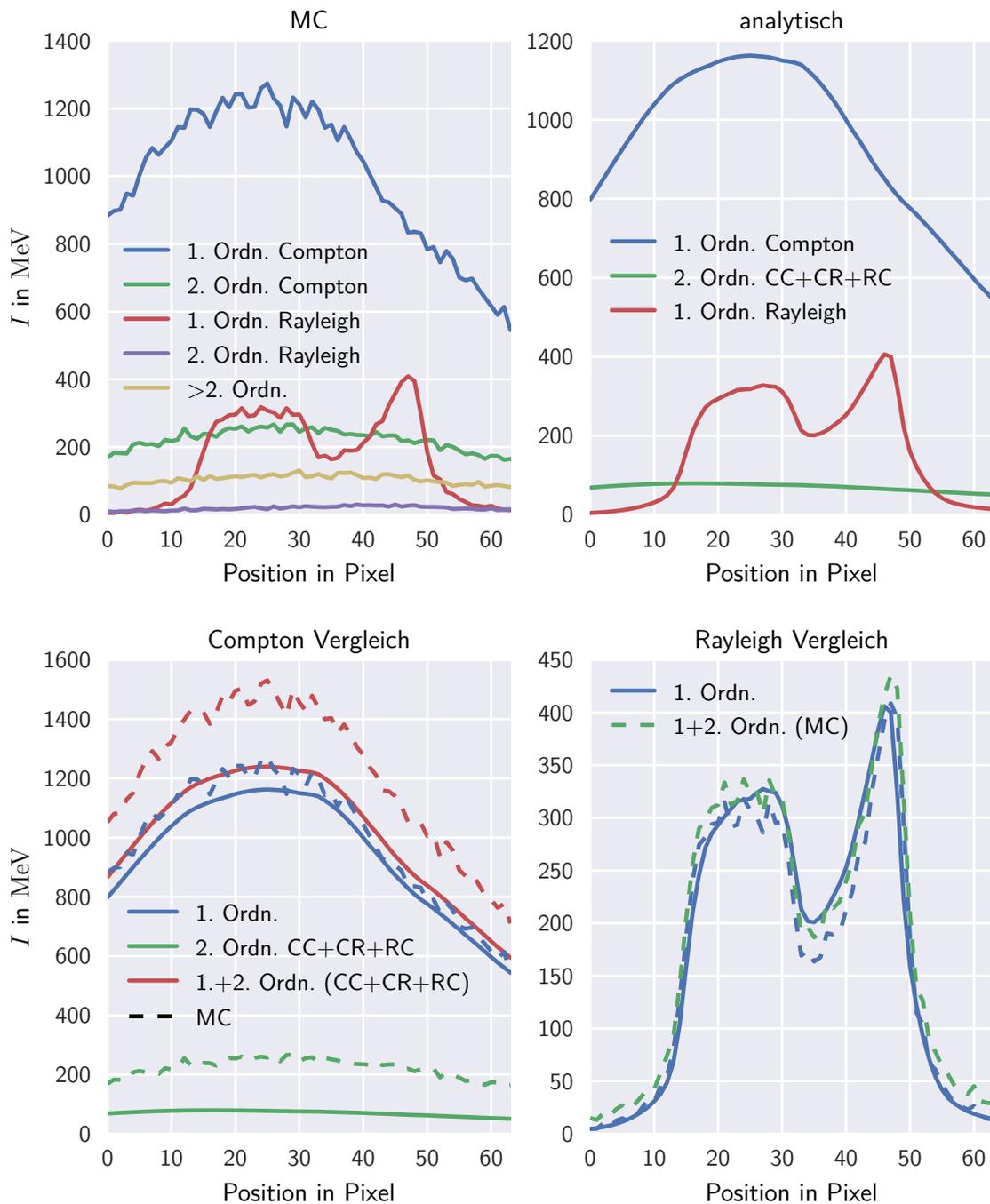


Abb. 5.13.: Vergleich der Linienprofile für MC- und analytische Simulation für das Al-Fe-Kugelphantom. Die Linienprofile sind den Projektionen für die nicht rotierte Kugel (0° Projektion) aus Abb. 5.12 und Abb. 5.6 entnommen. Dargestellt ist jeweils das Intensitätsprofil auf Höhe der Projektionsmitte. Ergänzend zu dieser Abbildung finden sich für 45° und 90° entsprechende Grafiken in Anhang B.3. Durchgezogene Linien stellen den Verlauf der analytischen Simulation dar, gestrichelte Linien den entsprechenden Verlauf der MC-Simulation.

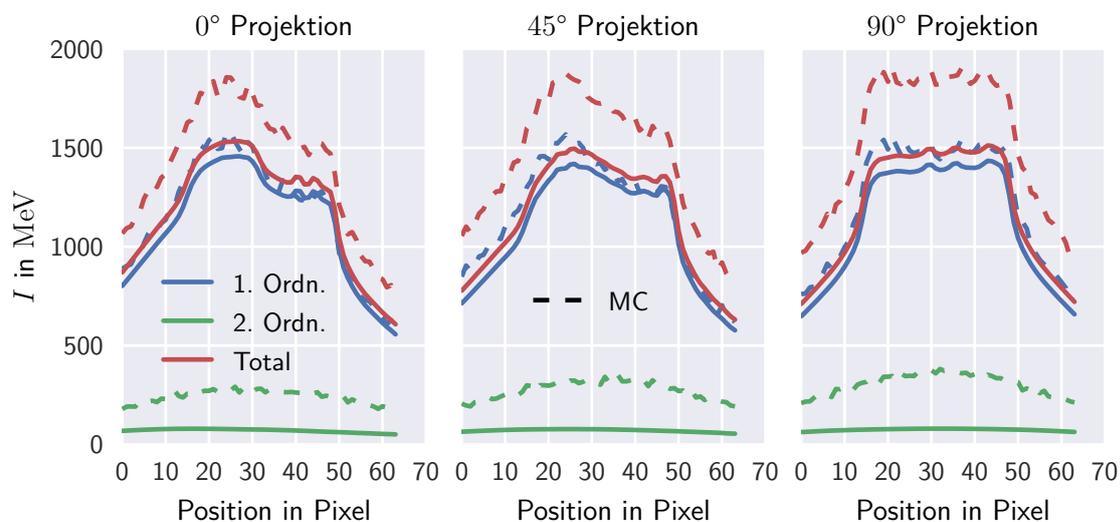


Abb. 5.14.: Vergleich der Linienprofile MC und analytische Simulation für das Al-Fe-Kugelphantom. Durchgezogene Linien stellen den Verlauf der analytischen Simulation dar, gestrichelte Linien den entsprechenden Verlauf der MC-Simulation. Es gilt für die zweite Ordnung: CC+CR+RC+RR.

- Auch für die Projektionen nach Objektrotation (hier bedeutet das auch Rotation des Punktgitters) ergibt sich ein ähnliches Niveau der Abweichungen.
- Insgesamt ist die Streuintensität, welche durch das analytischen Modell berechnet wird, kleiner als die MC-Intensität. Das zeigt sich in allen Anteilen, besonders aber in der zweiten Ordnung Comptonstreuung. Diese weicht deutlich ab. Im Rahmen der Diskussion der Modellfehler in Abschnitt 5.8 wird allerdings die Ursache für diese *Unterschätzung* gefunden, sowie eine Korrektur vorgeschlagen, die diesen Effekt deutlich mindert.

Tab. 5.1.: Quantitativer Vergleich der Streuintensitäten für die MC- und analytische Simulation für das Al-Fe-Kugel Phantom. Sämtliche Intensitäten sind in MeV angegeben. Es ist jeweils die integrale Intensität der Detektorfläche angegeben und verglichen. Die Werte „analyt.“ beziehen sich auf die Ergebnisse aus diesem Abschnitt, die Werte „korr.“ beziehen sich auf die Korrektur der zweiten Ordnung, die im Abschnitt 5.8 eingeführt wird.

Intensitätsanteil	MC	analyt.	rel. Diff.%	korr.	rel. Diff.%
Rayleigh erste Ordnung	$3,67 \cdot 10^5$	$3,48 \cdot 10^5$	5		
Compton erste Ordnung	$3,53 \cdot 10^6$	$3,32 \cdot 10^6$	6		
zweite Ordn. (CC+CR+RC)	$7,97 \cdot 10^5$	$2,64 \cdot 10^5$	67	$6,91 \cdot 10^5$	14
Gesamt (C+R+CC+CR+RC)	$4,69 \cdot 10^6$	$3,94 \cdot 10^6$	16	$4,36 \cdot 10^6$	7

Hochenergiebeispiel: Stufenzylinder

Anhand des visuellen Vergleiches der Abb. 5.16 und 5.11 ergibt sich die Beobachtung, dass die erste Streuordnung gut wiedergegeben ist. Für die zweite Ordnung (ohne Betrachtung von RR) ergeben sich Unterschiede, vor allem bei den Streuintensitäten im Bereich der Basis des Stufenzylinders.

Der quantitative Vergleich anhand der Linienprofile ergibt,

- dass die erste Streuordnung gut wiedergegeben ist. Das gilt sowohl für den Verlauf, als auch für die Intensität. Obwohl die Rayleighintensität stark von dem Simulationsartefakt betroffen ist, ist die Intensität und der typische Verlauf weitestgehend korrekt. Man kann allerdings auch festhalten, dass der Rayleigheffekt vernachlässigbar wenig Intensität zum gesamten Streusignal beiträgt.
- dass, genau wie bei der Al-Fe-Kugel, die Intensität der zweiten Ordnung Comptonstreuung stark unterschätzt wird. Hinzu kommt, dass auch der Verlauf der Linienprofile nicht korrekt scheint (in den horizontalen Linienprofilen erkennt man, dass der Abfall der Intensität zum Detektorrand hin nicht steil genug ist).

Darüber hinaus gilt für die integralen Intensitäten (nur MC): Die integrale Intensität der Streuprojektion der zweiten Ordnung Comptonstreuung ist etwa um den Faktor 4 kleiner als die erste Ordnung.

Korrektur der zweiten Streuordnung

Den beobachteten Abweichungen der zweiten Ordnung Comptonstreuung (man betrachte CC, CR und RC gemeinsam) kann mittels der in Abschnitt 5.8 besprochenen Korrektur entgegnet werden. Die Ergebnisse nach dieser Korrektur sind dort besprochen.

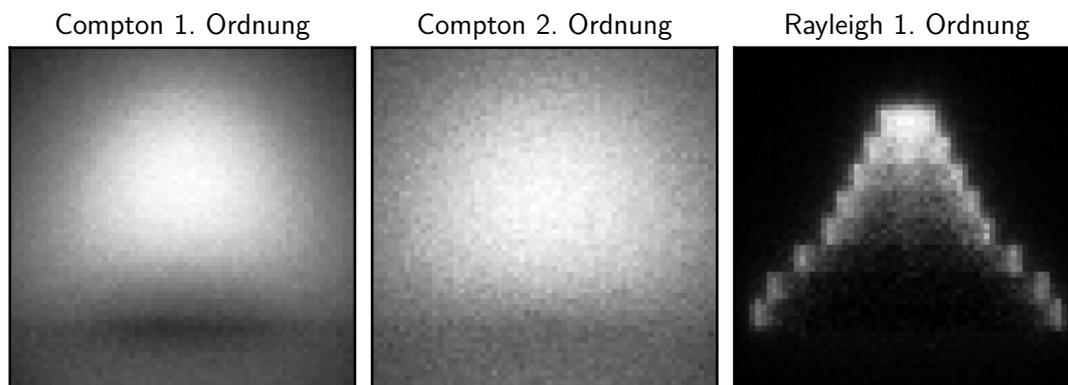


Abb. 5.15.: Streuprojektionen nach einzelnen Streueffekten aufgetrennt. Die hier gezeigten Streuprojektionen sind das Ergebnis einer MC-Simulation mit 10^9 Primärphotonen. Als Primärspektrum ist das 6 MeV-Spektrum, wie in Anhang B.3 Abb. B.12 gezeigt, verwendet.

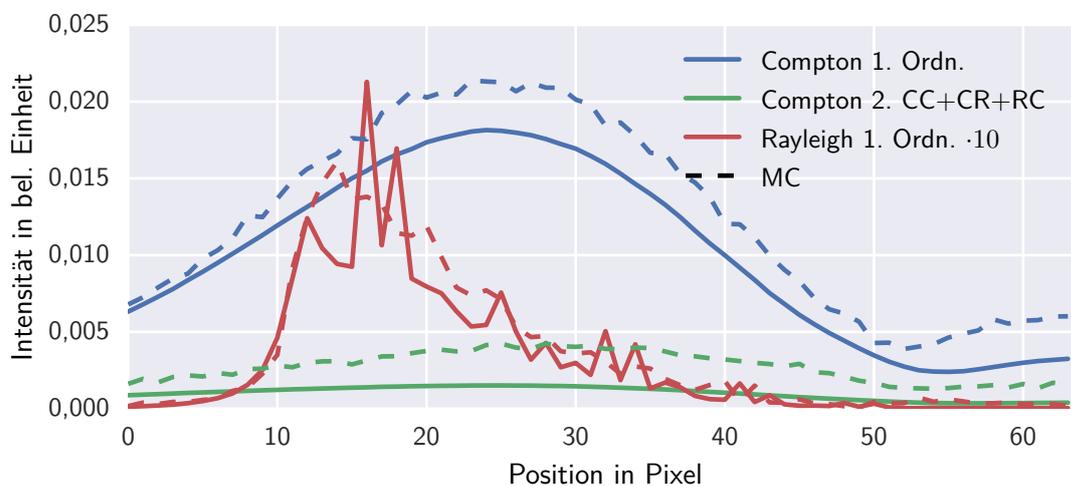


Abb. 5.16.: Vertikale Linienprofile entlang der mittleren Pixelspalte der Streuprojektionen des Stufenzylinders (aus Abb. 5.11) im Vergleich mit den entsprechenden Linienprofilen einer MC-Simulation (Abb. 5.15). Durchgezogene Linien stellen den Verlauf der analytischen Simulation dar, gestrichelte Linien den entsprechenden Verlauf der MC-Simulation.

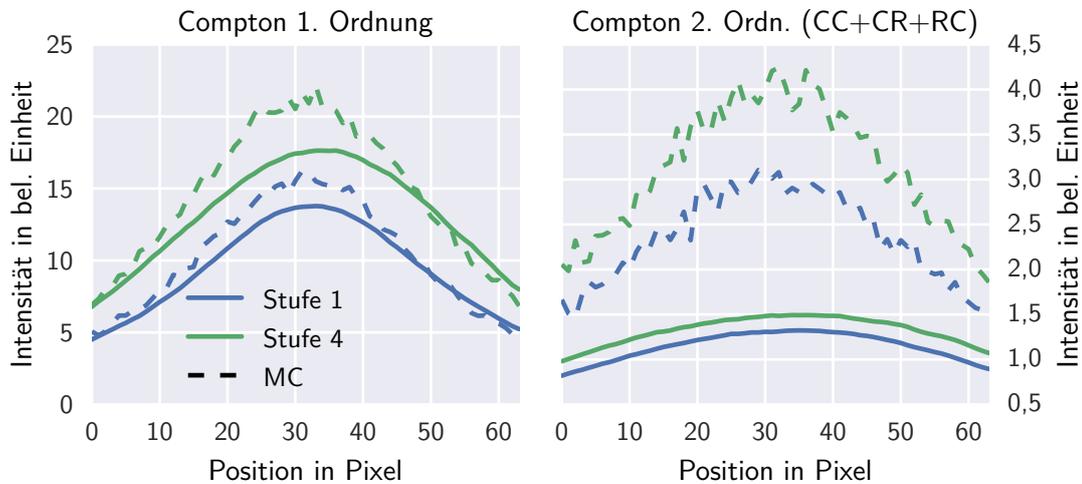


Abb. 5.17.: Vergleich horizontaler Linienprofile für analytische und MC-Simulation des Stufenzylinders. Die Linienprofile zeigen den Intensitätsverlauf, der sich in Projektion der entsprechend bezeichneten Stufe aus Abb. 5.10 ergibt. Durchgezogene Linien stellen den Intensitätsverlauf aus dem analytischen Modell dar, gestrichelte Linien den Intensitätsverlauf der MC-Simulation.

5.8. Korrektur und Diskussion der Modellfehler und Limitierungen

Die Approximationen des analytischen Streumodells ziehen Fehler in den Ergebnissen nach sich. Die Unterschiede zwischen der MC-Simulation und der analytischen Simulation lassen das beobachten. Wesentlich für das oben beschriebene Modell ist die Zerlegung des streuenden Objektes in Teilobjekte, von denen jedes durch einen Punkt repräsentiert wird. Das gilt für die Berechnung beider Streuordnungen. Die durch diese Diskretisierung verursachten Fehler sind Gegenstand der folgenden Diskussion. Für die zu klein berechneten Intensitäten der zweiten Streuordnung lässt sich eine Korrektur finden.

Fehler in der Modellierung der ersten Ordnung Streustrahlung

Freud et al. weisen darauf hin, dass die Größe eines Teilvolumens (genauer: seine Ausdehnung in Transmissionsrichtung) so gewählt sein sollte, dass die Absorption im Teilvolumen klein ist [36] (ein Beispiel in der Publikation geht von 6% aus.). Letztlich erreicht man damit, dass die Intensität, die an einem P_j berechnet wird, nicht weit von der abweicht, die für alle von diesem Punkt repräsentierten Elementarstreuer gilt. Für ein vereinfachtes Testszenario kann man das Konvergenzverhalten der Streusimulation gegenüber der Dichte der Streuzentren

betrachten. Es sei ein Nadelstrahl mit 400 keV monochromatischen Primärphotonen gewählt, welcher auf ein quaderförmiges Objekt trifft. Der Quader hat in Strahlrichtung eine Länge von 30 mm und quer zur Strahlrichtung eine quadratische Fläche, die genauso groß ist wie der Strahlquerschnitt 1×1 mm. Indem man die Anzahl der Streupunkte entlang des Quaders variiert, kann man die Streuintensität als Funktion der Abtastdichte berechnen. Exemplarisch für die Rayleighstreuung in Vorwärtsrichtung ($\omega_1 = 0^\circ$) ist dies berechnet und in Abb. 5.18 dargestellt. Zum Vergleich ist die Transmission pro Streuzelle mit aufgetragen. Man beobachtet, dass das Konvergenzverhalten für die beiden gezeigten Materialien bei dieser Energie etwa gleich ist. Die von Freud et al. vorgeschlagene Regel bestätigt sich weitestgehend, wobei eine Transmission von 0,9 als untere Grenze durchaus in Betracht kommt. Mit einer solchen graphischen Abschätzung lässt sich also für ein gegebenes Objekt die Größe der Teilvolumina bestimmen. Zusammen mit dem Volumen des zu simulierenden Objektes ergibt sich daraus die Zahl der Streupunkte und dadurch ist die Simulationsdauer letztlich festgelegt.

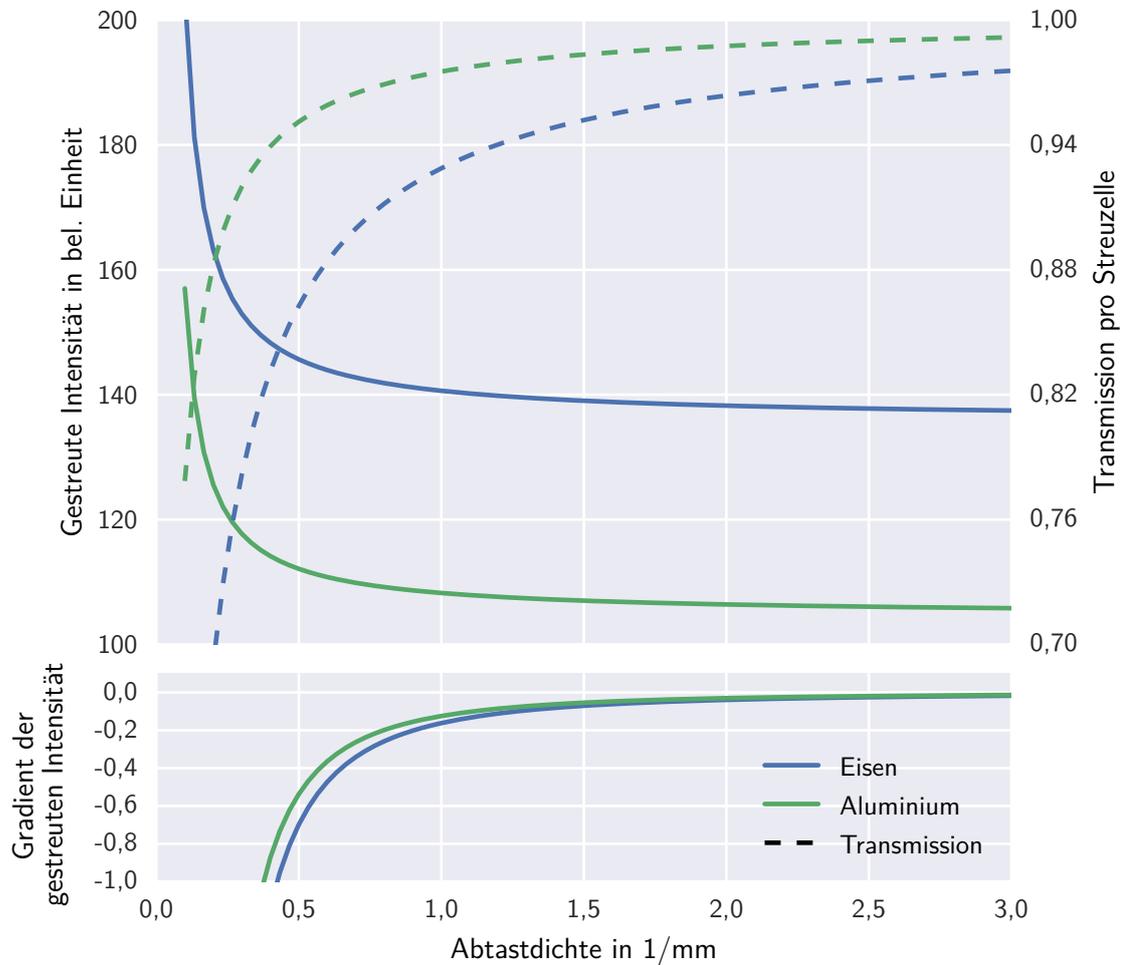


Abb. 5.18.: Untersuchung der Streuintensitätsberechnung nach Gleichung 5.14 als Funktion der Diskretisierung des Objektes. Die gestrichelten Linien zeigen die Transmission einer Streuzelle als Funktion der Streuzentrendichte. Die durchgezogenen Linien (oben) zeigen die Intensität der Streustrahlung (bei 400 keV Primärenergie), welche von einem 30 mm langen Quader ausgeht. Mit zunehmender Abtastdichte konvergiert die Streuintensität gegen einen festen Wert. Um das Konvergenzverhalten quantitativ beurteilen zu können, ist im unteren Plot der Gradient der Streuintensität aufgetragen.

Fehler in der Modellierung der zweiten Ordnung Streustrahlung

Es gibt vier Aspekte, die bei der Berechnung der zweiten Ordnung Streustrahlung zu Fehlern führen können.

Kegelanzahl bzw. Kegelöffnungswinkel Für alle Elementarstreuer innerhalb eines Kegels (wie in Abb. 5.4) wird dasselbe ω_1 angenommen. Nachdem es nur N_k Kegel gibt, führt dies dazu, dass die differentiellen Wirkungsquerschnitte auch nur für bestimmte Streuwinkel verwendet werden.

Abschätzung des Streuwinkels ω_1 Der Streuwinkel variiert entlang einer Kegelmittelachse, wird allerdings als konstant angenommen. Das gilt besonders, wenn $\omega_1 \approx 90^\circ$. Für eine CT-Simulation ist die Streustrahlung, welche ein Detektorpixel erreicht, von Interesse. Das heißt, dass aus $\omega_1 \approx 90^\circ \implies \omega_2 \approx 90^\circ$. Für den Fall, dass beide Streuwinkel nahe 90° sind, ist das Produkt aus den entsprechenden Wirkungsquerschnitten besonders klein. Dies ist in Abb. 2.4 abzulesen. Man kann zusammenfassen, dass die Näherung für ω_1 gerade dann schlecht wird, wenn die doppelte Streuwahrscheinlichkeit klein ist. In diesem Fall ist allerdings auch keine wesentliche Intensität am Detektor zu erwarten.

Abschätzung der Primärintensität für Orte im Kegel Die zweifache Streuung von Röntgenphotonen ist, wie in Abb. 2.4 abzulesen, besonders dann relevant, wenn beide Streuwinkel klein sind. Das gilt umso mehr, je größer die Primärenergie ist. In diesem Fall sind alle Elementarstreuer innerhalb eines Streuwinkels erster Ordnung näher an der Röntgenquelle als P_j . Das heißt, dass die Intensität, die für die Orte x abgeschätzt wurde, systematisch zu klein ist (Glg. 5.20 induziert einen Fehler). Daraus resultiert die Unterschätzung der Intensitäten der zweiten Streuordnung, die im Vergleich des analytischen Modells mit den MC-Ergebnissen beobachtet wurde.

Diesem nicht unerheblichen Modellfehler kann begegnet werden, ohne das Streuomodell so zu erweitern, dass mehr Informationen als das Tupel 5.3 benötigt werden: Dazu wird die Primärintensität der Orte x ersetzt. Auch die folgende Variante, die Primärintensität festzulegen, ist eine Abschätzung. Statt Glg. 5.31 (bzw. der Intensität $I = \Phi E$) soll eine effektive Intensität für alle Orte x abgeschätzt werden. Es sei wieder ein Kegel betrachtet, die Kegelmittelachse schließt mit $\overrightarrow{QP_j}$ den Streuwinkel ω_1 ein. Der Punkt, an dem das Strahlenbündel, welches entlang $\overrightarrow{QP_j}$ propagiert, die Oberfläche des Objektes trifft, sei mit \tilde{L} bezeichnet. Die Höhe dieses Kegels ist $t(\gamma_k)$. Das ist Länge des Streckenanteils von $\overrightarrow{QP_j}$, der im Objekt verläuft. Näherungsweise gilt: $\overline{\tilde{L}P_j} = \tilde{t} \approx \cos(\omega_1)t(\gamma_k)$. Das sei als korrigierende Abschätzung für die Strecke angewendet, auf der die Röntgenschwächung stattfindet. Der Schwächungskoeffizient

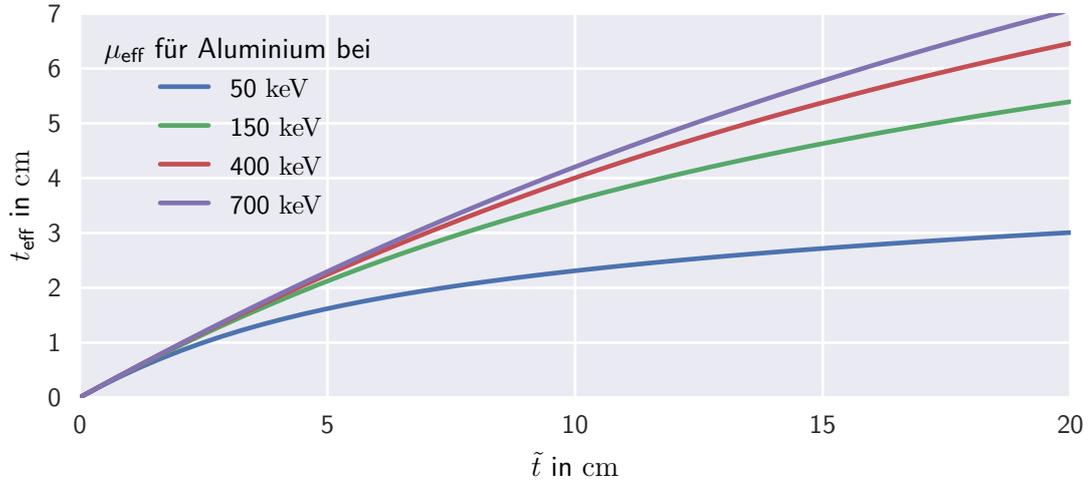


Abb. 5.19.: Grafik zu Gleichung 5.42. Die Transmissionslänge t_{eff} , bei der die effektive Intensität auftritt, ist als Funktion der gesamten Transmissionslänge \tilde{t} aufgetragen. Jeweils für $\mu_{\text{eff}} = \mu_{\text{Al}}$ bei verschiedenen Primärenergien.

entlang dieser Strecke sei mit $\mu \approx \mu_{\text{eff}}$ abgeschätzt (man verwendet also das mittlere Kegelmateriale). Es wird dann der Effektivwert der Intensität, die auf der Strecke $\overrightarrow{\tilde{L}P_j}$ auftritt, durch

$$\begin{aligned} I_{\text{eff}} &= \frac{I_0}{\tilde{t}} \int_0^{\tilde{t}} \exp(-\mu_{\text{eff}}x) dx \\ &= \frac{I_0}{\tilde{t}\mu_{\text{eff}}} (1 - \exp(-\mu_{\text{eff}}\tilde{t})) \end{aligned} \quad (5.41)$$

berechnet. I_0 ist hier die Intensität an der Objektoberfläche. In Abb. 5.19 ist exemplarisch für Aluminium als effektives Material im Kegel der Zusammenhang zwischen t_{eff} und \tilde{t} dargestellt. Es gilt $I_0 \geq I_{\text{eff}} \geq I_{P_j}$. Es lässt sich der Ort P_{eff} , an dem die effektive Intensität auftritt, berechnen. Dieser Ort liegt auf der Strecke $\overrightarrow{QP_j}$ im Abstand

$$\begin{aligned} t_{\text{eff}} &= \frac{\ln(I_0) - \ln(I_{\text{eff}})}{\mu_{\text{eff}}} \\ t_{\text{eff}} &= \frac{1}{\mu_{\text{eff}}} (\ln(\tilde{t}\mu_{\text{eff}}) - \ln(1 - \exp(-\tilde{t}\mu_{\text{eff}}))) \end{aligned} \quad (5.42)$$

hinter dem Punkt \tilde{L} (in Strahlrichtung blickend).

Gleichung 5.31 kann korrigiert werden zu

$$\Phi_I = \frac{dN_Q}{d\Omega} \frac{1}{\overline{QP_{\text{eff}}}} \exp(-\mu_{\text{eff}} t_{\text{eff}}). \quad (5.43)$$

Dabei gilt $\overline{QP_{\text{eff}}} = \overline{QP_j} - \tilde{t} + t_{\text{eff}}$.

Diese Korrektur ist durchgeführt worden und die Simulationen aus dem vorigen Kapitel wurden wiederholt. Die Ergebnisse des Streumodells mit dieser Korrektur sind in Abb. 5.20 im Vergleich mit den oben bereits gezeigten Ergebnissen dargestellt.

Für die korrigierten Ergebnisse (siehe Abb. 5.20) lässt sich festhalten, dass

- die Korrektur erfolgreich ist. Insofern, als dass die Intensitäten der zweiten Streuordnung erwartungsgemäß ansteigen. Der Fehler ist also gemindert. Wobei die Intensitäten auch nach der Korrektur kleiner sind als die der MC-Simulationen.
- die Ortsverteilung der Streuintensitäten sich ändert. Besonders auffällig ist, dass der Verlauf der Linienprofile für den Stufenzylinder nach der Korrektur besser passt. Das geht einher mit dem relativen Abstand der Linienprofile für verschieden dicke Stufen (ohne der Korrektur haben die beiden dargestellten Stufen etwa selbes Intensitätsniveau). Diese Linienprofile lassen sich, durch korrekte Skalierung, sogar mit den MC-Profilen in Deckung bringen. Dies sei als Hinweis zu werten, dass die Korrektur verwendet werden muss.
- nach dieser Korrektur die Differenz zu den MC-Simulationen deutlich kleiner wird (siehe Tab.5.1).

Berechnung des mittleren Materials in einem Streustrahlenkegel Für die Berechnung der Streustrahlung erster Ordnung in einem Streu-kegel wurde ein effektives Material μ_{eff} eingeführt. Das gilt auch für die Korrektur der Transmissionslängen. Grundsätzlich kann das Integral in Gleichung 5.34 auch abschnittsweise ausgeführt werden. Es würde dann über eine Abfolge von Kegelstümpfen mit je einem Material integriert. Um dieses Vorgehen zu realisieren, müsste im Datentupel 5.3 jedoch die konkrete Abfolge von Materialien entlang der Kegelmittelachse gespeichert werden. Entsprechend müsste man auch den effektiven Wirkungsquerschnitt (Glg. 5.25) ersetzen. Insgesamt verkompliziert sich die Berechnung also um die abschnittsweise Berechnung von den Gleichungen 5.36 bis 5.38 mit anschließender Summation der Teilergebnisse. Diese Erweiterung des Algorithmus ist im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter verfolgt. Es sei an dieser Stelle noch auf einen Nebeneffekt hingewiesen, den dieses Vorgehen nach sich zieht. Dadurch, dass die Abfolge der Materialien im Objekt stark richtungs- und

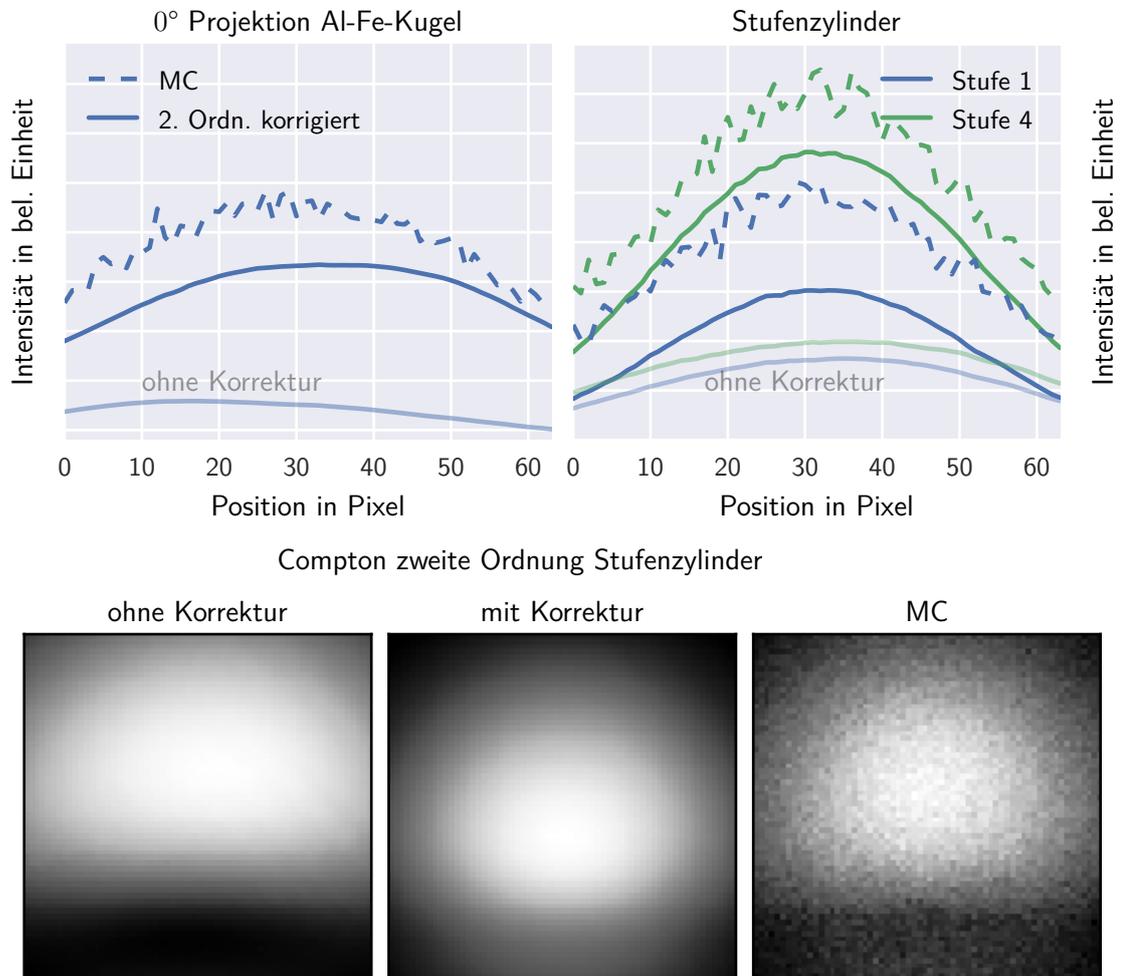


Abb. 5.20.: Streusimulation zweiter Ordnung Comptonstreuung mit Korrektur der Transmissionslängen für den Stufenzylinder. Die Abbildung wiederholt die Ergebnisse aus den Abb. 5.13, 5.16 und 5.11 nachdem die Korrektur nach Glg. 5.43 durchgeführt wurde. Die beiden analytisch simulierten Streubilder enthalten jeweils CC, CR und RC. Das ist dasselbe Signal, welches im MC-Streubild summiert ist.

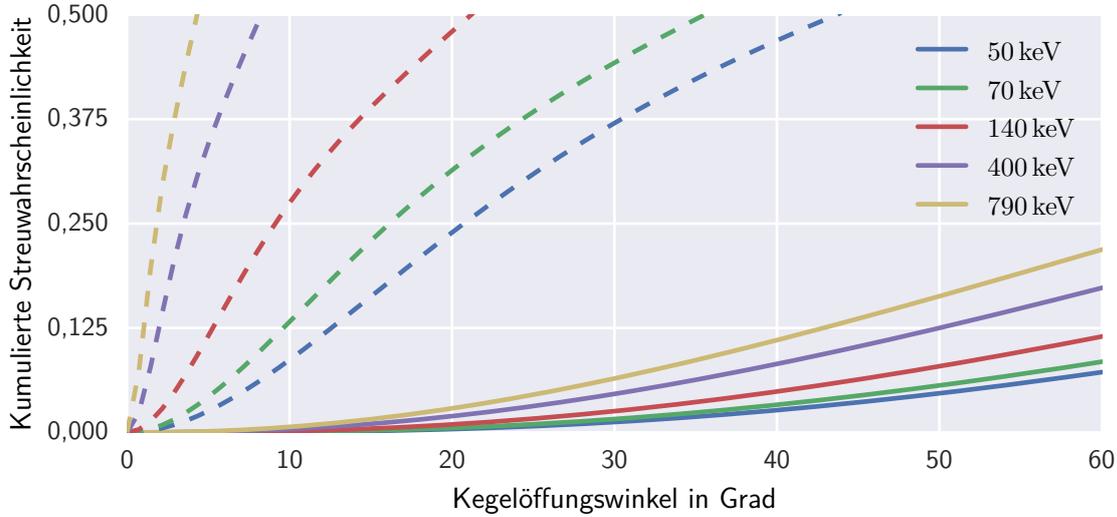


Abb. 5.21.: Abstastgenauigkeit des Wirkungsquerschnitts durch die Streukegel. Die Abbildung zeigt das Integral des Wirkungsquerschnitts um die Vorwärtsrichtung als Funktion des Kegelöffnungswinkels. Zur Übersichtlichkeit wurde auf den Maximalwert (den totalen Streuquerschnitt) normiert. Die gestrichelten Kurven gelten für den Rayleigheffekt, durchgezogene für Comptoneffekt.

ortsabhängig sein kann¹⁰⁰, muss man bei diesem Algorithmus davon ausgehen, dass die Rechendauern für einzelne Streupunkte nicht mehr identisch sind.

Fehler in einer kalibrierten Streusimulation

Eine kalibrierte Streustrahlsimulation analog zu der kalibrierten analytischen Simulation aus Kap. 4, ist nicht möglich. Wie schon in Abschnitt 5.2 beschrieben, ist der Grund dafür die Abnahme der Photonenenergie aufgrund des Comptoneffektes. Nachdem in das hier entwickelte Streumodell ohnehin einige Approximationen eingehen, kann man die Frage diskutieren, welcher Fehler induziert wird, wenn man den Comptoneffekt „energieerhaltend“ modelliert $E = E'$. In diesem Falle wären die Voraussetzungen für eine Kalibration der Simulation wieder gegeben¹⁰¹.

Es soll im Folgenden der energieabhängige Fehler berechnet werden, der sich ergibt, wenn ein energieerhaltender Comptoneffekt in einer Simulation eingesetzt wird. Dabei geht man weiter von den relevanten Detektionssystemen aus, also indirekt konvertierenden Detektoren.

¹⁰⁰ Man denke sich z.B. eine Sandwich-Struktur. Es gibt Richtungen, entlang einzelner Schichten ohne Materialübergang. Senkrecht zu den Schichten gibt es dagegen sehr viele Materialwechsel.

¹⁰¹ Alternativ kann man natürlich auch wieder entweder das Detektorverhalten oder das Quellspektrum schätzen und somit das Systemspektrum in seine beiden Komponenten zerlegen. Das entspricht allerdings nicht der Idee von „Kalibration“ wie sie in Kap. 4 vorgestellt ist.

Es werden solche mit CdWO_4 - oder CsI -Szintillator verwendet.

Es gibt zwei Fehler bei der Streuintensitätsberechnung für $E = E'$. Zum einen ist die deponierte Energie der Photonen falsch, man vergleiche dazu $E = E'$ und $E'(E)$ aus Gleichung 2.13 (siehe Abb. 5.22 oben). Zum anderen wird die Effizienzkurve des Szintillators bei der falschen Energie ausgewertet, sodass die deponierte Energie mit einem falschen Gewichtungsfaktor zur Intensität beiträgt.

Sei die Szintillatoreffizienz $\propto 1 - \exp(-\mu t)$, dann kann die Intensität als proportional zur deponierten Energie und der Effizienz angegeben werden $I(E) \propto E(1 - \exp(-\mu(E)t))$. In Abb. 5.22 ist der relative Fehler

$$\frac{E(1 - \exp(-\mu(E)t)) - E'(E)(1 - \exp(-\mu(E'(E))t))}{E'(E)(1 - \exp(-\mu(E'(E))t))} \quad (5.44)$$

als Funktion der Primärenergie aufgetragen (gilt nur für erste Ordnung Comptonstreuung). Man liest beispielsweise ab, dass bei 400 keV die relativen Fehler zwischen 2 % und 25 % liegen (für die gezeigten Streuwinkel). Je nach verwendetem Energiebereich und den erwarteten Streuwinkeln kann die Abschätzung $E = E'$ also zu vernachlässigbaren Fehlern führen. Die Tatsache, dass bei kleinen Energien $E < 40$ keV der relative Fehler divergiert stört dieses Argument nicht. Denn man darf erwarten, dass solche Photonen von den typischen Objekten, für die Streustrahlung simuliert wird, stark absorbiert werden (oder in einem Strahlaufhärtungsfilter absorbiert werden). Sie tragen also wenig zum Gesamtsignal bei. Unter diesem sehr pragmatischen Gesichtspunkt kann man, in bestimmten Anwendungsfällen, also einen „energieerhaltenden Comptoneffekt“ als weitere Abschätzung in das analytische Streumodell einbringen.

Fazit

Zusammenfassend und mit Blick auf die in Abschnitt 5.2 genannten Anforderungen an ein analytisches Streumodell lässt sich festhalten,

- dass die vorgeschlagene Berechnung der Transmissionslängen, welche trajektorienunabhängig funktioniert, eine wesentliche algorithmische „Abkürzung“ ergibt. Das gilt sowohl im Bezug darauf, dass es gelungen ist das Raytracing von den Berechnungen zur Streuphysik zu entkoppeln, als auch im Bezug auf die Berechnung der zweiten Ordnung Streustrahlung, die mit derselben Menge an vorberechneten Transmissionslängen auskommt.
- dass die Berechnung der zweiten Ordnung Streustrahlung, bezüglich der räumlichen Verteilung der Intensitäten, insbesondere mit der Korrektur des letzten Abschnittes, gut gelingt.

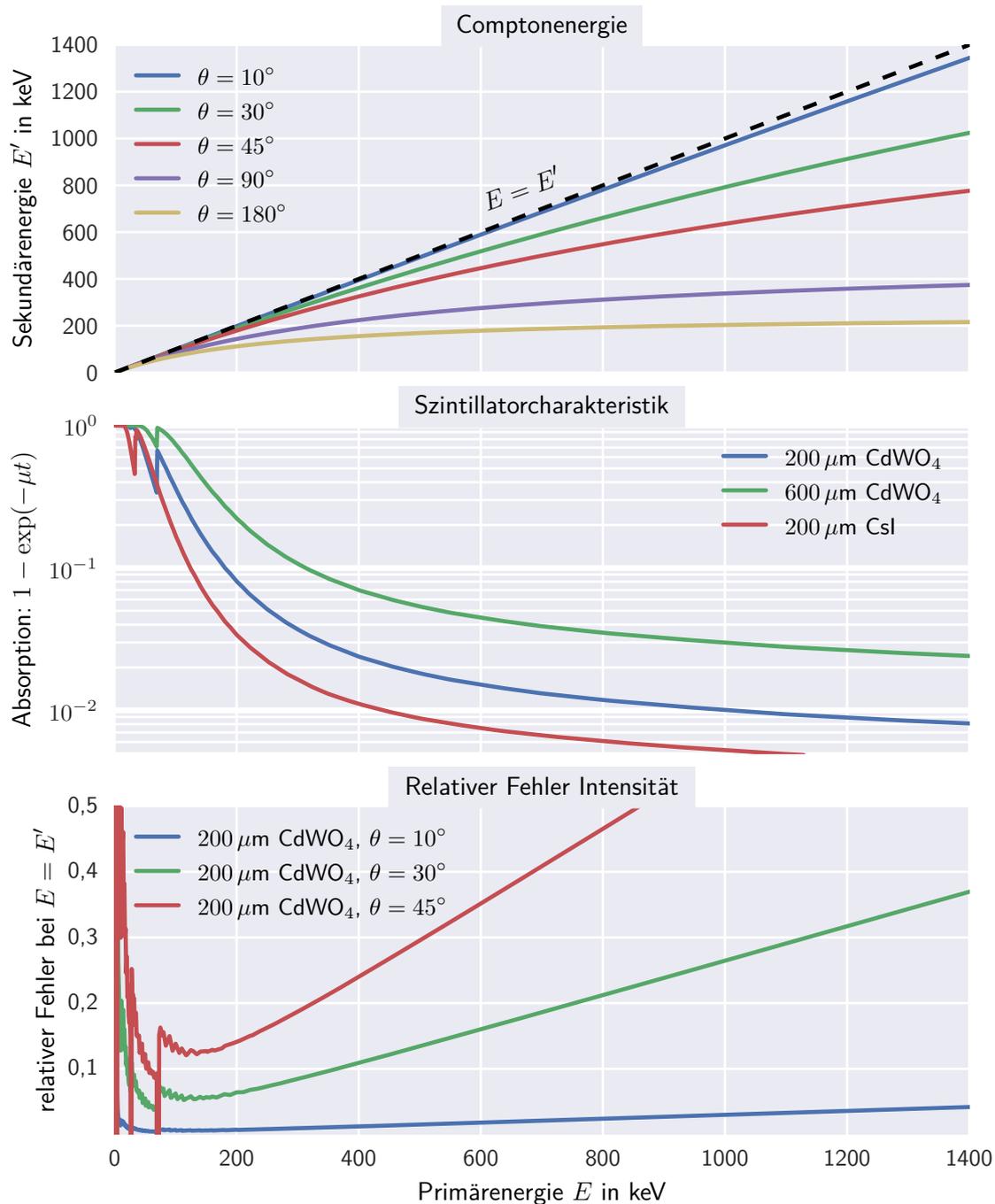


Abb. 5.22.: Darstellung der Fehlerquellen und des relativen Fehlers für eine kalibrierte Streusimulation. Oben ist Glg. 2.13 aufgetragen. In der Mitte sind typische Detektionseffizienz-Kurven dargestellt. Unten ist der relative Fehler der Intensitätsberechnung für die Abschätzung $E = E'$ gezeigt.

- dass die Berechnung der Streustrahlprojektionen, gegenüber der MC-Methode deutlich vereinfacht ist, sodass auch CT-Simulation mit Berücksichtigung der Streustrahlung möglich wird.
- dass die Berechnung der Absolutintensitäten im Rahmen von etwa 7% bis 15% Abweichung zu einer MC-Simulation möglich ist. Insbesondere die Intensitäten erster Ordnung ergeben sich exakter. Dennoch will ich hier festhalten, dass man über weitere Korrekturen nachdenken sollte. Solange diese die algorithmische Einfachheit nicht aufhebt, die im Wesentlichen auf der a priori Erzeugung des Datentupels 5.3 beruht¹⁰².
- dass die Wahl der Diskretisierung des Objektes (auch der Ausrichtung des Punktgitters aus Abschnitt 5.2) ausschlaggebend ist für die Qualität der Ergebnisse. Das gilt umso mehr, je größer die Röntgenenergie ist, da dann die Richtungsverteilung der Streustrahlung stärker vorwärtsgerichtet ist (für Rayleigh- und Comptoneffekt).
- dass die Streustrahlung des Rayleigheffekts in zweiter Ordnung nicht gut berechnet werden kann (bezüglich der hier gewählten bzw. relevanten Materialien und Energien). Allerdings liegen die Wirkungsquerschnitte für den Rayleigheffekt in zweiter Ordnung, wie schon in Abschnitt 2.1.4 besprochen, bei den relevanten Materialien und Energien so, dass die integrale Intensität dieses Streustrahlungsanteils im Bereich weniger Prozent der gesamten Streuintensität bleibt. Es ergibt sich dadurch also keine wesentliche Fehlerquelle.

Das neu gefundene Modell zur zweiten Ordnung Streustrahlung hebt sich von den hybriden Streumodellen in zwei Punkten ab.

Zum einen hat dieses Modell einen deterministischen numerischen Aufwand, der nur von den vor Beginn einer Simulation festgelegten Diskretisierungen abhängt. Damit sind die Rechenzeiten dieses Modells zwar immer noch eine Funktion des Objektvolumens¹⁰³, allerdings sind sie unabhängig vom Zustand eines (Pseudo-)Zufallszahlengenerators sowie von Material und Röntgenenergie. Insbesondere ist das resultierende SNR der simulierten Projektionen nicht an die Simulationsdauer gekoppelt. Sofern nicht, wie in den Simulationsbeispielen oben zu sehen, Diskretisierungsartefakte auftreten, ergibt sich für dieses

¹⁰² Man kann beispielsweise untersuchen, ob es gelingt mittels MC-Simulation heuristische (voraussichtlich energie- und materialabhängige) Korrekturfaktoren zu finden, welche — einmal tabelliert — zur Korrektur dieses Modells dienen.

¹⁰³ Dabei ist unterstellt, dass das zu simulierende CT-System nicht variiert ist. Sonst ist die Zahl der Detektorpixel natürlich auch zu berücksichtigen. Die Detektorpixelzahl geht in analytischen Modellen immer linear in die Simulationsdauer ein. In MC-Modellen hat sie keinen direkten Einfluss. Man erhält jedoch ein kleineres SNR durch feinere Diskretisierung und die Simulationsdauer geht quadratisch mit dem SNR (Photonenzählstatistik).

analytische Modell das typische Verhalten, dass die Simulationsergebnisse frei von Rauschen sind.

Zum anderen hat dieses Modell konstruktionsbedingt nicht die Notwendigkeit die Streupunkte trajektorienabhängig zu setzen. Im hybriden Verfahren muss die erste Stufe, die MC-Simulation, neu durchgeführt werden, wenn sich die Position der Röntgenquelle relativ zum Objekt geändert hat.

Im Vergleich zu der LBSA lässt sich festhalten, dass dieses Modell in der ersten Ordnung Streustrahlungssimulation *voll* multimaterialienfähig ist. Bezüglich der zweiten Ordnung Streustrahlung hat auch dieses Modell eine Approximation für den Multimaterialfall. Nachdem diese Näherung allerdings bezüglich der *Streukegel* gemacht wird, betrachtet dieses Modell die Materialzusammensetzung für die Berechnung der zweiten Ordnung lokal. Demgegenüber steht in der LBSA ein *mittleres streuendes* Material, welches über das gesamte Objekt ausgedehnt ist.

Die LBSA ist prinzipiell nur für die Approximation der ersten Ordnung Streustrahlung geeignet. Die zweite Ordnung wird über die Anwendung eines Korrekturfaktors auf das Modell der ersten Ordnung approximiert. Das hier entwickelte Modell geht also sowohl bei der Definition des streuenden Materials, als auch durch die Verwendung der Objektform für das Raytracing über die LBSA hinaus.

6. Bildgütemaß für die automatisierte Optimierung der Aufnahmeparameter

In Kapitel 3 ist ein Brute-Force Ansatz zur Aufnahmeplanung von CT-Messungen definiert. Dieses Verfahren steht exemplarisch für alle Optimierungsverfahren, welche ein Gütemaß benötigen. Ein solches Gütemaß für CT-Aufnahmen zu definieren ist Gegenstand dieses Kapitels. Dazu ist zunächst nicht vorausgesetzt, dass es sich um ein bivariates Gütemaß handeln soll¹⁰⁴. Im Folgenden wird also auch zu klären sein, bezüglich welcher Referenz die Güte einer CT-Aufnahme definiert wird. Dabei setze ich das *ideale Tomogramm* aus Abschnitt 3.1.1 als das Ziel der Bemühungen um die Gütedefinition voraus. Dieses wurde als die physikalisch korrekte Messung definiert. Das Kapitel geht allerdings über die Definition eines Gütemaßes hinaus. Vor der Definition des Gütemaßes stelle ich eine Interpretation des CT-Messprozesses als Informationsübertragung im Sinne der Informationstheorie vor. Diese Vorgehensweise ist zum einen Motivation und Herleitung für das konkret vorgeschlagene Gütemaß, zum anderen eröffnet sich ein neuartiger Blick auf den CT-Aufnahmeprozess.

6.1. Neue Entropie-basierte Bildgütemaße für die Computertomographie

6.1.1. Informationstheoretische Sicht auf den CT-Aufnahmeprozess

Die Informationstheorie geht auf das Problem der möglichst optimalen Übertragung einer Information zwischen zwei voneinander entfernten Orten mittels eines Übertragungssystems (z.B. Telefonleitung, Funkstrecke) zurück. Das Übertragungssystem wird als *Kanal* bezeichnet. Optimal ist: fehlerfreies, schnelles und ressourcensparendes Übertragen. Die *Kanalkapazität* (die noch näher zu betrachten sein wird) ist die Fähigkeit eines Kanals eine Menge von Information in einer bestimmten Zeiteinheit zu übertragen (so ist dieser Begriff von Shannon in Ref. [90] eingeführt worden). Eine sehr bemerkenswerte Publikation, in der dieses „Grundproblem“ mathematisch beschrieben und untersucht wird, ist „A mathematical theory of communication“ von C. E. Shannon aus dem Jahr 1948, Ref. [89].

¹⁰⁴ Optimierungsalgorithmen, so wie sie hier angedacht sind, sind in aller Regel vergleichend. Sie arbeiten also mit einer größer-kleiner Relation hinsichtlich irgendeines Maßes.

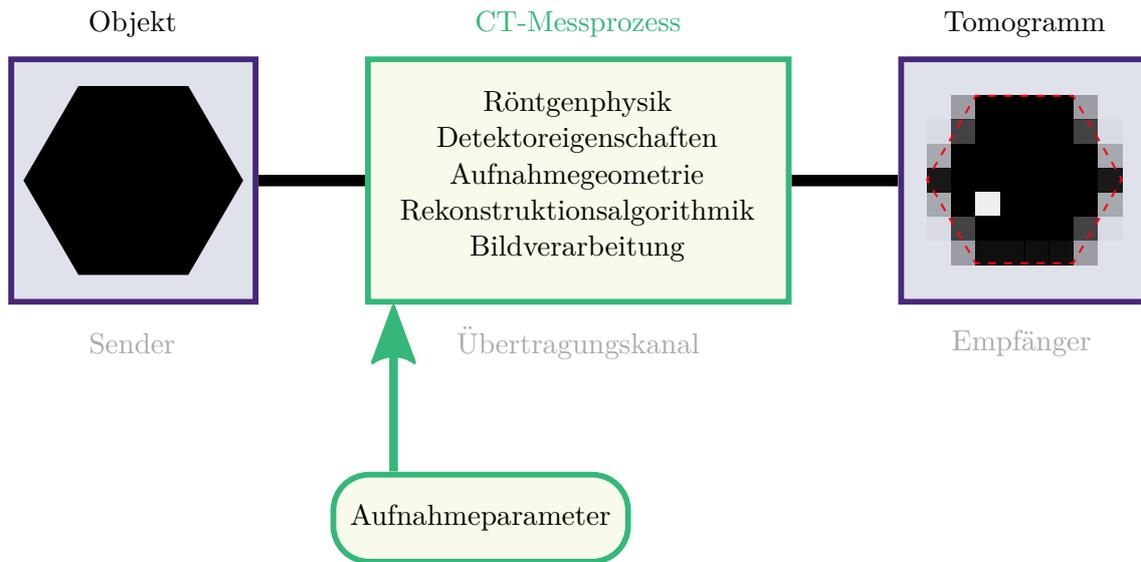


Abb. 6.1.: Sender-Empfänger-Modell zur Informationsübertragung. Das Modell der Informationstheorie entnommen und bezüglich des CT-Messprozesses interpretiert. Der Sender ist das zu tomographierende Objekt bezüglich seiner röntgenographischen Eigenschaften. Empfänger ist das (digital gespeicherte) Tomogramm, welches genau diese Eigenschaften wiedergibt. Dazwischen steht die Gesamtheit des CT-Messprozesses, der als *fehlerbehafteter Übertragungskanal* fungiert. Dessen Eigenschaften sind über die Aufnahmeparameter (hier einschließlich Rekonstruktionsparameter) veränderbar.

Ich werde im Folgenden das Sender-Empfänger-Modell auf den computertomographischen Messprozess übertragen. In Details werde ich mich dazu von der Betrachtungsweise der Informationstheorie lösen. Mein Ziel ist es, durch die Interpretation des CT-Messprozesses als Informationsübertragungsproblem, die Optimierungsmethoden der Informationstheorie für das Aufnahmeplanungsproblem anwendbar zu machen. Letztlich gewinne ich dadurch die unten abgeleiteten Bildgütemaße, welche als Optimierungskriterien dienen können.

Ziel einer CT-Messung ist es, die 3D-Ortsverteilung der röntgenographischen Eigenschaften des zu untersuchenden Objektes zu erhalten. Damit sind Sender und Empfänger identifiziert:

Das untersuchte Objekt ist bezüglich seiner Eigenschaften mit Röntgenstrahlung in Wechselwirkung zu treten Quelle der Information. Das digital abgespeicherte Tomogramm ist die Senke. Abb. 6.1 veranschaulicht das graphisch.

Damit verbleibt die Definition des Kanals: Darunter seien alle parametrierbaren Prozessschritte der CT-Messung verstanden, siehe auch die Übersicht in Abb. 3.2. Die Wahl und Parametrierung der CT-Anlage, z.B. hinsichtlich des Auflösungsvermögens, des Röntgenspektrums oder der verschiedenen Röntgenspektren, die Wahl der Messgeometrie und Trajektorie sowie die Wahl der Belichtungszeit. Bezüglich der Datenverarbeitung ist die Wahl des Rekonstruktionsverfahrens und dessen Parametern sowie die Wahl der sonstigen Signalverarbeitungsschritte zu nennen.

Jeder Prozessschritt für sich genommen und auch der gesamte Prozess können Ursprung von Fehlern im Tomogramm sein. Insofern sei der CT-Messprozess als fehlerbehafteter bzw. fehlerinduzierender Übertragungskanal („noisy channel“¹⁰⁵) interpretiert.

In der Informationstheorie ist das Ziel der Betrachtungen eines Übertragungssystems eine *Kanalcodierung* zu finden, die das schnelle und fehlerfreie Übertragen von Information zulässt. Dabei ist der fehlerbehaftete Kanal keine Variable des Problems, sondern er definiert das Problem. Der Kanal wird in seinen physikalischen Eigenschaften als unveränderbar angenommen¹⁰⁶ und seine Eigenschaft Fehler zu dem Signal zu addieren macht den Einsatz eines Codierers und eines Dekodierers am Ein- bzw. Ausgang des Kanals notwendig. Die Optimierungsaufgabe der Informationstheorie lautet dann: *Finde eine Kanalcodierung, die die Kanalkapazität eines gegebenen Kanals bestmöglich zur Informationsübertragung ausnutzt.*

Insofern gibt es einen Unterschied zu der Betrachtungsweise die ich für die CT-Messung eingeführt habe, denn ich nehme an, dass die Optimierung dadurch erwirkt werden kann, dass der Kanal an sich verändert wird. Die Optimierungsaufgabe für die CT-Messung lautet also: *Finde einen „Kanal“, der höhere Kanalkapazität hat und der möglichst wenig Fehler zum Signal hinzufügt.* Oder anders ausgedrückt: Welches CT-System ist mit welcher Parametrierung in der Lage, die röntgenographischen Eigenschaften des Objektes, mit möglichst wenig Fehlern in das Tomogramm zu übertragen? Wie sich noch zeigen wird, ist zur Beantwortung dieser Frage die Kanalkapazität des CT-Systems gegebenenfalls von untergeordneter Bedeutung. Dies ist nur eine alternative Formulierung dessen, was in Kap. 3 als das Aufnahmeplanungsproblem definiert wurde.

Das Konzept, einen Messprozess bzw. einen allgemeinen Datenaufnahme- und -verarbeitungsprozess als Informationsübertragungsproblem aufzufassen, ist in anderem Kontext ähnlich angewendet worden. Derartige Ansätze sind auch Gegenstand jüngerer Forschung.

¹⁰⁵ Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass im Gebrauch der Informationstheoretiker „noisy“ alle Fehlerarten umfasst, die Übersetzung als „Rauschen“ wäre hier also möglicherweise irreführend.

¹⁰⁶ Gemäß des Ursprungs dieser Wissenschaft stelle man sich dabei eine fest verlegte Telefonleitung vor.

Dabei ist, wie hier dargestellt, jeweils von Nutzen gewesen, dass die mathematischen Werkzeuge der Informationstheorie zur Optimierung verwendet werden konnten¹⁰⁷.

In Ref. [23] wird die Transinformation¹⁰⁸ als Kanalkapazität verwendet, um das kombinierte Problem Datenaufnahme inklusive Datenauswertung für eine 2D Bildgebung (Mikroskopie oder ähnliches) mit anschließender Segmentierung zu untersuchen. Es wird der Spezialfall betrachtet, dass ein Objekt mit einer rauschbehafteten 2D-Bildgebungsmodalität abgebildet wird. Für das Rauschen werden verschiedene, physikalisch motivierte Statistiken in Betracht gezogen. Randbedingung ist, dass das Bildgebungsverfahren stark verrauschte Bilder erzeugt. Der freie, zu optimierende Parameter dieses Aufnahmeproblems ist das Flächenverhältnis aus abgebildetem Objekt und Bildhintergrund. Rousseau et al. finden optimale Flächenverhältnisse im Bereich von 0,5 bis 0,7 in Abhängigkeit der (physikalisch vorgegebenen) Verteilungsfunktion des Rauschens im Bildhintergrund. Besonders erwähnenswert ist, dass die Herleitung keine Annahmen über das abgebildete Objekt machen muss (z.B. Annahmen über die Form oder Kontur).

In Ref. [40] wird ebenfalls ein solcher Ansatz verfolgt. Sender und Empfänger sind (fehlerbehaftete) Abbildungen von menschlichem Gewebe die im Zuge medizinischer Diagnostik zu verschiedenen Zeitpunkten einer fortschreitenden Krankheit des Gewebes erzeugt wurden. Der Übertragungskanal ist der biologische Prozess, der zwischen den Zeitpunkten der Datenaufnahme abläuft. Bei einem nicht degradiertem Gewebe entspräche das also einem nicht verlustbehaftetem Übertragungskanal und umgekehrt. Basierend auf diesem Modell untersuchen und quantifizieren Giacalone et al. die Vorhersagekraft einer früheren Datenaufnahme auf die spätere Datenaufnahme und damit die Vorhersagekraft der Datenaufnahme zu einem bestimmten Zeitpunkt auf den weiteren Krankheitsverlauf. In Ref. [40] sind noch weitere Publikationen genannt, welche mit dem informationstheoretischen Ansatz Probleme aus dem Bereich der Bildgebung und -visualisierung adressieren. Ohne weitere Erläuterung will ich sie hier der Vollständigkeit halber auflisten: es handelt sich um die Referenzen [8, 9, 14, 18] und um die Lehrbücher [16, 57].

Das Sender-Empfänger-Modell im Hinblick auf simulationsgestützte Aufnahmeplanung

Ziel dieser Arbeit ist es, Werkzeuge zur simulationsgestützten Aufnahmeplanung zur Verfügung zu stellen. Mit Hilfe des Sender-Empfänger-Modells ist eine neue Betrachtungsweise für den CT-Messprozess eingeführt. Durch die Untersuchung der Information bzw. der Informationsübertragung im Sender-Empfänger-Modell können Rückschlüsse darüber gelingen, ob und mit welcher Güte der Kanal „CT-System“ die gegebene Objektinformation

¹⁰⁷ An dieser Stelle gilt mein Dank Prof. Rousseau, der mich auf diesen Zusammenhang „gestoßen“ hat.

¹⁰⁸ Definition folgt im nächsten Abschnitt.

überträgt. Das Ergebnis einer Aufnahmeplanung soll sein, dass der CT-Parametersatz bekannt ist. Insofern müssen also in irgendeiner Weise systematisch die Übertragungseigenschaften des Kanals in Abhängigkeit des Parametersatzes erfasst und bewertet werden. Als Bewertungskriterium will ich im Folgenden ein Bildgütemaß definieren, welches aus der Informationstheorie folgt.

Die systematische Variation der CT-Parameter kann nicht einfach experimentell erfolgen. Im Ansatz dieser Arbeit gehe ich davon aus, dass der Kanal simulativ nachgestellt wird. Mittels CT-Simulation wird also der fehlerbehaftete Kanal untersucht bzw. verändert, wenn die Parameter des virtuellen CT-Systems verändert werden. Insofern dienen die beiden vorangegangenen Kapitel dazu, den hier definierten Kanal so simulieren zu können, dass der Informationsgehalt an seinem Ausgang möglichst korrekt ist.

6.1.2. Shannon-Entropie und abgeleitete Entropiemaße

Für die folgenden Herleitungen und Definitionen übernehme ich Ausführungen aus Ref. [22] und löse mich von der dort gegebenen Darstellung, indem ich den Bezug zum CT-Aufnahmeplanungsproblem herstelle¹⁰⁹. Dort finden sich auch Beweise für die Zusammenhänge, die hier teilweise nur genannt werden. Eine weitere, etwas didaktischere und jüngere Darstellung mit sehr ähnlichem Inhalt ist Ref. [12], deren Interpretationshinweise ich gelegentlich übernehme.

Definition der Shannonschen Entropie und wichtige Eigenschaften

Die Definition eines Maßes für die Menge von „Information“ ist eng mit der nicht trivialen Aufgabe verknüpft, eine Definition für die Information an sich zu finden. Letzteres kann auf verschiedene Weise diskutiert werden. Sehr ausführlich kann man das bei Pagel [78] nachlesen. Ich will diesbezüglich gerade so ausführlich werden, dass verständlich wird, wie die Information bezüglich des Senders und Empfängers in obigem Modell quantifiziert werden kann.

Nach Shannon wird der Informationsgehalt einer (Informations-)Quelle anhand ihrer stochastischen Eigenschaften festgelegt. Eine Quelle sei durch eine Zufallszahl X mit $N \in \mathbb{N}$ möglichen, diskreten Ereignissen x_i beschrieben. Am Ausgang der Quelle (was auch immer sie sein mag) kann man also Ereignisse aus dem Ereignisraum von X beobachten. Die Menge aller x_i stellen das sogenannte *Alphabet* der Quelle dar. Die Wahrscheinlichkeiten der Einzelereignisse werden mit $p_i = p(X = x_i)$ für $i = 1 \dots N$ bezeichnet. Die Shannon-

¹⁰⁹ Im Wesentlichen werden Symbole umbenannt und bekommen eine kontextbasierte Bedeutung.

Entropie H ist definiert als

$$H(X) = - \sum_{i=1}^N p_i \log_b(p_i), \quad (6.1)$$

wobei die Basis b des Logarithmus frei gewählt werden kann. Für $b = 2$, wie in der Informatik gebräuchlich, hat die Entropie die Einheit $[H] = \text{Bit}$. Im Rahmen dieser Arbeit werde ich ausschließlich $b = 2$ wählen.

Für die Gleichverteilung $p_i \equiv \frac{1}{N}, \forall i$ wird die Entropie maximal

$$H_{\max} = - \sum_{i=1}^N p_i \log_2(p_i) = N \frac{1}{N} \log_2(N) = \log_2(N). \quad (6.2)$$

Damit lässt sich auch eine normierte Entropie $H_{\text{Norm}} = \frac{H}{H_{\max}} \in [0, 1]$ definieren.

Alfréd Rényi hat zur Entwicklung der nach ihm benannten Rényi-Entropie ein Axiomensystem aufgestellt. Die Shannon-Entropie ist ein Spezialfall der Rényi-Entropie, deshalb gelten die Axiome auch für diese. Für ein Informationsmaß soll gelten, dass [78]

- es stetig ist (bezüglich der Wahrscheinlichkeiten).
- es bei Gleichverteilung aller Elemente des Alphabetes maximal wird.
- sich das Maß nicht ändert, wenn dem Wahrscheinlichkeitsraum ein unmögliches Ereignis angefügt wird.
- es additiv ist.

Diese Eigenschaften gelten so für Glg. 6.1.

Definition weiterer Entropiemaße für das Sender-Empfänger-Modell

Für die weitere Betrachtung seien zwei Zufallszahlen O und M analog zu X definiert (o_i und m_j sind die Elemente der Ereignisräume, $p(M = m_i)$ und $p(O = o_j)$ die zugehörigen Wahrscheinlichkeiten). O sei dem Objekt, also dem Sender in obigem Modell, und M dem Tomogramm, also dem Empfänger, zugeordnet (M für „Messergebnis“).

Gemäß der Aufgabenstellung der Informationstheorie kann der Informationsgehalt auf beiden Seiten des Kanals und deren Zusammenhang untersucht werden, um Rückschlüsse auf die Eigenschaften des Kanals zu ermöglichen bzw. die theoretischen Grenzen des Übertragungssystems zu bewerten. Das erfordert die Definition weiterer Entropien. Für die beiden Zufallszahlen sei dazu auch die gemeinsame Verteilung (M, O) definiert und die

Wahrscheinlichkeit für das Eintreten des Ereignisvektors (m_i, o_j) mit $p(M = m_i, O = o_j)$ bezeichnet. Zusätzlich seien die bedingten Wahrscheinlichkeiten $p(O|M)$ und $p(M|O)$ bekannt.

Die *totale Entropie* (joint entropy) ist definiert als

$$H(M, O) = - \sum_i \sum_j p(M = m_i, O = o_j) \log_2(p(M = m_i, O = o_j)). \quad (6.3)$$

Die totale Entropie umfasst die Information auf beiden Seiten des Kanals. Sie ist die *gesamte Informationsmenge* die bei Sender und Empfänger auftritt.

Die *bedingte Entropie* (conditional entropy) ist definiert als

$$H(M|O) = - \sum_i \sum_j p(M = m_i, O = o_j) \log_2(p(O = o_j|M)), \quad (6.4)$$

entsprechendes gilt für $H(O|M)$. Die bedingte Entropie quantifiziert den Informationsgehalt des Senders (Empfängers) unter Kenntnis der Statistik des Empfängers (Senders).

Die *Transinformation* (mutual information) ist definiert, als

$$I(O, M) = \sum_i \sum_j p(O = o_j, M = m_i) \log_2 \left(\frac{p(O = o_j, M = m_i)}{p(O = o_j)p(M = m_i)} \right). \quad (6.5)$$

Die Transinformation misst die Informationsmenge, die Empfänger und Sender gemeinsam haben. Dies könnte also die Informationsmenge sein, die der Kanal übertragen hat. Formal handelt es sich bei der Transinformation um ein Abstandsmaß zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Die Transinformation ist ein Spezialfall der Kullback-Leibler Divergenz, die eine Metrik für Wahrscheinlichkeitsverteilungen ist. Die Transinformation ist nach Shannon für die Bestimmung der Kanalkapazität nötig. Die Kanalkapazität C ist die maximal mögliche Transinformation bezüglich der Sender-Verteilungsfunktion: $C = \sup_{p(O)} I(O, M)$. Im Hinblick auf die Aufnahmeplanung ist das zu tomographierende Objekt keine Variable bzw. kein Parameter der Aufnahmeplanung, denn das Ziel ist ja gerade eine objektspezifische Parametrierung. Deshalb ist auch $p(O)$ nicht veränderlich. An dieser Stelle wird der Unterschied zur Aufgabenstellung der Informationstheorie klar. Die Kanalkapazität des CT-Systems spielt für die Aufnahmeplanung eine untergeordnete Rolle, die Transinformation und die bedingte Entropie jedoch schon. Es stellt sich also nicht die Frage nach einem CT-System das ein spezielles, noch zu bestimmendes Objekt besser abbilden kann als alle anderen. Sondern es wird die Frage nach dem CT-System gestellt, das ein gegebenes Objekt möglichst fehlerfrei abbilden kann.

Zwischen den Entropien der Gleichungen 6.5, 6.4 und 6.3 gibt es folgenden Zusammenhang:

$$\begin{aligned} H(O, M) &= H(O) + H(M|O) \\ H(O, M) &= H(M) + H(O|M) \\ H(O, M) &= H(O|M) + I(O, M) + H(M|O). \end{aligned} \tag{6.6}$$

Es gibt also verschiedene Zerlegungen der totalen Entropie.

Zur Berechnung der Transinformation ist hilfreich, dass

$$I(O, M) = H(O) - H(O|M) = H(M) - H(M|O) \tag{6.7}$$

$$I(O, M) = H(O) + H(M) - H(O, M). \tag{6.8}$$

Für die Transinformation gilt weiter, dass $I(M, O) \geq 0$ mit Gleichheit genau dann, wenn M und O unabhängig sind.

Insbesondere gelten die Ungleichungen

$$H(O|M) \leq H(O) \quad \text{und} \quad H(M|O) \leq H(M) \quad \text{sowie} \tag{6.9}$$

$$I(O, M) \leq H(O), \quad I(O, M) \leq H(M) \quad \text{und} \quad I(O, M) \leq H(O, M). \tag{6.10}$$

Die Zusammenhänge 6.6 und 6.9 sowie 6.10 sind in Abb. 6.2 verdeutlicht. Die Balken stellen jeweils einen Anteil der totalen Entropie dar.

Erste Definition der Tomogrammentropie anhand eines konkreten Beispiels

Bevor eine endgültige Definition eines Bildgütemaßes erfolgt, sei ein Beispiel gezeigt. Ein Objekt, welches tomographiert wird, wird nicht ohne einen gewissen Anteil der Umgebungsluft gemessen¹¹⁰. Das „Objekt“, welches hier betrachtet werden muss, ist also der gesamte Inhalt des Prüfraumes, so wie in Abschnitt 2.1.6 definiert.

Als Beispiel soll hier das Kugelphantom aus Abschnitt 5.6 dienen. Die Kugel, unterteilt in zwei Halbkugeln, habe Radius R und der umgebende Prüfraum sei ein Zylinder mit Radius $R_z > R$ und Höhe $h > R$ (für ein Zahlenbeispiel sei $R_z = h/2 = 7$ cm und $R = 6$ cm).

Bisher ist noch nicht geklärt worden, was die Elementarereignisse der Informationsquelle „Objekt“ sein sollen. Es wurde nur unscharf definiert, dass ein Objekt seine Art und Weise mit Röntgenstrahlung in Wechselwirkung zu treten „sendet“. Im Rahmen dieser Definition ist man frei bei der Wahl der Elementarereignisse dieser Quelle. Die erste und einfachste

¹¹⁰ Eine Ausnahme hiervon bilden sogenannte ROI-Messungen (region of interest). Dabei wird nur ein Teil des Objektes im Prüfraum des CT-Systems abgebildet, um diesen Teil stärker vergrößern zu können. Die Abschätzungen über den Informationsgehalt im messbaren Volumen gelten aber weiter.

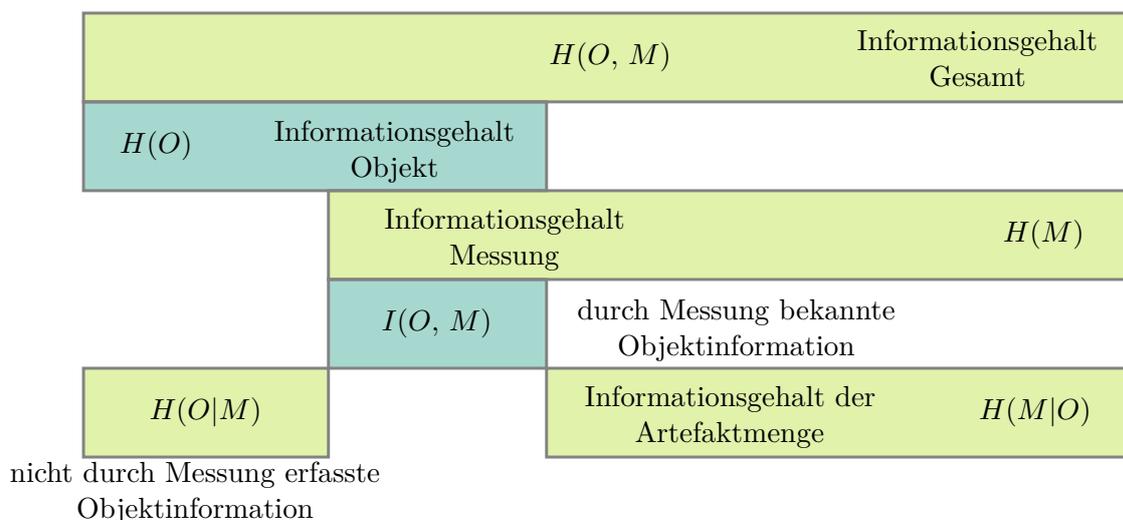


Abb. 6.2.: Diagramm zu den Gleichungen 6.6. Die Abbildung stellt die Zusammenhänge der verschiedenen Entropien dar. Die totale Entropie kann auf verschiedene Weise in die einzelnen Entropien zerlegt werden. In der Abbildung ist bereits die Interpretation eines CT-Messprozesses als Informationsübertragungssystem angewendet und die entsprechenden Bezeichnungen mit angeführt.

Definition ist es die Schwächungskoeffizienten als Elementarereignisse zu verwenden. Das Kugelphantom kann drei verschiedene Schwächungskoeffizienten annehmen, für Luft, Aluminium und Eisen. Wenn von diesem Objekt also ein „Symbol“ gesendet¹¹¹ wird, ist es einer dieser drei Schwächungskoeffizienten. Die Wahrscheinlichkeiten sind leicht zu berechnen. Es handelt sich um die Volumenverhältnisse der einzelnen Materialien V_{Luft} , V_{Al} und V_{Fe} zum Volumen des Prüfraumes V_P :

$$\begin{aligned}
 p(\text{Luft}) &= \frac{V_{\text{Luft}}}{V_P} \approx 0,58 \\
 p(\text{Al}) &= \frac{V_{\text{Al}}}{V_P} \approx 0,21 \\
 p(\text{Fe}) &= \frac{V_{\text{Fe}}}{V_P} \approx 0,21
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

Damit hat das Objekt (= Prüfraum) eine Entropie von

$$\begin{aligned}
 H(O) &= - [p(\text{Luft}) \log_2 p(\text{Luft}) + p(\text{Al}) \log_2 p(\text{Al}) + p(\text{Fe}) \log_2 p(\text{Fe})] \\
 &\approx 1,40 \text{ Bit.}
 \end{aligned}$$

¹¹¹ Ich spreche hier noch nicht von der Übertragung dieser Information durch den Kanal „CT-System“.

Genauer muss man an dieser Stelle davon sprechen, dass die Nachricht über den Schwächungskoeffizienten des Objektes diese Entropie hat. Betrachtet man Glg. 6.11 könnte man hier auch von einer volumenbezogenen Entropie sprechen, da sie nur von der Verteilung der Volumina im Prüfraum abhängt. Es versteht sich also, dass nicht die Kugel in 1,40 Bit codiert ist, sondern ihre Volumenverhältnisse.

Um dem Beispiel einen Zahlenwert für ein mögliches Tomogramm des Kugelphantoms gegenüber zu stellen, sei ein Tomogramm mit gleichverteiltem Rauschen, jeweils um die Schwächungskoeffizienten von Al und Fe, angenommen. Ansonsten habe das Tomogramm keine Artefakte. Die Zufallszahl M nimmt kontinuierliche Werte für den Schwächungskoeffizienten μ an. Nachdem Tomogramme nicht mit beliebiger numerischer Genauigkeit rekonstruiert werden können, wird hier direkt eine Diskretisierung des Schwächungskoeffizienten verwendet und damit das Alphabet der Zufallszahl M festgelegt¹¹². Die Verteilungsfunktion (also das normierte Histogramm des Tomogramms) ist dann eine abschnittsweise konstante Funktion mit drei Bereichen (=Materialpeaks) auf denen sie einen von null verschiedenen Wert annimmt. Es sei angenommen, dass sich die drei Materialpeaks dieses Histogramms nicht überlappen. Der Schwächungskoeffizient für Luft sei ohne Rauschen übertragen, der Histogrammbin für $\mu = 0$ hat also den Wert $p_{\text{Luft}} = 0,58$. Die Breiten $l_{\text{Al/Fe}}$ der Materialpeaks werden für das Beispiel über das SNR festgelegt. Im Fall einer simulationsgestützten Aufnahmeplanung ergibt sich die Verteilung der Schwächungskoeffizienten aus der Simulation der CT-Anlage. Für die Gleichverteilung gilt $l_{\text{Al/Fe}} = \frac{\mu_{\text{Al/Fe}}}{\text{SNR}_{\text{Al/Fe}} \sqrt{12-1}}$. Wobei, nachdem hier das Rauschen das einzige Artefakt sein soll, gelten muss, dass die kumulierten Wahrscheinlichkeiten der drei Materialpeaks gleich den Wahrscheinlichkeiten, wie bei O sind

$$p(M) = p'(\mu) = \begin{cases} p(\text{Luft})\delta(\mu) & \\ p(\text{Al})/l_{\text{Al}} & \text{für } \mu \in [\mu_{\text{Al}} - l_{\text{Al}}/2; \mu_{\text{Al}} + l_{\text{Al}}/2] \\ p(\text{Fe})/l_{\text{Fe}} & \text{für } \mu \in [\mu_{\text{Fe}} - l_{\text{Fe}}/2; \mu_{\text{Fe}} + l_{\text{Fe}}/2] \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Damit ist $\int p'(\mu)d\mu = 1$ und $H(M)$ kann berechnet werden, nachdem eine Diskretisierung für μ festgelegt wurde. Um wieder zu einem Zahlenbeispiel¹¹³ zu kommen, sei $\text{SNR}_{\text{Luft}} = \infty$, $\text{SNR}_{\text{Al}} = 40$, $\text{SNR}_{\text{Fe}} = 30$, $\mu_{\text{Luft}} = 0 \text{ cm}^{-1}$, $\mu_{\text{Al}} = 0,46 \text{ cm}^{-1}$ und $\mu_{\text{Fe}} = 2,90 \text{ cm}^{-1}$. Daraus

¹¹² Man könnte auch mittels der differentiellen Entropie, also der kontinuierlichen Erweiterung von Glg. 6.1, und einer kontinuierlichen Verteilung der μ rechnen. Allerdings hat die differentielle Entropie nicht alle Eigenschaften der diskreten (z.B. Positivität, Skalenfreiheit), sodass die Interpretation dieses Maßes verloren geht [22]. Nachdem für die numerische Rekonstruktion von Tomogrammen ohnehin eine (mehr oder weniger willkürliche) Diskretisierung der Schwächungskoeffizienten stattfindet, liegt es nahe dies auch für dieses Beispiel zu tun.

¹¹³ Die mittleren μ für Al und Fe sind für $E = 100 \text{ keV}$ gewählt.

folgt $l_{\text{Al}} \approx 0,04 \text{ cm}^{-1}$ und $l_{\text{Fe}} \approx 0,33 \text{ cm}^{-1}$. Der größte vorkommende Schwächungskoeffizient in diesem Tomogramm ist $\mu_{\text{max}} = \mu_{\text{Fe}} + l_{\text{Fe}}/2 \approx 3,23 \text{ cm}^{-1}$. Diskretisiert man das Intervall $[0; 3, 23] \text{ cm}^{-1}$ der auftretenden Schwächungskoeffizienten in 2048 Schritten (11 Bit), so kann der Schwächungskoeffizient mit einer Genauigkeit von etwa $0,002 \text{ cm}^{-1}$ dargestellt werden (damit hat das gedachte CT-Messsystem die Fähigkeit eine sehr hohe Genauigkeit mit 0,06 % relativen Fehler darzustellen).

Die Entropie des auf diese Weise beschriebenen Tomogramms berechnet sich zu

$$H(M) \approx 4,0 \text{ Bit.}$$

Das ist fast das dreifache der Objekt-Entropie.

Für CT an industriellen Objekten kann man davon ausgehen, dass $H(O)$ klein ist. Das lässt sich abschätzen. Dazu sei angenommen, dass der Prüfraum typischerweise zu einem gewissen Anteil p_{Luft} mit Luft gefüllt ist (sei $p_{\text{Luft}} = 10\%$). Die maximale Entropie des Prüfraumes ergibt sich bei Gleichverteilung der Schwächungskoeffizienten. Das heißt für das Objekt: alle Volumenverhältnisse der einzelnen Materialien sind gleich. Damit lässt sich die maximal erwartbare Entropie im Prüfraum für alle Objekte einzig aus der Zahl der verschiedenen¹¹⁴ Materialien N_{Mat} berechnen. Alle Materialien füllen einen Anteil $p_{\text{Mat}} = 1/N_{\text{Mat}}(1 - p_{\text{Luft}})$. Es ergibt sich

$$H^{\text{Max}}(O) = -p_{\text{Luft}} \log_2 p_{\text{Luft}} - N_{\text{Mat}} p_{\text{Mat}} \log_2 p_{\text{Mat}}.$$

Zahlenbeispiele dazu:

$N_{\text{Mat}} = 1$	$\rightarrow H^{\text{Max}}(O) = 0,47 \text{ Bit}$
$N_{\text{Mat}} = 5$	$\rightarrow H^{\text{Max}}(O) = 2,56 \text{ Bit}$
$N_{\text{Mat}} = 10$	$\rightarrow H^{\text{Max}}(O) = 3,46 \text{ Bit}$
$N_{\text{Mat}} = 16$	$\rightarrow H^{\text{Max}}(O) = 4,07 \text{ Bit}$

Die Reihe steigt etwa wie $\log_2 N_{\text{Mat}}$. Man kann festhalten, dass in einem Tomogramm, welches beispielsweise in 16 Bit Ganzzahlen abgespeichert ist, ein Vielfaches der Objektinformation abbildbar ist¹¹⁵.

¹¹⁴ Verschieden heißt hier: verschiedener Schwächungskoeffizient.

¹¹⁵ Etwas salopp formuliert: Viel Platz für Artefakte.

Bemerkung zur Tomogrammentropie

Die Tomogrammentropie, die die Häufigkeitsverteilung der Schwächungskoeffizienten quantifiziert, basiert auf einer sehr einfachen Wahl der Elementarereignisse die der Kanal CT-System überträgt. Es wird sich im Folgenden zeigen, dass diese Wahl dennoch gut geeignet ist, um die Artefaktmenge zu bewerten (Die Zahlenwerte des Beispiels geben einen Hinweis darauf). Letzteres ist das Ziel dieses Kapitels. Ich werde im Folgenden noch darauf eingehen, wie weitere Entropiemaße gefunden werden können (mit anderen Elementarereignissen). Dabei ist es nicht das Ziel, vollständig alle möglichen Maße zu definieren, sondern zu zeigen wie man zu Maßen kommt die helfen das Artefaktinventar zu quantifizieren.

Abgeleitete Entropiemaße

Die Frage nach der Information, die ein Objekt via CT-System in das Tomogramm sendet, ist in obigem Beispiel vorgreifend beantwortet worden: Es ist der Schwächungskoeffizient. Dies ist allerdings nicht die einzige Möglichkeit diese Frage zu beantworten, ich will hier noch weitere mögliche Informationen nennen. Auf Basis dieser weiteren Informationen lässt sich jeweils untersuchen, inwiefern diese durch das CT-System übertragen werden (wieder indem die Entropie betrachtet wird). Damit werden also weitere Entropiemaße definiert, die ebenfalls als Grundlage der Gütedefinition für das Tomogramm dienen können. Ich will sie, um sie von der ursprünglichen Messgröße der CT zu unterscheiden, als *abgeleitete Entropiemaße* bezeichnen.

Zunächst sei allerdings der Grund genannt, weshalb es möglicherweise nicht ausreichend ist, nur die Entropie über der Verteilung des Schwächungskoeffizienten zu betrachten. Es gibt Artefakte (=Fehler) in einem Tomogramm, die so nicht erfasst werden können. Betrachtet man nur die Statistik der Schwächungskoeffizienten, ist noch keine Aussage über den räumlichen Bezug der Messergebnisse getroffen. Damit ist die Information über die Objektform nicht beachtet. Wie in dem Beispiel oben gezeigt, sind nur die Volumenverhältnisse nötig um $H(O)$ und $H(M)$ zu berechnen. Eine Verzerrung der Abbildung würde die Entropie nicht ändern (z.B. eine zentrische Streckung oder Stauchung des Tomogramms, nicht einmal eine Permutation aller Voxel).

Man kann wieder auf die Vorgehensweise der Informationstheorie zurückgreifen. In der Informationstheorie werden neben den Entropien der einzelnen Symbole auch die Abfolgen dieser Symbole (=Wörter) betrachtet (z.B. bei der Codierung natürlicher Sprache kann es von Vorteil sein, Wörter zu codieren statt nur das Alphabet. Man denke auch an die Kon-

struktionsvorschrift der Huffman-Kodierung [22]). Ähnliches kann für die CT getan werden.

Nachdem das artefaktfreie Tomogramm darüber definiert wurde, dass der Schwächungskoeffizient im Volumen eines Voxels, das an einem bestimmten Ort im Raum sitzt, korrekt wiedergegeben wurde, muss also darüber nachgedacht werden, welche Information(en) das mit einschließen kann. Es soll der Ort, an dem der Schwächungskoeffizient einen bestimmten Wert einnimmt, mit beachtet werden.

Der Ereignisraum der abgeleiteten Zufallszahlen enthält dann Ereignisse, die in irgendeiner Weise diesen Ortsbezug herstellen. Man könnte für jeden Ort im Prüfraum eine Zufallszahl $O_{x,y,z}$ definieren (Nullpunkt sei der Mittelpunkt des Prüfraumes) und entsprechend die Übertragung des Schwächungskoeffizienten an diesem Ort betrachten. Allerdings ist das Ziel dieses Kapitels die Aufnahmeplanung für a priori definierte und nicht variierte Objekte. Der Schwächungskoeffizient hat also an einem bestimmten Ort keine Verteilung und $H(O_{x,y,z}) \equiv 0$. Dann muss auch die Transinformation Null sein. Eine Besonderheit stellt die Ausrichtung des Objektes im Prüfraum dar, sie ist Teil der CT-Parameter. Bezüglich beliebiger Drehung und Verschiebung des Objektes im Prüfraum hat $O_{x,y,z}$ eine Verteilung des Schwächungskoeffizienten¹¹⁶, allerdings muss das dieselbe sein wie die Verteilung der Schwächungskoeffizienten im Objekt selbst¹¹⁷. Damit wäre $O_{x,y,z} = O$ und dieser Fall ist oben bereits betrachtet.

Um dennoch Ortsabhängigkeit herzustellen, kann man Funktionen auf der Umgebung eines Ortes für alle Orte auswerten und die Verteilung der Ergebnisse betrachten. Der räumliche Bezug wird also dadurch hergestellt, dass in der Funktionsvorschrift relative Koordinaten vorkommen.

Es ist so beispielsweise möglich, die Oberflächen des Objektes bzw. der Teilobjekte zu betrachten. In einem voxelierten Volumen bedeutet das, dass Nachbarvoxel betrachtet werden (Relativkoordinaten lassen sich hier einfach über die Indizes ausdrücken). Man kann jedem Voxel v die Summe der Absolutdifferenzen zu den Nachbarvoxeln zuordnen, es ergibt sich

$$v_{\Delta,(i,j,k)} = |v_{i,j,k} - v_{i+1,j,k}| + |v_{i,j,k} - v_{i,j+1,k}| + |v_{i,j,k} - v_{i,j,k+1}|. \quad (6.12)$$

Das auf diese Weise abgeleitete Tomogramm enthält, im artefaktfreien Fall, Information über die Art und Größe der Oberfläche im ursprünglichen Tomogramm. Es seien die Zufallszahlen O_{Δ} und M_{Δ} für die Ableitungen des Objektvolumens bzw. des Tomogrammes

¹¹⁶ Das Objekt wird über den Punkt „geschoben“.

¹¹⁷ Randeffekte ignoriere ich hier, der Prüfraum sei groß genug.

definiert (Für O_Δ stelle man sich Glg. 6.12 mit infinitesimalen Voxeln vor).

Im Beispiel des Kugelphantoms gilt, dass im Tomographie-Volumen sehr viele Orte enthalten sind, deren Umgebung denselben Schwächungskoeffizient aufweist. Es gibt darüber hinaus zwei gleich häufige Fraktionen jeweils mit dem Tupel (Luft,Al) und (Luft,Fe), sowie eine Fraktion mit (Al,Fe) (letztere entspricht dem Schnittkreis der beiden Halbkugeln). Diese Fraktionen müssen sich nach Übertragung durch das CT-System in M_Δ wiederfinden und sollten dort entsprechende Histogrammpeaks hervorrufen. Ähnlich wie oben beobachtet gilt, dass Artefakte die relativen Häufigkeiten im Histogramm verändern und $H(M_\Delta)$ größer wird. Aufgrund der Art, wie diese abgeleitete Entropie $H(M_\Delta)$ definiert wurde, lässt sich vermuten, dass sich Rauschen im Tomogramm besonders dominant widerspiegelt. Niederfrequente Artefakte, wie cupping, sollten weniger dominant sein. Das Beispiel in Abschnitt 6.2 bestätigt diese Vermutung.

Das Konzept kann natürlich auf beliebige Nachbarschaften erweitert werden. Nachdem für ein Tomogramm die Nachbarschaft von Voxeln auch über die Richtung, in der ein Nachbarvoxel zu suchen ist, abhängt, kann an dieser Stelle auch ein beliebiges Strukturelement¹¹⁸ zur Wahl der „Nachbarschaft“ herangezogen werden (z.B. nur Voxel innerhalb eines bestimmten Abstands).

Allgemein sei ein abgeleitetes Entropiemaß dadurch gekennzeichnet, dass

- die Ortsverteilung der Schwächungskoeffizienten des Objektes für die Definition der Zufallszahl eine Rolle spielt.
- die Wahrscheinlichkeiten der Elementarereignisse der Zufallszahl sich aus dem Tomogramm mittels Histogrammbildung abschätzen lassen.

Deshalb kommen vor allem Bildverarbeitungsoperationen in Betracht, die auf dem Tomogramm ausgeführt werden (wenn es eine nicht diskrete Formulierung der Operation gibt gilt entsprechendes für das Objekt). Aus der Bildverarbeitung bekannt ist die Klasse der inhomogenen Punktoperationen, die hier besonders in Frage kommt. Es sind jedoch auch globale Operationen (z.B. 3D Fourier-Transformation) interessant, wenn deren Ergebnis eine Histogrammbildung zulässt.

6.1.3. Definition der CT-Bildgüte

Ziel des Kapitels ist die Definition eines Maßes für die Güte einer CT-Aufnahme. Aus der informationstheoretischen Betrachtung des CT-Aufnahmeprozesses ist bereits die

¹¹⁸ Gemeint ist der Begriff aus der Bildverarbeitung bzw. mathematischen Morphologie.

Interpretation der bedingten Entropie $H(M|O)$ als Maß für das Artefaktinventar bekannt. Mittels zweier Vermutungen über die Transinformation gelingt es allerdings die Entropie des Tomogrammes $H(M)$ als Bildgütemaß zu verwenden. Damit ist ein Maß gefunden, welches nicht von Vorwissen über das Objekt abhängt¹¹⁹.

Allgemeine Vermutungen über die Transinformation

Das Aufnahmeplanungsproblem ist, wegen der Vielzahl an Parametern, komplex. Allerdings ist es nicht sehr schwierig einen Start-Parametersatz zu finden, von dem aus das eigentliche Optimum gesucht werden kann. Damit und aus der Gegebenheit, dass $H(O)$ für industrielle Objekte keine großen Werte annimmt, motivieren sich die folgenden Vermutungen.

Für das Aufnahmeplanungsproblem für eine industrielle CT-Aufnahme sei vermutet, dass

$$H(O) \approx I(O, M) \quad (6.13)$$

und

$$H(M) > I(O, M) \quad \text{wobei} \quad H(M|O) \gtrsim I(O, M). \quad (6.14)$$

In Worten ausgedrückt:

Vermutung I (6.13) Der Informationsgehalt des Objektes wird im Wesentlichen in das Tomogramm übertragen. Damit sei die Vorbedingung, dass ein funktionstüchtiges und gut justiertes CT-System vorliegt manifestiert¹²⁰. Damit ist also, per Vermutung, festgelegt, dass eine Abbildung zustande kommt und dass diese nicht von Artefakten aus Verzerrungen bzw. Stauchungen dominiert wird.

Vermutung II (6.14) Der Informationsgehalt des Artefaktinventars im Tomogramm ist größer als der Informationsgehalt der übertragenen Information. Mit Vermutung I kann man folgern, dass der Informationsgehalt des Objektes kleiner ist als der Informationsgehalt des Artefaktinventars $H(O) < H(M|O)$.

Definition des Begriffes CT-Bildgüte

Wenn die beiden Vermutungen zutreffen, folgt daraus, dass ein Tomogramm einer nicht optimalen CT-Messung einen Informationsgehalt hat, der vom Informationsgehalt der

¹¹⁹ Warum das erstrebenswert ist, wird weiter unten noch klar gestellt.

¹²⁰ Wie oben bereits erwähnt sind die Artefaktquellen, welche sich durch technische oder maschinenbauliche Maßnahmen beheben lassen nicht Teil der Aufnahmeplanung.

Artefakte dominiert wird. Für diese Folgerung ist Vermutung I nicht notwendig, allerdings vervollständigt sie die Argumentation hinsichtlich der angestrebten Anwendung. Damit definiert man:

Die Shannon-Entropie eines Tomogramms $H(M)$ sei als Maß für die Bildgüte definiert, unter der Voraussetzung, dass die beiden Vermutungen zutreffen.

Eine CT-Aufnahme wird optimiert, indem der Parametersatz gesucht wird, bei dem die Entropie minimal ist

$$\arg \min_{\text{CT-Parameter}} H(M). \quad (6.15)$$

6.15 ist die mathematische Formulierung des Aufnahmeplanungsproblems aus Kap. 3. Für das Bildgütemaß seien folgende Anmerkungen gegeben:

- $H(M)$ hängt nicht direkt vom Objekt ab, sondern nur indirekt, indem die Vermutungen I+II erfüllt sein müssen. Die Vermutungen haben hiermit den Status einer Bedingung für die Bildgütedefinition. Deshalb müssen die Vermutungen bei der Neudefinition abgeleiteter Entropiemaße gegebenenfalls überprüft werden.
- Wenn die Vermutungen nicht erfüllt sind, ist $H(M)$ nicht notwendigerweise ein Maß für die Bildgüte. Wenn es keine Abbildung des Objektes gibt (und folglich kein Informationsübertrag zu erwarten ist), darf auch keine gültige Definition eines Maßes, dass die Güte der Abbildung bewertet, existieren. Vermutung I soll sicherstellen, dass eine Minimierung von $H(M)$ nicht zu einer Verkleinerung von $I(O, M)$ führt. Wenn Vermutung II nicht gilt, (Vermutung I jedoch schon) ist das Tomogramm nicht von Artefakt-Information dominiert, sondern von Objekt-Information. Vermutung II verknüpft also die Bildgüte mit dem Artefaktinventar, wie in Kap. 3 gefordert.
- Die Vermutungen I+II stellen gewissermaßen eine Schranke dar, ab derer man nicht mehr erwarten darf, dass $H(M)$ als „blind“ anwendbares Bildgütemaß funktioniert.
- Die Gültigkeit von Vermutung I lässt sich in aller Regel auch mit physikalischen Argumenten darlegen. Vermutung I ist erfahrungsgemäß¹²¹ gegeben, sobald überhaupt eine Abbildung des Objektes im CT-System zustande kommt. Dazu müssen die Parameter bei weitem nicht optimal sein. Es sei daran erinnert, dass man prinzipiell von einem funktionsfähigen CT-System ausgeht, welches prinzipiell in der Lage ist die Abbildung zu erzeugen. Zielstellung bleibt diese zu optimieren.

¹²¹ Der Erfahrung des Autors nach.

- Die Gültigkeit von Vermutung II ist nicht leicht zu beweisen (wenn man auf die Berechnung von $I(M, O)$ verzichten will). Allerdings kann für viele Objekte leicht eine Abschätzung von $H(O)$ getroffen werden¹²², welche eine obere Schranke für $I(M, O)$ ist und gemäß Vermutung I ohnehin einen ähnlichen Wert hat.

Dass das Bildgütemaß, nur über den Umweg der Vermutungen I+II, nicht aber direkt vom Objekt abhängt, ist von praktischem Nutzen. Das Maß kann berechnet werden, ohne dass $p(M|O)$ bzw. $p(O, M)$ bekannt sein müssen. Insbesondere ist es kein bivariates Maß. Es muss also kein Referenztomogramm bekannt sein um die Güte der Abbildung zu bewerten. Im Fall einer experimentellen Optimierung ist das Objekt a priori nicht bekannt (beim simulationsgetriebenen Ansatz schon). Aber auch im Fall einer simulationsbasierten Optimierung, also unter Kenntnis des Objektes, ist es nützlich $p(M|O)$ nicht berechnen zu müssen. Die Definition des Referenztomogramms ist nicht eindeutig. Das ist zum Beispiel dann der Fall, wenn die Positionierung des Objektes ein zu optimierender Parameter ist.

Es ist mit dieser Gütedefinition also auch möglich, eine experimentelle Optimierung gemäß 6.15 durchzuführen. Die Entropie des Tomogramms ist so auch schon als Gütemaß verwendet worden, allerdings ohne die informationstheoretische Begründung. In Ref. [104] und [67] ist die Shannon-Entropie dazu verwendet worden, die Korrektur einer Detektorverkipfung¹²³, welche ein Parameter des Rekonstruktionsverfahrens ist, zu optimieren. Wicklein et al. und Kyriakou et al. nehmen dabei die Shannon-Entropie ohne argumentierte Begründung als Gütemaß an.

Mit dieser Arbeit ist eine Begründung für die Entropie als Gütemaß auf Basis der mathematisch gut fundierten Informationstheorie gegeben. Der Mehrwert, der sich dadurch ergibt, dass die Shannon-Entropie auf Basis des Sender-Empfänger Modelles der Informationstheorie begründet und nicht nur als Maß der Tomogramm-Statistik angenommen wird, besteht vor allem darin, dass

- sich die Grenzen der Anwendbarkeit solcher Entropiemaße begründen lassen.
- es leicht ersichtlich ist, weshalb die Entropie der Schwächungskoeffizienten nicht das einzig mögliche Informationsmaß für Tomogramme ergibt. Es ist leicht möglich eine Klasse von Gütemaßen zu bilden, die auch problemspezifisch sein können (wie hier am Beispiel der oberflächenbezogenen Entropie demonstriert).

¹²² Das gilt möglicherweise nicht für alle möglichen abgeleiteten Entropie-Maße, aber für die Histogrammentropie und für $H(O_\Delta)$ schon.

¹²³ Eine nicht korrigierte Verkipfung des Detektors aus seiner Ideallage heraus führt zu Artefakten, typischerweise Doppelkanten.

- aus einfachen Annahmen über industrielle Objekte leicht die oben genannten Vermutungen gefolgert werden bzw. plausibel gemacht werden können.

Für die Zielsetzung dieser Arbeit ist es ausreichend, die Untersuchungen mit der Definition des Bildgütemaßes zu beenden. Die informationstheoretische Sichtweise auf den CT-Messprozess kann aber darüber hinaus noch von Nutzen sein, um die Eigenschaften von CT-Systemen oder Teilen davon zu analysieren, auch und vor allem experimentell. Derartige Betrachtungen werden im Allgemeinen nicht mehr darauf verzichten können, dass die gemeinsame Verteilung von M und O betrachtet wird. Hier will ich diesbezüglich noch darauf eingehen, wie die Bildgütedefinition ohne die Vermutungen I+II erfolgt. Für den Fall, dass man nicht von der Gültigkeit der beiden Vermutungen ausgehen kann, lässt sich, unter Verwendung von $p(M|O)$ und $p(O, M)$, dennoch eine Vorschrift finden, die das Aufnahmeplanungsproblem löst. Man ersetze 6.15 mit

$$\arg \min_{\text{CT-Parameter}} H(M|O), \quad \text{wobei gleichzeitig} \quad (6.16)$$

$$\arg \max_{\text{CT-Parameter}} I(M, O). \quad (6.17)$$

Es wird also die Zerlegung von $H(M)$ verwendet und man kann direkt die Quantifizierung des Artefaktinventars als Bildgüte definieren. Ich gehe allerdings davon aus, dass dieses Verfahren wenig praktischen Nutzen hat, weil die gemeinsame Verteilungsfunktion aufwändig zu bestimmen ist. Die Bildqualität im Sinne des Artefaktinventars ist, wie oben bereits identifiziert, $H(M|O)$. In diesem Fall ist es aber sicherlich auch interessant, das Verhältnis $H(M|O)/I(M, O)$ zu betrachten. Es gibt Aufschluss darüber, wieviel nutzbare Information dem Artefaktinventar gegenübersteht.

6.1.4. Berechnung histogrammbasierter Maße für Tomogramme

CT-Messdaten liegen nach dem Rekonstruktionsschritt typischerweise in Fließkommazahl-darstellung vor (meist μ in cm^{-1}). Dabei kann es im Zuge der Datenverarbeitung durchaus dazu kommen, dass negative Zahlen vorkommen¹²⁴. Nach der Definition eines optimalen Tomogramms aus Kap. 3.1.1 sind negative μ ebenfalls Teil des Artefaktinventars. Um aus einem Tomogramm die diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilung für die einzelnen Schwächungskoeffizienten-Intervalle zu schätzen (oder ähnliches zu tun, wenn es sich um eines der abgeleiteten Maße handelt), muss ein normiertes Histogramm gebildet werden. Dazu müssen die Grenzen der Intervalle festgelegt werden. Dieser Schritt ergibt gerade die

¹²⁴ Es gibt Implementierungen von Rekonstruktionsverfahren, die negative Werte als „unphysikalisch“ abschneiden und Null setzen.

Wahl des Alphabetes für die oben definierte Zufallsvariable M .

Für die Entropieberechnungen im folgenden Abschnitt und in Kap. 7 sind äquidistante Histogramme gebildet worden. Unter Festlegung der Bin-Zahl N_B sowie des minimal und des maximal erfassten Schwächungskoeffizienten $[\mu_{\min}; \mu_{\max}]$ berechnen sich die Bin-Breiten $(\mu_{\max} - \mu_{\min})/N_B$. Werte die außerhalb des Wertebereiches $[\mu_{\min}; \mu_{\max}]$ liegen, werden nicht berücksichtigt¹²⁵.

Um Vergleichbarkeit der Entropien mehrerer Tomogramme aus einer Simulationsreihe zu garantieren, sind die $N_B, \mu_{\min}, \mu_{\max}$ nicht variiert, sondern die Histogrammbasis wurde vorher fest gewählt. Dazu ist das μ -Intervall so gewählt worden, dass der größte und kleinste Wert aller beteiligten Tomogramme enthalten ist.

Es sei an dieser Stelle an die Eigenschaft der Entropie erinnert, dass das Hinzufügen eines unmöglichen Ereignisses (also eines Histogrammbins mit Höhe null) den Wert der Entropie nicht ändert. Man kann also die Histogrammbasis nicht zu groß wählen, es kann nur vorkommen, dass die Zahl der Bins nicht groß genug ist, um die Verteilung gut zu approximieren. Bei Tomogrammen, insbesondere bei den unten gezeigten Beispielen, gilt typischerweise, dass die Zahl der Voxel $N_{\text{Voxel}} \gg N_B$. Dabei liegen sinnvolle N_B für reale industrielle CT-Systeme im Bereich $2^8 - 2^{16}$. Eine höhere Auflösung des Schwächungskoeffizienten ist meist nicht gegeben.

Ich gehe also in den gezeigten Fällen davon aus, dass die Approximation der relativen Häufigkeiten an die Wahrscheinlichkeiten gut ist. Das muss allerdings nicht in jedem Fall so sein, insbesondere dann nicht, wenn nur Teile von Tomogrammen vorliegen (z.B. einzelne Schichten) oder abgeleitete Entropiemaße, die auf größeren Blöcken eines Tomogramms berechnet werden.

6.2. Vergleich entropiebasierter Maße mit klassischen Bildbewertungsmaßen

Die Entropie-basierten Gütemaße sollen im Kontext der klassisch in der Bildverarbeitung gebräuchlichen Gütemaße betrachtet und diskutiert werden. Dazu dient im Folgenden ein Testdatensatz aus einer CT-Simulationsreihe. Es handelt sich um eine Reihe aus insgesamt 390 simulierten Tomogrammen. Das Testobjekt ist die Lochplatte aus Eisen (Kantenlänge 48 mm, Dicke 8 mm, Lochdurchmesser 4 mm), wie in Abb. B.3 dargestellt. In der Simulationsreihe sind zwei physikalische Parameter variiert:

¹²⁵ Vor allem werden sie nicht dem ersten oder letzten Bin zugerechnet.

1. Das SNR der Röntgenprojektionen. Das SNR der Röntgenprojektionen sei als das SNR in einem homogenen Bildbereich, in dem kein schwächendes Objekt abgebildet ist, definiert (SNR des I_0 -Signals). Damit wird ein verschieden starkes Rauschniveau aufgrund von Quantenrauschen nachgestellt. Niedriges SNR in den Projektionen kann für dieses Beispiel direkt mit einem kleinen Belichtungszeit-Röntgenfluss-Produkt übersetzt werden. Dieser Parameter beeinflusst auch das Rauschen in den Tomogrammen, da sich das Rauschen aus den Projektionen fortpflanzt. Das SNR der Projektionen ist auf dem Intervall [50; 300] in 26 äquidistanten Schritten variiert, die Ränder mit eingeschlossen.
2. Die Maximalenergie des Röntgenspektrums, wobei die Spektren mit TBC-Modell berechnet wurden. Dieser Parameter variiert die Durchdringungsfähigkeit des Röntgenstrahls und damit letztlich die Menge an Strahlaufhärtungsartefakt im Tomogramm. Die Maximalenergie ist auf dem Intervall [60 keV; 200 keV] in 15 äquidistanten Schritten variiert worden.

Die nicht variierten Parameter der CT-Simulationsreihe¹²⁶ sind:

- Die Objektausrichtung und die Trajektorie. Die Lochplatte wurde „gekippt“ auf dem virtuellen Drehteller positioniert, sodass ihr Normalenvektor und der Normalenvektor des Drehtellers einen 75° -Winkel einschließen. Zusätzlich ist die Lochplatte 5° um ihren Normalenvektor gedreht worden. Es gibt also keine Kante der Lochplatte, die parallel zu den Voxelkanten im Tomogramm ist. Es wurde eine Standard Kreistrajektorie mit 200 Projektionen gewählt.
- Der virtuelle Detektor hat 256×256 Pixel und ist ideal energieintegrierend. Er hat eine Kantenlänge von 10,24 cm.
- Der Röntgenbrennfleck ist 90 cm vor dem Drehmittelpunkt, der Detektormittelpunkt 33 cm dahinter. Es ergibt sich ein Vergrößerungsfaktor von 1,37.
- Die Tomogramme sind mit 256^3 Voxeln mit einer FBP rekonstruiert.

In der Menge der Ergebnis-Tomogramme sind wegen der beiden variierten Parameter unterschiedlich starke Ausprägungen von Rauschen und Strahlaufhärtungsartefakt (dieses ergibt sich hier als cupping-Artefakt) vorhanden. Eine sehr ähnliche Simulationsreihe mit Auswertung hinsichtlich der Entropie habe ich in Ref. [85] vorgestellt.

Für dieses bewusst einfach gehaltene Beispiel kann das Ergebnis leicht geraten werden: Bezüglich der hier variierten Parameter ist das optimale Tomogramm bei dem härtesten

¹²⁶ Die Simulationsreihe wurde mit Scorpius XLab[®] durchgeführt.

Spektrum und bei höchstem SNR der Projektionen zu erwarten. Um das SNR auszuwerten, ist es nötig eine „Region“ im Tomogramm auszuwählen, bezüglich derer das SNR berechnet werden soll. Dazu wurde anhand des idealen Tomogramms¹²⁷ eine Lookup-Tabelle angelegt, die alle Voxel enthält, in denen das Objekt abgebildet sein müsste, wobei Randvoxel, die das Objekt nur teilweise beinhalten, ignoriert wurden. Dieses Vorgehen entspricht nicht ganz dem Standard zur Berechnung von SNR, denn dazu wird normalerweise eine „Region möglichst homogener Grauwerte“ gewählt, denn das SNR soll ja nur das Rauschen auf dem gegebenen Signal quantifizieren. Eine solche homogene Region ist allerdings nicht leicht zu definieren, wenn es neben dem Rauschen noch weitere Modulationen (= Artefakte) gibt. Das gilt besonders, wenn die Tomogramme der Simulationsreihe vergleichbar bewertet werden sollen. Die Wahl des gesamten Objektes scheint hier eine möglichst objektive zu sein¹²⁸.

Mit Hilfe der Abbildungen 6.3, 6.4, 6.5 und 6.6 soll nun ein Vergleich der Aussagekraft der Bildgütemaße erfolgen. Zusätzlich ist der Zusammenhang zwischen der Entropie $H(M)$ und den variierten Parametern dargestellt. In jeder der Abbildungen steht ein Datenpunkt für das Ergebnis, das anhand eines simulierten Tomogramms berechnet wurde. Soweit es die Darstellung zulässt, sind die variierten Simulationsparameter mit dargestellt. Um die Interpretation der „Punktwolken“ zu stützen, wurde der Pearson-Korrelationskoeffizient für sämtliche Paare von Maßen (inkl. der variierten Parameter) berechnet und in Tabelle 6.1 zusammengestellt. Der Korrelationskoeffizient hat den Wert ± 1 für perfekte lineare Zusammenhänge zwischen den Maßen. Das gilt hier, wenn zwei Maße identische Aussagekraft haben. Bezüglich der variierten Parameter sei der Korrelationskoeffizient als Indikator dafür verstanden, ob und wie stark ein Maß die Artefakte, die durch den Parameter hervorgerufen werden, anzeigt. Es sei darauf hingewiesen, dass der Korrelationskoeffizient nur lineare Abhängigkeiten aufzeigt. Andere nicht bekannte funktionale Abhängigkeiten zwischen den Maßen lassen sich daher besser aus der Verteilung der Punkte in den Streudiagrammen ablesen.

Zunächst sei die Kopplung der Bildgütemaße an die variierten Parameter betrachtet:

- Das Minimum von $H(M)$ liegt, wie erwartet, bei $E_{\max} = 200$ keV und $\text{SNR}_{I_0} = 300$.
- Die Abhängigkeit von $H(M)$ zu den variierten Parametern ist für E_{\max} stärker ausgeprägt als für das SNR (Korrelationskoeffizienten $-0,95$ und $-0,14$). Bezüglich des SNR, bei jeweils konstantem E_{\max} , tritt bei $H(M)$ ein Sättigungsverhalten auf.
- $H(M)$ liegt zwischen 3 und 7 Bit. Das ist deutlich größer als $H(O) = 0,24$ Bit.

¹²⁷ Dieses lässt sich ebenfalls mit Scorpius XLab[®] erzeugen.

¹²⁸ Ohne das cupping-Artefakt wäre das auch die beste Wahl.

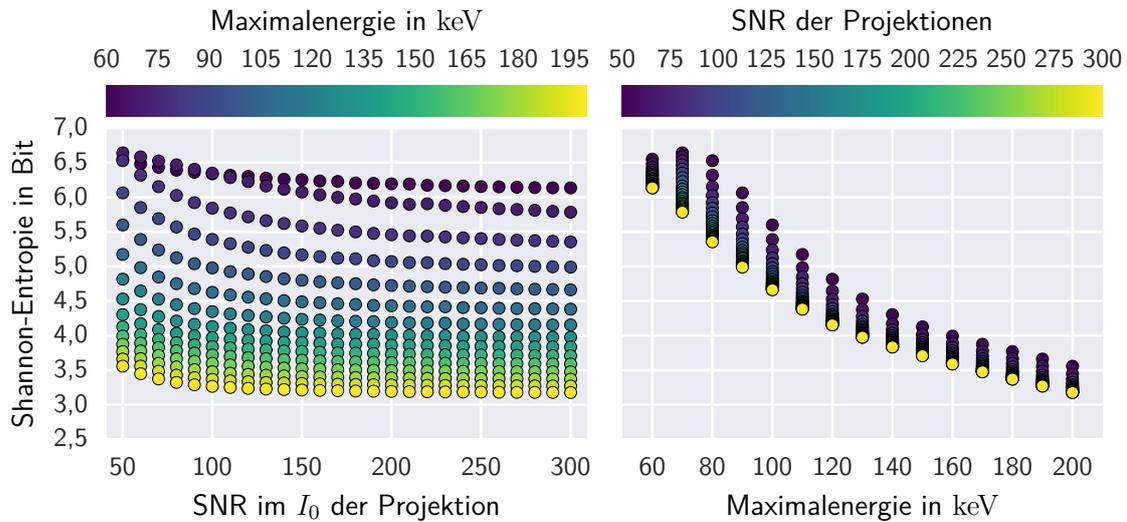


Abb. 6.3.: Entropie in Abhängigkeit der variierten CT-Parameter. Die Farbcodierung stellt den jeweils anderen Parameter dar.

⇒ Das Aufnahmeplanungsproblem der Lochplatte für die Parameter Projektionsrauschen und Maximalenergie wird durch die Minimierung von $H(M)$ also gelöst.

Für den Vergleich der Entropie mit den klassischen Bildbewertungsmaßen SNR des Objektes, mittlere Absolutdifferenz (D) und totale Variation (TV) kann man folgendes festhalten.

- Für die Betrachtung SNR im Objekt:
 - Die Korrelation ist erwartungsgemäß negativ. Hohes SNR ist gleichbedeutend mit kleiner Entropie. Insbesondere ist das Tomogramm mit maximalem SNR genau das, welches minimale Entropie aufweist.
 - Die beiden Maße haben also ähnliche, aber nicht identische Aussagekraft. Sie sind auch nicht durch einen einfachen funktionalen Zusammenhang ineinander abbildbar.
- Ähnliches gilt auch für die totale Variation, nur mit positiver Korrelation.
- Für die Betrachtung der mittleren Absolutdifferenz ergibt sich ein etwas anderes Bild:
 - Für $H(M) > 4$ Bit lässt sich ein weitestgehend linearer Zusammenhang zwischen den beiden Maßen ablesen.
 - Für $H(M) < 4$ Bit ergibt sich, dass die mittlere Absolutdifferenz kaum Unterschiede zeigt für die in diesem Bereich vorkommenden Tomogramme mit

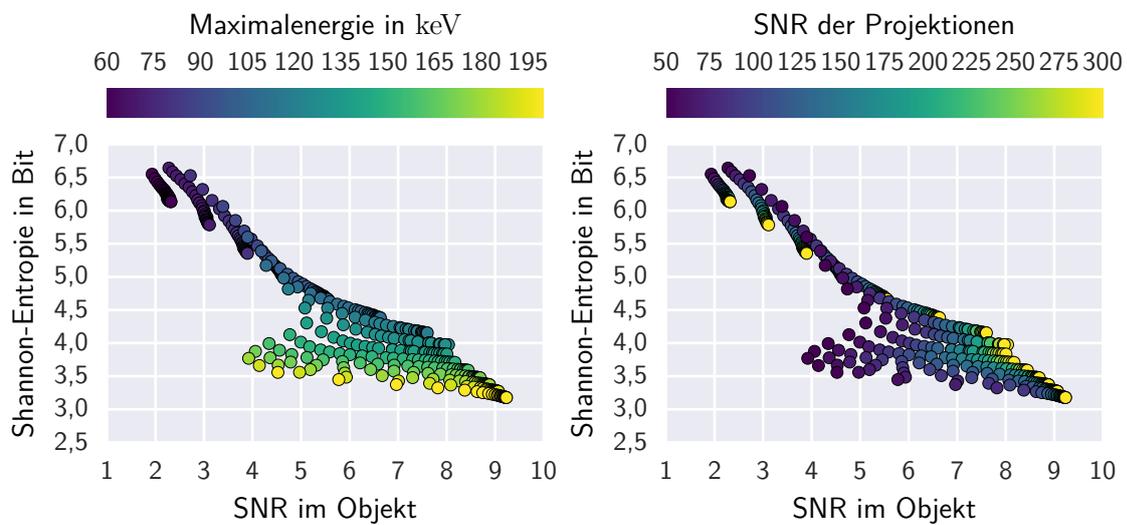


Abb. 6.4.: Vergleich SNR und Entropie anhand der Simulationsreihe der Lochplatte. Die beiden Streudiagramme zeigen jeweils dieselben Daten, sie unterscheiden sich hinsichtlich der Variable, die für die Farbgebung verwendet wurde. Links ist die Farbskala zur Darstellung des SNR der Röntgenprojektionen, rechts für die Maximalenergie des zur Simulation verwendeten Röntgenspektrums verwendet. Das Objekt SNR ist jeweils auf dem gesamten Volumen der Lochplatte ausgewertet.

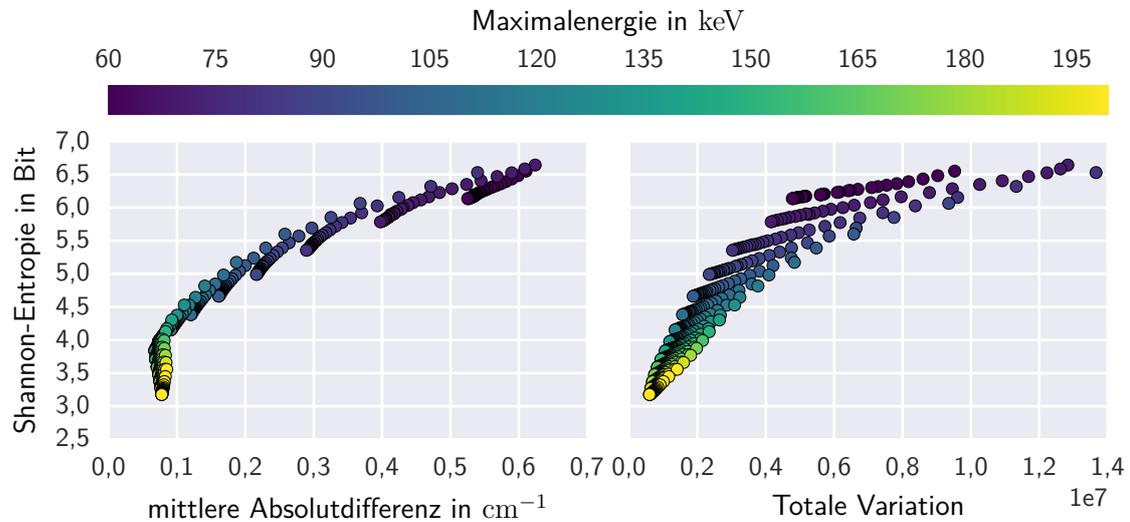


Abb. 6.5.: Entropie im Vergleich mit der mittleren Abweichung zwischen Ergebnis und dem idealen Tomogramm (links) und Entropie im Vergleich mit der totalen Variation. Die Farbcodierung gibt jeweils die Maximalenergie des simulierten Tomogramms an. Dieselbe Abbildung mit der Farbskala verwendet für das SNR der Projektionen findet sich im Anhang (Abb. B.14).

$130 \text{ keV} < E_{\max}$ (die Werte differieren auf der dritten Nachkommastelle). Die Entropie derselben Tomogramme ist allerdings verschieden (sie reicht von etwa 3 Bit bis 4 Bit). Für diese Tomogramme ist die Entropie also sensitiv auf das Artefaktinventar, die mittlere Absolutdifferenz nicht. Die beiden Maße „sehen“ verschiedene Bildeigenschaften.

Für einen Vergleich der Bildgüte Shannon-Entropie mit abgeleiteten Entropien seien drei Zufallszahlen definiert:

M_{Δ} Die Entropie über der Summe der Absolutdifferenzen benachbarter Voxel, wie in Glg. 6.12 definiert.

$K_{\max/\min}$ Es werden alle Voxel betrachtet die auf einer Kugelschale mit Radius r um einen gegebenen Mittelpunkt liegen (hier $r = 6$ mal Voxelkantenlänge, das entspricht etwa dem Radius eines Loches der Lochplatte). Auf dieser Kugel wird jeweils das Maximum (Minimum) gesucht. Mittelpunkte sind alle Mittelpunkte der Voxel (Randvoxel werden ignoriert). $H(K_{\max/\min})$ betrachtet also die Verteilung der Schwächungskoeffizienten in Kugelschalen-förmigen Gebieten.

Für den Vergleich verschiedener abgeleiteter Entropien mit $H(M)$ und den variierten Parametern beobachtet man:

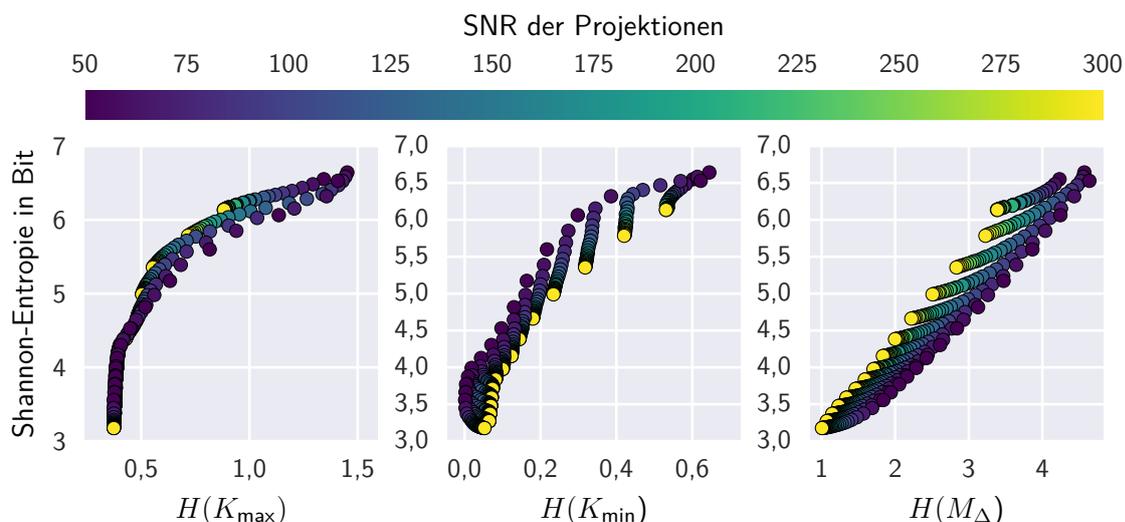


Abb. 6.6.: Vergleich verschiedener abgeleiteter Entropiemaße mit $H(M)$.

- Die Korrelation zwischen $H(M_{\Delta})$ und dem SNR der Projektionen ist höher als bei $H(M)$. Das ist aufgrund der Definition in Glg. 6.12 erwartungsgemäß, denn diese Transformation wirkt wie ein Hochpassfilter. Aus demselben Grund korreliert $H(M_{\Delta})$ auch stark mit der totalen Variation.
- Trotz des Hochpass-Charakters zeigt $H(M_{\Delta})$ eine starke Abhängigkeit zu E_{\max} . Es gilt insbesondere, dass bezüglich $H(M_{\Delta})$ dasselbe Tomogramm optimal ist bezüglich $H(M)$. Der direkte Vergleich dieser beiden Maße zeigt allerdings auch auf, dass sie auf unterschiedliche Weise das Artefaktinventar der Tomogramme bewerten. Es gibt keinen funktionalen Zusammenhang zwischen den Maßen.
- Für $H(K_{\min/\max})$ gilt, dass sie, obwohl sie sehr ähnlich konstruiert sind, auf unterschiedliche Weise mit $H(M)$ zusammenhängen. Der Vergleich der beiden abgebildeten Maße ist in Abb. B.15 gezeigt. Auch dort kann man ablesen, dass diese beiden Maße nicht einfach voneinander abhängen.

7. Anwendung des Optimierungsverfahrens, Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel wird das im Verlauf dieser Arbeit vorgestellte Optimierungsverfahren an Beispielen demonstriert. Es werden also simulationsgestützte Aufnahmeplanungen für konkrete CT-Messungen durchgeführt und bewertet, wobei die Shannon-Entropie der simulierten Tomogramme (= Tomogrammentropie) die Gütefunktion ist. Nachdem der Fokus dieser Arbeit auf der Zusammenstellung der notwendigen Simulationswerkzeuge sowie der Definition eines Gütemaßes, jedoch nicht auf besonders schnell konvergierenden Optimierungsstrategien lag, wurde auch hier nur eine einfache Brute-Force Optimierung verwendet. Dabei wird hier nochmals die Shannon-Entropie als Funktion der betrachteten CT-Parameter dargestellt, um am Beispiel zu zeigen, dass die Shannon-Entropie für diese Parameter jeweils ein Minimum besitzt.

7.1. Beispiele für automatische Aufnahmeplanung

7.1.1. Optimale Positionierung eines historischen Blechblasinstruments

Die Optimierungsaufgabe, welche zu lösen ist, lautet: Wie kann das Kornett aus Abb. 3.4 auf dem Drehteller positioniert werden, sodass das Artefaktinventar des resultierenden Tomogramms minimiert wird. Dazu sei als einziger freier Parameter der Optimierung der Kippwinkel γ definiert. γ ist der Winkel zwischen dem Normalenvektor des Drehtellers und der Längsachse des Rohres, welches im Schalltrichter mündet. Für die „aufrecht stehende“ Positionierung aus 3.4 gilt demnach $\gamma = 0^\circ$. Der Parameter γ wurde nach dem Brute-Force Verfahren simulationsbasiert optimiert. Dazu ist ein Modell nötig, welches die Geometrie des Kornettes mindestens so gut nachstellt, dass in simulierten Tomogrammen dasselbe Artefaktinventar entsteht. In Abb. 7.1 ist das abstrahierte Kornett gezeigt. Als wesensgebende Komponenten sind die massiven Teile der Ventilmechanik¹²⁹ sowie alle längs verlaufenden Rohre und die dazwischen liegenden stabilitätsgebenden Stege identifiziert. Diese Komponenten und der Schalltrichter sind mittels CAD-Software anhand der Maße des Originalinstrumentes modelliert. Dabei ist es für die Simulation der röntgenographischen

¹²⁹ Die Ventile selbst sind inklusive ihrer inneren Strukturen modelliert.

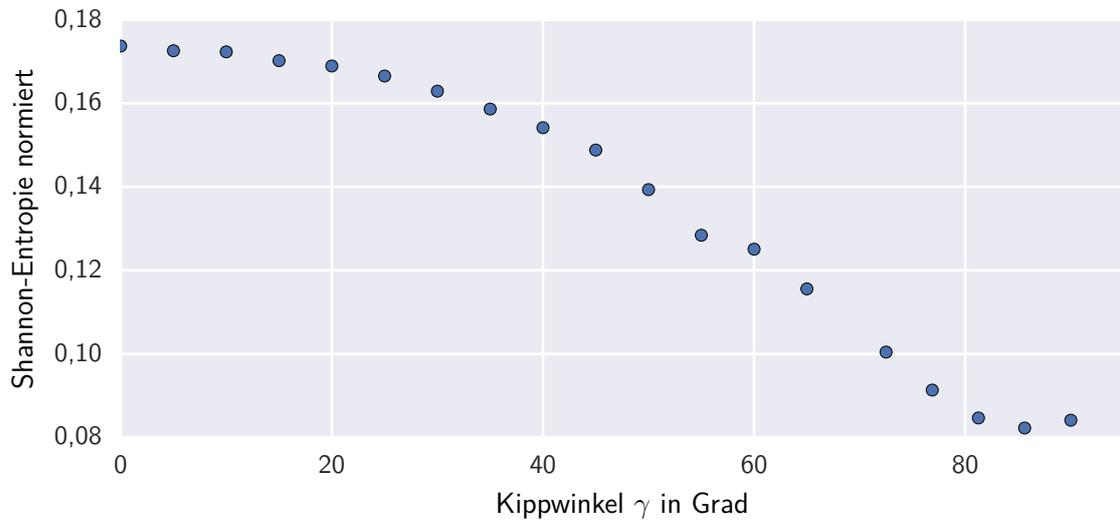


Abb. 7.1.: Shannon-Entropie als Funktion der Objektpositionierung für das Cerveny Kornett. Der Plot zeigt die Shannon-Entropie als Funktion des Kippwinkels γ des virtuellen Kornettes.

Eigenschaften des Instrumentes freilich nicht von Bedeutung, dass die Rohre *luftdicht* aneinander gefügt sind*.

Das Diagramm in Abb. 7.1 zeigt den Verlauf der Shannon-Entropie für die simulierten Tomogramme als Funktion von γ . Man liest einen klaren Zusammenhang zwischen γ und der globalen Bildgüte, also der Shannon-Entropie ab. Aus dieser Optimierung leitet man ab, dass eine Tomographie eines um $\gamma = 45^\circ$ gekippt positionierten Kornetts ein geringeres Artefaktinventar aufweisen muss. Die Shannon-Entropie ist zwar bei noch größeren Kippwinkeln kleiner als bei $\gamma = 45^\circ$ (bis sie ab 90° wegen der Symmetrie bzgl. der Rotationsachse wieder steigt), allerdings sind diese Kippwinkel nur in der Simulation realisierbar. In der

* Die Simulationsreihe wurde in Schielein et al. (The MUSICES Project: Simulative automated CT acquisition planning for historical brass instruments improves image quality, ICT 2016) vorgestellt.

CT-Messung¹³⁰ kann das Kornett bei $\gamma > 45^\circ$ nicht gehalten werden, ohne dass es mit dem mechanischen Aufbau der CT-Anlage kollidiert.

Um den Erfolg der Positionsoptimierung zu demonstrieren, wurde das Kornett in den beiden Positionen „aufrecht“ ($\gamma = 0^\circ$) und „gekippt“ ($\gamma = 45^\circ$) tomographiert. In Abb. 7.2 sind Schnitte durch dasselbe Ventil aus beiden Tomogrammen dargestellt. Zum quantitativen Vergleich ist in Abb. 7.2 erneut das Linienprofil aus Abb. 3.4 aus Abschnitt 3.4.1 dargestellt. Insbesondere der Material-zu-Luft Kontrast im Bereich der Bohrungen sowie das Artefaktinventar zwischen den Ventilen zeigen eine klare Verbesserung für die gekippte Positionierung.

Die Shannon-Entropie, also die Kostenfunktion der Positionsoptimierung, kann ebenfalls auf den gemessenen Daten ausgewertet werden. Für die beiden Tomogramme ergibt sich mit $H_{\text{gekippt}} = 4,936 > H_{\text{aufrecht}} = 4,954$ zwar der erwartete Zusammenhang, allerdings fällt die Differenz deutlich kleiner aus, als aus Simulationsergebnissen zu erwarten wäre¹³¹. Die Tomogramm-Entropie ist bei den gemessenen Tomogrammen allerdings nicht unwesentlich von der Artefaktquelle „Rauschen“ beeinflusst, die in der Simulation vernachlässigt wurde.

7.1.2. Optimierung der verwendeten Röntgenspektren bei Multimaterialobjekten

Ein Beispiel für Objekte mit sehr verschiedenen Schwächungskoeffizienten der beteiligten Materialien ist das *Klarinettenphantoms*, welches in Abschnitt 3.4.2 mit den starken Artefakten, die sich bei einer Tomographie ergeben können vorgestellt wurde. Um die Aufnahmebedingungen hinsichtlich des verwendeten Röntgenspektrums zu optimieren, wurde für das Klarinettenphantom eine Simulationsreihe erzeugt. In der Simulationsreihe werden folgende das Röntgenspektrum betreffende Parameter systematisch variiert:

- Maximalenergien für Röntgenspektren einer Wolframanodenröhre in Reflexionsgeometrie (TBC-Modell):
 - 60 keV bis 220 keV in 5,50 keV-Schritten, wenn kein Röntgenfilter eingesetzt ist.
 - 60 keV bis 220 keV in 10 keV-Schritten, wenn ein Röntgenfilter eingesetzt ist¹³².
- Material und Transmissionslänge des Röntgenfilters:
 - Al-Filter, 0,10 mm bis 2,00 mm (8 verschiedene Dicken)

¹³⁰ Hier beziehe ich mich auf die zur Verfügung stehende CT-Anlage, an der die unten gezeigte Messung durchgeführt wurde.

¹³¹ Die Entropie wurde hier auf einem 2048 Bins umfassenden Histogramm berechnet.

¹³² Die Abtastung der Maximalenergien wurde hier etwas ausgedünnt, um kürzere Rechendauern zu erhalten.

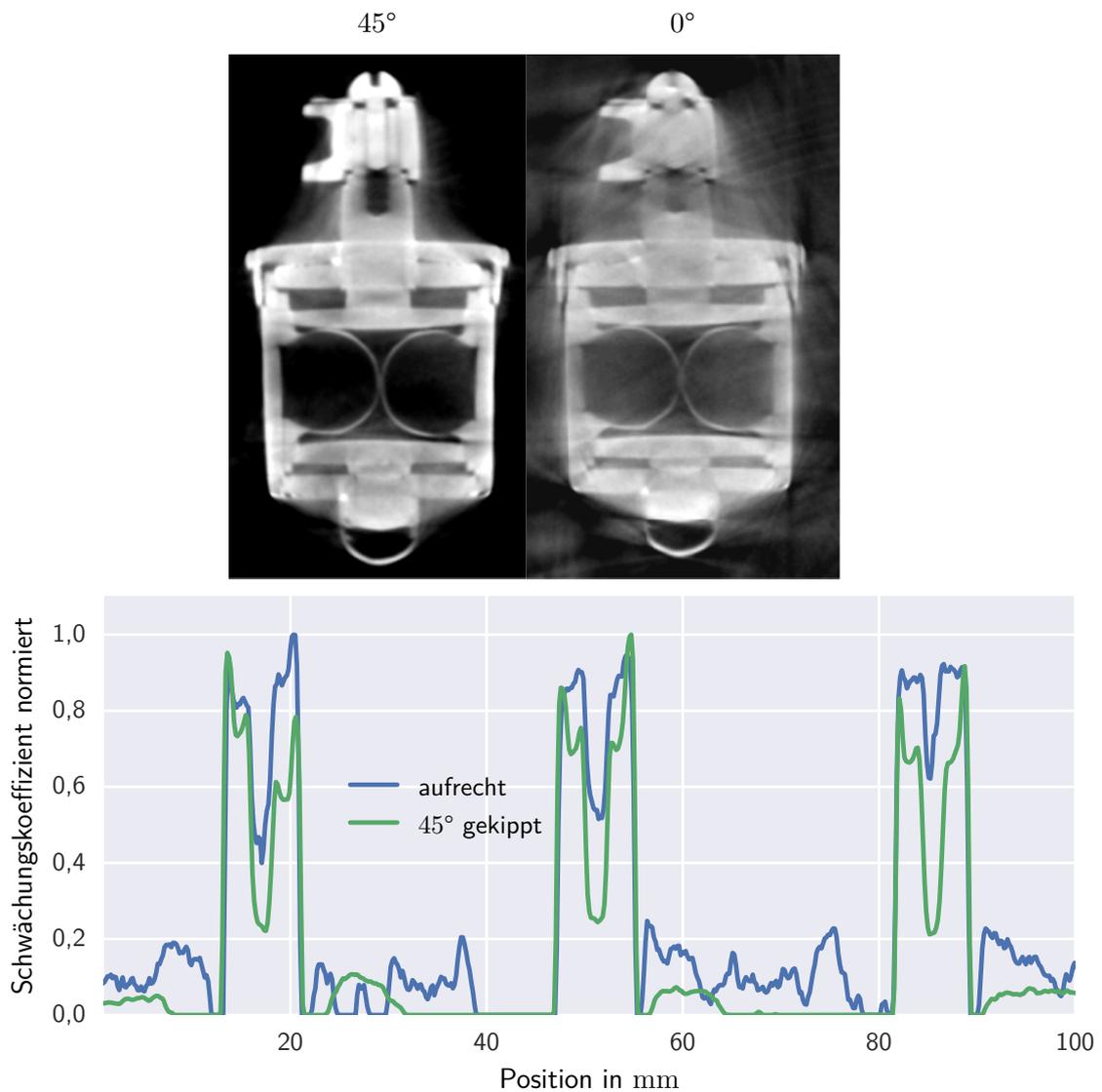


Abb. 7.2.: Vergleich der Tomogramme des Kernettes vor und nach Positionsoptimierung (oben). Der Graph unten zeigt erneut das Linienprofil aus Abb. 3.4, hier im Vergleich mit demselben Linienprofil aus dem Tomogramm der gekippten Messung. Um Vergleichbarkeit herzustellen, sind beide Linienprofile jeweils auf ihr Maximum normiert.

- Cu-Filter, 1 mm bis 2 mm (5 verschiedene Dicken)
- Cu+Zn-Filterkombination, 0,10 mm bis 1 mm jeweils (30 verschiedene Dickenkombinationen)

Insgesamt wurde eine Reihe von 675 verschiedenen Röntgenspektren für die CT-Simulationen verwendet. Die übrigen CT-Parameter wurden nicht variiert. Im Einzelnen waren das: Quellpunkt-zu-Detektorabstand 100 cm und Quellpunkt-zu-Objektstand 90 cm; quadratischer Detektor mit 544×544 Pixeln bei 8 cm Kantenlänge und CsI-Szintillatorcharakteristik; eine Standard Kreistrajektorie mit 512 Projektionen. Für die Optimierungsaufgabe ist diese Menge aus CT-Simulationen im Folgenden mittels Brute-Force Algorithmus (wie in Kap. 3.3 beschrieben) durchsucht worden.

Die größte untersuchte Maximalenergie von 220 keV ist nicht willkürlich gewählt. Sie entspricht dem, was mit typischerweise verfügbaren Mikrofokusröhren¹³³ erreichbar ist (siehe beispielsweise Ref. [106]). Um die Spektren zu klassifizieren, kann ihre Schwerpunktenenergie \bar{E} herangezogen werden. In der Simulationsreihe gibt es Spektren mit \bar{E} zwischen 40 keV und 145 keV. Bezüglich der Modellierungstiefe der Röntgenphysik und der CT-Systemgeometrie(-fehler) ist die Simulationsreihe idealisiert ausgeführt. Insbesondere wurde kein Quantenrauschen berücksichtigt und infolgedessen ist auch nicht die Frage nach den Integrationszeiten¹³⁴ gestellt. Es wurde keine Röntgenstreuung in der Simulationsreihe berücksichtigt. Dieser Umstand kann dazu führen, dass das Artefaktinventar bei den Spektren mit großem \bar{E} unterschätzt wird.

Versuch einer Optimierung hinsichtlich eines einzelnen Spektrums

Bei den zur Verfügung stehenden \bar{E} in dieser Simulationsreihe kann nicht erwartet werden, dass eine vollständige Optimierung mit nur einem Spektrum, also eine Standard CT (im Folgenden der Eindeutigkeit halber auch als ein-Spektrum-CT bezeichnet), gelingt. Begründet ist das damit, dass die Schwächungskoeffizienten der beteiligten Materialien und Röntgenenergien sehr verschieden sind. Bei $E = 80$ keV sind die Schwächungskoeffizienten in cm^{-1} : $\mu = 6,55$ (Neusilber), $\mu = 0,11$ (Holz $\rho = 0,62 \text{ g cm}^{-3}$), $\mu = 0,07$ (Holz $\rho = 0,40 \text{ g cm}^{-3}$). Es seien dennoch die Ergebnisse in knapper Form dargestellt, bevor eine Optimierung eines Mehrenergieverfahrens gezeigt wird. In Abb. 7.3 ist das Ergebnis einer Brute-Force Optimierung des Röntgenspektrums für das Klarinettenphantom gezeigt. Man beobachtet, dass es bezüglich verschiedener Röntgenspektren einen Zusammenhang mit

¹³³ Röhrenbrennfleck bei diesen Röhren liegt im Bereich von 6 μm bis 8 μm . Diese Brennfleckgröße ist nötig um hohe Ortsauflösung zu erreichen, etwa um die Jahresringe zu erkennen.

¹³⁴ An einer realen Anlage, werden die Integrationszeiten bei den stärker absorbierenden Filtervarianten deutlich vergrößert werden müssen.

der Shannon-Entropie der resultierenden Tomogramme gibt. Je nach Material und Dicke des verwendeten Röntgenfilters ergibt sich ein lokales Minimum der Shannon-Entropie bei den „harten“ Röntgenspektren, also jeweils bei großer Maximalenergie und dickem Filter¹³⁵. Das Tomogramm des globalen Minimums ist ebenfalls in 7.3 dargestellt. Das Spektrum, welches hierzu gehört (das vermeintlich optimale Spektrum), hat eine Maximalenergie von 70 keV und eine Kombination aus 1 mm Cu-Filter und 0,70 mm Zn-Filter ($\bar{E} = 59$ keV). Sowohl in der Fensterung, die die Darstellung des Holzkerns noch zulässt, als auch in der Fensterung die Metallteile zeigt, sind deutliche Streifenartefakte zwischen den Bauteilen bzw. cupping-Artefakte zu erkennen. Insgesamt handelt es sich um eine „schlechte“ Tomographie.

Für dieses Beispiel des Klarinettenphantoms muss man erwarten, dass das härteste Röntgenspektrum (welches hier gleichzeitig das mit der größten Monochromasie ist) zumindest für die Metallteile „gute“ Tomographie ergibt. Tatsächlich ist der visuelle Eindruck des entsprechenden Tomogramms besser, dennoch bleiben starke Artefakte bis hin zur Auslöschung der Konturen im Volumen des Holzkörpers zurück ($E_{\max} = 220$ keV, $\bar{E} = 144$ keV, 2 mm Cu-Filter). Ein solches Spektrum würde auch ein *erfahrener Bediener* vorziehen, wenngleich damit nicht gesagt ist, dass das härteste Spektrum zu der „besten“ Tomographie führt. Die ursprüngliche Fragestellung bleibt hier also zunächst unbeantwortet.

Diese nicht erfolgreiche Optimierung zeigt die Grenzen der Methode einer „reinen“ Minimierung der Shannon-Entropie des Tomogramms auf. Der Grund dafür, dass das genannte Tomogramm eine sehr kleine Shannon-Entropie aufweist, lässt sich aus dem Histogramm ablesen. Die Materialpeaks für die drei Materialien Luft, Holz und Metall (= Neusilber) sind abgesehen von dem für Luft nur schwach ausgeprägt und auch kaum voneinander separiert¹³⁶. Anders ausgedrückt ist das Holz so gut wie gar nicht abgebildet und das Metall nur mit Artefakten im Metallvolumen und in der Umgebung. Das resultiert in einem Histogramm, welches effektiv nur den „Luftpeak“ enthält und damit eine kleine Shannon-Entropie aufweist.

Die Interpretation lautet, dass diese tomographische Abbildung so weit von einer sinnvollen Abbildung des Klarinettenphantoms entfernt ist, dass ihr Informationsgehalt gegen Null, aber nicht gegen den Informationsgehalt des gesuchten Objektes strebt. An dieser Stelle versagt die Methode der einfachen Minimierung der Entropie des gesamten Tomogramms. Es müsste eine weitere Kategorie eingeführt werden, welche die Güte der Abbildung messen

¹³⁵ Das ist zwecks Übersichtlichkeit nicht explizit in der Abbildung dargestellt. Es handelt sich bei den beschriebenen lokalen Minima jeweils um die Enden der nach rechts abfallenden Serien von Quadraten in dem Streubild. Das Ende einer solchen Serie ist auch das globale Minimum.

¹³⁶ Aus physikalischer Sicht kommt hinzu, dass die rekonstruierten Schwächungskoeffizienten wenig sinnvoll sind.

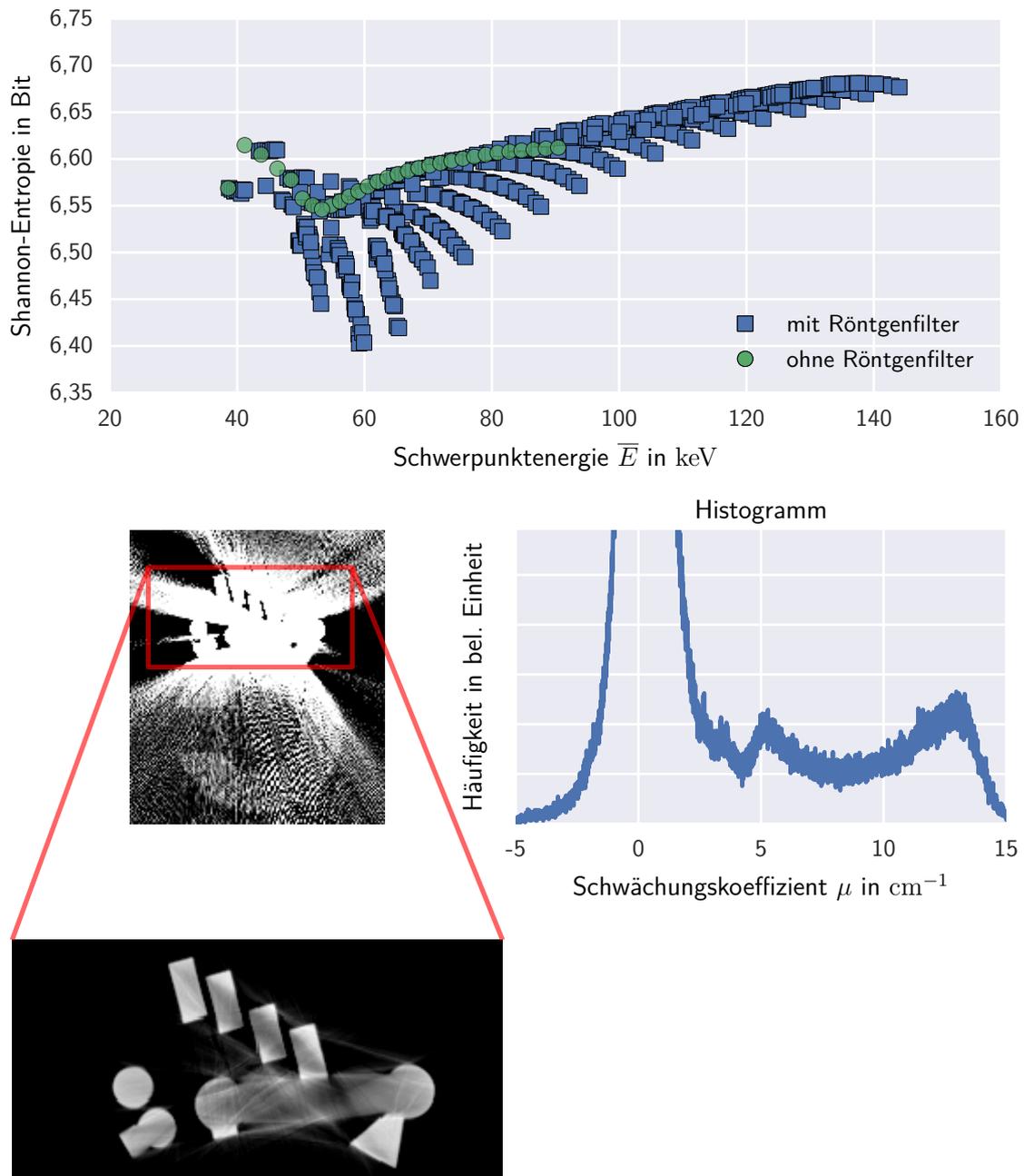


Abb. 7.3.: Das Streudiagramm oben zeigt die Shannon-Entropie aller simulierten Tomogramme des Klarinettenphantoms in Abhängigkeit der Schwerpunktsenergie des jeweils zugehörigen Spektrums. Unten ist eine Schicht aus dem Tomogramm des Datensatzes mit der kleinsten Shannon-Entropie dargestellt (in zwei verschiedenen Fensterungen). Unten rechts ist das Histogramm dieses Tomogramms (bezüglich aller Schichten) aufgetragen.

kann. Dies kann zum Beispiel eine der in Kap. 6.1 anderen Tomogrammentropien sein oder man schließt solche pseudo-Optima aus, indem man die physikalisch unsinnigen Schwächungskoeffizienten automatisiert erkennt.

Optimierung hinsichtlich einer zwei-Spektrenmessung

Im Folgenden wird das Optimierungsproblem für das Klarinettenphantom für den Fall einer Messung mit zwei Röntgenspektren betrachtet¹³⁷. Die Fragestellung lautet dann: Welche Kombination aus zwei Röntgenspektren führt zu einem optimalen Tomogramm? Objekte wie das Klarinettenphantom sind mit Laborröntgenquellen nicht gut untersuchbar, was letztlich auch die simulative Optimierung hinsichtlich eines Spektrums zeigt. Es gibt allerdings die Möglichkeit solche Objekte zweimal, mit verschiedenen Spektren, zu tomographieren. Aus den beiden Datensätzen kann ein Ergebnistomogramm berechnet werden, welches deutlich vermindertes Artefaktinventar zeigt. Bei diesen sogenannten Mehrenergie-Verfahren kommen verschiedene Algorithmen für die Auswertung der Datensätze in Betracht. Typischerweise wird die sogenannte Basismaterialzerlegung, welche von Alvarez und Macovski in Ref. [5] publiziert wurde, angewendet. An Stelle der Basismaterialzerlegung kann, mit deutlich weniger algorithmischen Aufwand, eine Linearkombination der beiden Tomogramme durchgeführt werden. Von dem daraus resultierenden Ergebnistomogramm ist eine deutliche Reduzierung des Artefaktinventars zu erwarten. Dieses vereinfachte Verfahren einer zwei-Spektrenrekonstruktion ist in der Medizintechnik erfunden worden und als „linear image blending“¹³⁸ bekannt (siehe Ref. [31, 53]).

Die beiden zu kombinierenden Tomogramme seien mit $V_{<}$ und $V_{>}$ bezeichnet, für die Simulation mit niedriger bzw. höherer Schwerpunktenenergie.

Die konkrete Formel ist Ref. [65] entnommen. Dort wird auch ausführlicher untersucht, inwiefern sich mittels solcher Linearkombinationen das Artefaktinventar reduzieren lässt und wie sich die Kontrastverhältnisse ändern. Das Ergebnisvolumen schreibt sich als

$$V = (1 - \alpha)V_{<} + \alpha V_{>}. \quad (7.1)$$

Eine physikalische Interpretation des Parameters ist hier nicht von Bedeutung. α wird als freier Parameter des gesamten Messprozesses betrachtet, der unabhängig optimiert werden kann. Die sinnvollen Werte für α erwartet man für $\alpha > 1$, es wird also eine „gewichtete

¹³⁷ Hier fließt ein Vorwissen in die Optimierung mit ein, denn es ist zumindest dem erfahrenen Bediener bekannt, dass sich zwei Spektren Verfahren für Objekte wie das Klarinettenphantom besser eignen.

¹³⁸ Es gibt auch weitere Varianten einer gewichteten Summe der beiden beteiligten Tomogramme, teilweise mit Wichtungsfaktoren, die vom rekonstruierten Schwächungskoeffizienten abhängen.

Differenz“ gebildet.

Für ein gegebenes Set aus $V_<$ und $V_>$ kann das optimale α ebenfalls durch eine Minimierung der Shannon-Entropie gefunden werden. In Abb. 7.4 ist die Shannon Entropie der Ergebnistomogramme als Funktion von α für einige Beispielskombinationen dargestellt. Der Verlauf der Kurven zeigt jeweils ein klares Minimum, welches das optimale α markiert. Für die in Abb. 7.4 gezeigten Beispiele wurde ein Blindtest hinsichtlich der Bestimmung des optimalen α durchgeführt. Dazu wurde das optimale α zusätzlich zur automatisierten Optimierung mittels der Shannon-Entropie über den Bildeindruck und durch „Ausprobieren“ bestimmt¹³⁹. Die Ergebnisse dieses heuristischen Verfahrens sind als vertikale Linien in Abb. 7.4 mit eingetragen. Man stellt kleinere Abweichungen fest, die sich sowohl durch den individuellen Bildeindruck als auch dadurch erklären lassen, dass das heuristische Verfahren nur auf einzelnen Schnittbildern und nicht auf dem gesamten Tomogramm durchgeführt wurde. Allerdings bestätigt der Blindtest die Vermutung, dass die Tomogramme mit kleiner Shannon-Entropie auch einen guten visuellen Eindruck beim *erfahrenen* Betrachter hervorrufen.

Um eine zwei-Spektren-Optimierung durchzuführen, muss also zunächst für alle (sinnvollen) Zweier-Kombinationen der Tomogramme aus der Simulationsreihe das optimale α gefunden werden. Anschließend muss unter der Menge der Ergebnistomogramme das Optimale gefunden werden. Diese Vorgehensweise ist für eine Teilmenge aller möglichen Kombinationen ausgeführt. Dazu sind für die $V_<$ alle Spektren ohne Filter mit $E_{\max} > 100$ keV und für die $V_>$ alle Spektren mit $\bar{E} > 60$ keV verwendet worden. Kombinationen, bei denen \bar{E} des Spektrums ohne Filter größer ist als das \bar{E} des Spektrums mit Filter sind ausgeschlossen. Zusätzlich sind sehr ähnliche Spektren ausgeschlossen worden. Effektiv bedeutet dies, dass die Abtastdichte der Filterdicken verkleinert wurde. Es wurden 367 solche Kombinationen identifiziert und für die Brute-Force Optimierung verwendet¹⁴⁰.

Das Ergebnis dieser Optimierung ist in Abb. 7.5 dargestellt. Optimal ist die Linearkombination von $V_<$: $E_{\max} = 110$ keV ohne Filter; $V_>$: $E_{\max} = 220$ keV mit 1,70 mm Cu-Filter. Das Streudiagramm in Abb. 7.5 zeigt die Shannon-Entropie der Ergebnistomogramme nach automatischer Optimierung des Parameters α für jede der untersuchten Kombinationen. Jeder Punkt steht also für das Ergebnistomogramm bezüglich einer Kombination aus zwei Spektren. Man beobachtet für die hier gewählten Spektrenkombinationen, dass zwei Spektren mit größerer Differenz der Schwerpunktenenergien zu kleinerer Shannon-Entropie

¹³⁹ Vielen Dank an dieser Stelle an Frau Dr. Wagner, die sich als „Sparingspartner“ zur Verfügung gestellt hat.

¹⁴⁰ Der Datensatz der möglichen Kombinationen ist zugunsten der Rechenzeit ausgedünnt worden.

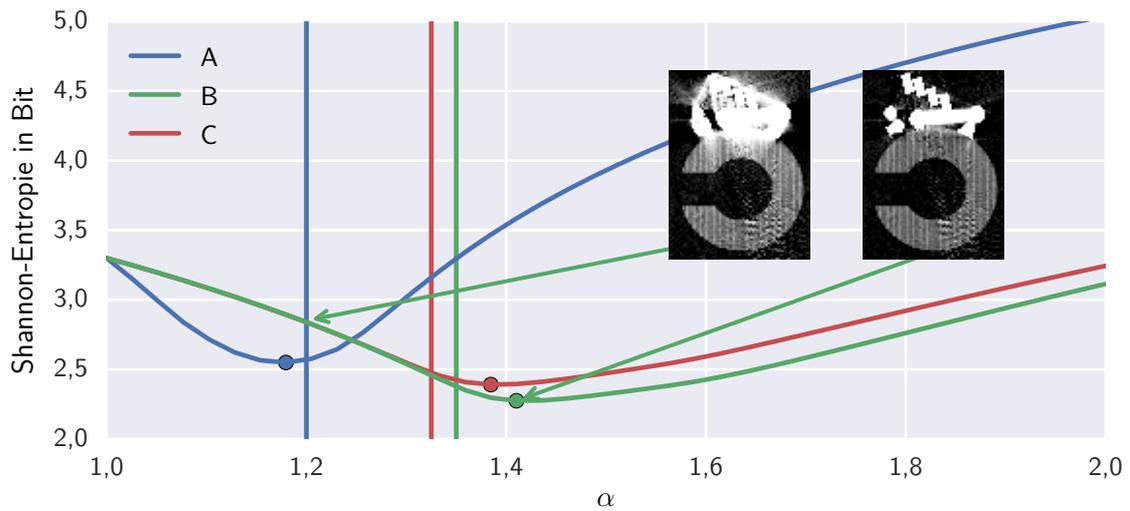


Abb. 7.4.: Shannon-Entropie des Ergebnistomogramms einer Linearkombination der Tomogramme für je zwei verschiedene Spektren. Die vertikalen Linien markieren das im Blindtest heuristisch gefundene optimale α . Die Punkte markieren das per Brute-Force Optimierung automatisch gefundene optimale α . Die beiden Tomogramme gehören zur Kombination B, einmal für das optimale $\alpha = 1,41$ und zum Vergleich für ein willkürlich gewähltes $\alpha = 1,2$. Sie sind identisch gefenstert dargestellt. Hier sind beispielhaft drei Spektrenkombinationen gezeigt:

A $V_{<}$: $E_{\max} = 70$ keV, kein Filter; $V_{>}$: $E_{\max} = 220$ keV, 1,70 mm Cu-Filter

B $V_{<}$: $E_{\max} = 180$ keV, 2 mm Al-Filter; $V_{>}$: $E_{\max} = 220$ keV, 1,70 mm Cu-Filter

C $V_{<}$: $E_{\max} = 220$ keV, kein Filter; $V_{>}$: $E_{\max} = 220$ keV, 1,70 mm Cu-Filter

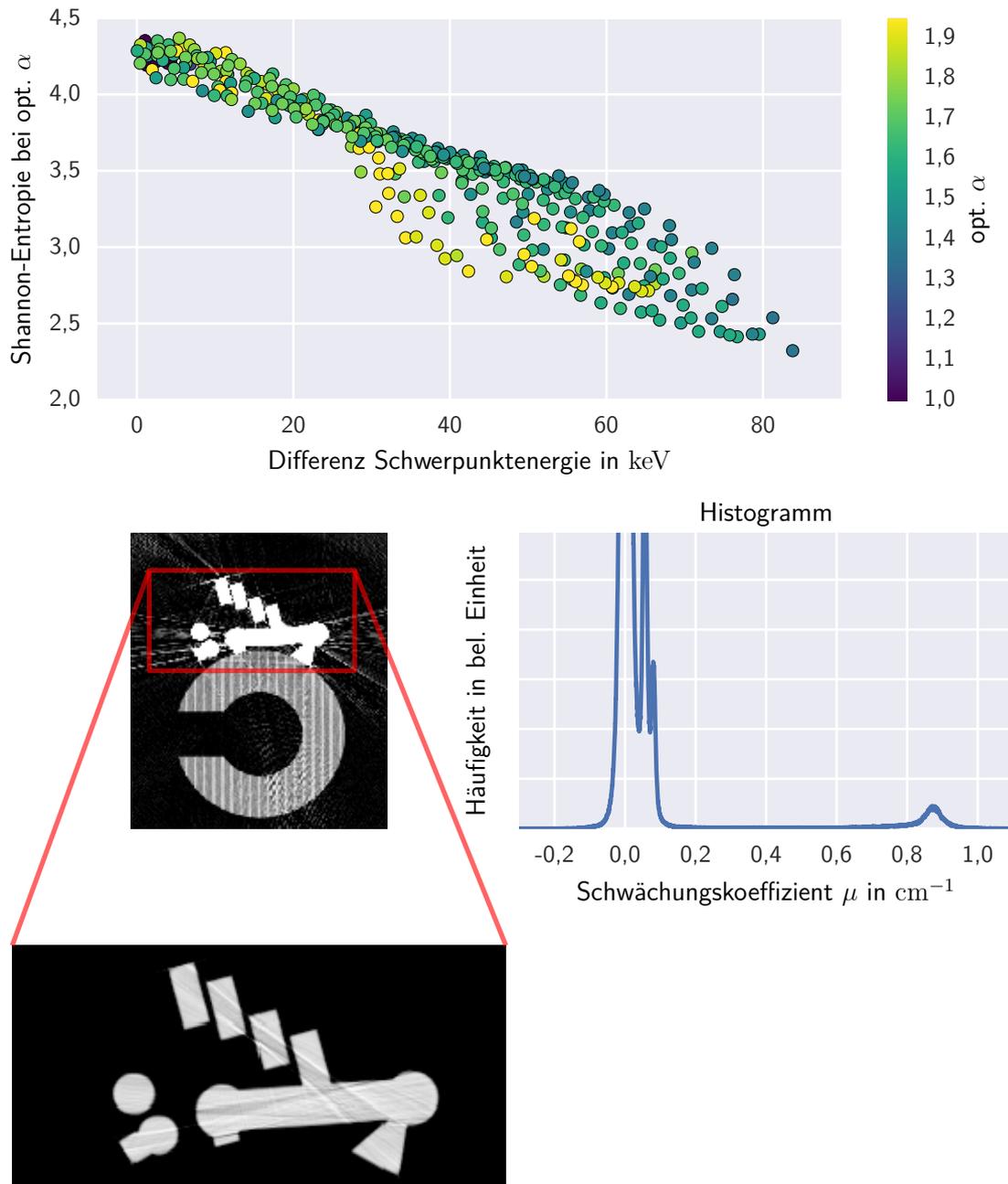


Abb. 7.5.: Optimierung mittels Shannon-Entropie der Ergebnistomogramme für das zwei-Spektrenverfahren mittels Linearkombination. Das Streudiagramm zeigt die Shannon-Entropie verschiedener Spektrenkombinationen mit bereits optimierten α als Funktion der Differenz der Schwerpunktenergien. Unten ist das Ergebnistomogramm mit global kleinster Shannon-Entropie gezeigt (in zwei verschiedenen Fensterungen, Metall und Holz). Unten rechts ist das Histogramm bezüglich des gesamten Tomogramms dargestellt.

führen.

Der visuelle Eindruck des Tomogramms bestätigt das Gelingen der zwei Spektren Optimierung. Sowohl in der Holzfensterung als auch in der Metallfensterung sind nur wenige Streifenartefakte zu erkennen. Cupping-Artefakte sind nicht mehr relevant und die Abbildung des Holzes ist insbesondere auch direkt neben Metallteilen gegeben, sogar die Außenkante des Holzkörpers ist an diesen Stellen scharf abgebildet. Dieser Eindruck bestätigt sich im Histogramm: es sind vier Materialpeaks erkennbar (Luft, Holz in beiden Dichten und Metall). Die relativen Amplituden der Peaks geben etwa die Volumenanteile der beteiligten Materialien wieder.

Validierung der zwei-Spektren-Optimierung mittels realer Messdaten

Das Klarinettenphantom ist einer realen Klarinette nachempfunden. An dem realen Vorbild des virtuellen Klarinettenphantoms sind CT-Messungen mit verschiedenen Röntgenspektren und zwei verschiedene Linearkombinationen realisiert worden. Abb. 7.6 zeigt drei Ergebnisse (zwei zwei-Spektrenkombinationen und eine *ein-Spektrum*-Tomographie). Das Tomogramm „C“ korrespondiert mit der Beobachtung, welche für die Optimierung hinsichtlich eines einzelnen Spektrums gemacht wurde: Obwohl das verwendete Spektrum sogar *härter* ist, als das oben genannte, kommt es im Tomogramm zu einer nahezu vollständigen Auslöschung der Objektkonturen. Im zugehörigen Histogramm beobachtet man ähnliches: Es gibt zwei Peaks, der um die Null zentrierte ist der Luftpeak, dieser ist wenig gut separiert von dem Holzpeak. Der Metallpeak, welcher rechts vom Holzpeak erscheinen müsste, ist durch das Artefaktinventar so stark verbreitert, dass er nur als asymmetrische Fortsetzung des Holzpeaks in Erscheinung (im Bereich $0,70 \text{ cm}^{-1} < \mu < 2,00 \text{ cm}^{-1}$) tritt.

Für beide Tomogramme mit zwei-Spektrenkombination A und B gilt, dass das Holz deutlich besser abgebildet ist und der visuelle Eindruck in der Metallfensterung ein, verglichen mit C, deutlich vermindertes Artefaktinventar aufweist. Dennoch beobachtet man eine teilweise Auslöschung der Konturen in dem Bereich wo Holz und Metall direkt aneinander liegen, sowie leichte Streifen- und cupping-Artefakte in und um die Metallteile.

Die Histogramme A und B zeigen beide drei Materialpeaks, die jeweils besser voneinander separiert sind, als dies für C der Fall ist. Tatsächlich sind auch die Jahresringe im Holz (also die Dichteunterschiede) in diesem Tomogrammen sogar abgebildet, allerdings ist der Kontrast sehr schwach und er lässt sich nur in solchen Schichten visualisieren, wo kein Metall anwesend ist. Das spiegelt sich im Histogramm wieder, wo es nur die genannten drei statt vier Materialpeaks gibt. Dies bestätigt erwartungsgemäß den Erfolg der zwei-Spektrenmethode,

was allerdings hier nicht die Fragestellung war. An dieser Stelle sei allerdings angemerkt, dass die Optimierungsmethode durchaus die Entscheidung für eine zwei-Spektrenmessung getroffen hätte (alle Tomogrammentropien der zwei-Spektrensimulationen waren kleiner als die aller ein-Spektrensimulationen). Allerdings war die Frage nach einem ein oder Mehrereverfahren hier nicht Teil der zu optimierenden Parameter. Vielmehr muss aus dem Vergleich der Tomogramme bzw. Histogramme A und B herangezogen werden um festzustellen, ob die simulationsbasierte Optimierung erfolgreich war. Die zwei-Spektrenkombination B entspricht weitestgehend dem was in der automatisierten Optimierung oben, als Optimum gefunden wurde. Das Tomogramm A hat ebenfalls eine Entsprechung in dem zur Optimierung durchsuchten, simulierten Datensatz oben. Dort kann abgelesen werden, dass B weniger Artefakte enthalten muss als A, weil die Differenz der Schwerpunktenenergien für B kleiner ist als für A. Mit Blick auf die beiden Histogramme bestätigt sich die simulative Vorhersage: Für alle drei Materialpeaks, besonders für den Metallpeak (in der Vergrößerung in Abb. 7.6 dargestellt) gilt, dass die Peaks in Histogramm A breiter sind als in B. Zusätzlich sind Luftpeak und Holzpeak in B besser separiert als in A. Insgesamt bedeutet dieser Befund, dass das Tomogramm B weniger Artefaktinventar hat als A. Die simulative Vorhersage ist also zutreffend. Dieses Ergebnis spiegelt die Vorhersage der Simulation wider und ist damit ein Beispiel für eine gelungene Optimierung der CT-Messparameter. Konkret wurde hier die Beschleunigungsspannung, der Röntgenfilter, sowie die Aussage, dass eine zwei-Spektren Messung durchgeführt werden muss, aus der Minimierung der Shannon-Entropie abgeleitet. Das ist insofern bemerkenswert, als die Simulationen recht idealisiert ausgeführt worden sind. Das erklärt auch die Artefakte in der realen Messung die dort auch bei den deutlich optimaleren Tomogrammen noch vertreten sind (Rauschen, Streustrahlung und das genaue Detektorantwortverhalten waren in der Simulation nicht berücksichtigt). Die experimentelle Validierung der simulationsbasierten Aufnahmeplanung konnte auch hier leider nicht exakt mit simulativ optimalen Parametern durchgeführt werden, was auf technische Einschränkungen des verwendeten CT-Systems zurückzuführen ist.

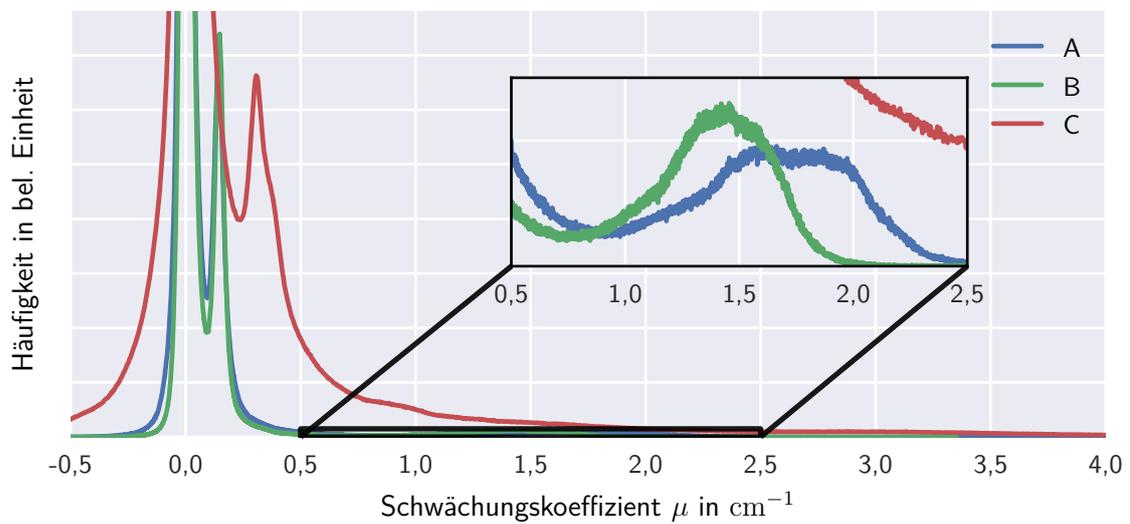
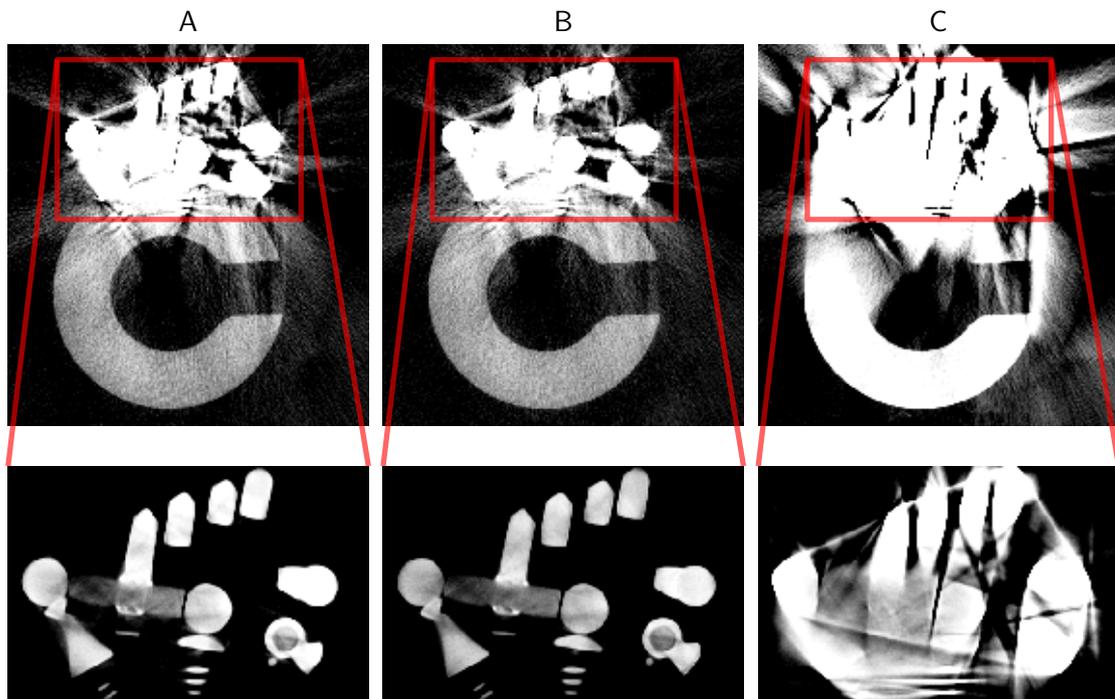


Abb. 7.6.: Tomogramme aus realen Messungen an einer Klarinette. Die Schichtdarstellungen sind jeweils identisch gefenstert. Die obere Zeile so, dass der Holzkorpus sichtbar ist, unten so, dass die Metallteile gezeigt werden. Die drei Datensätze sind mit verschiedenen Röntgenspektren(-kombinationen) erzeugt worden:

A $V_{<}$: $E_{\max} = 65 \text{ keV}$, kein Filter; $V_{>}$: $E_{\max} = 220 \text{ keV}$, 1,70 mm Cu-Filter

B $V_{<}$: $E_{\max} = 110 \text{ keV}$, 2 mm Al-Filter; $V_{>}$: $E_{\max} = 220 \text{ keV}$, 2,50 mm Cu-Filter

C V : $E_{\max} = 110 \text{ keV}$, kein Filter

In dem Diagramm unten sind die drei zugehörigen Histogramme aufgetragen.

7.2. Diskussion des entropiebasierten Optimierungsverfahrens

Durch die Anwendung der Informationstheorie auf das Aufnahmeplanungsproblem ist es gelungen, die Shannon-Entropie als Gütemaß für Tomogramme zu identifizieren (genauer: als Grundlage für die Definition einer Klasse von Gütemaßen). Die Stärke des Ansatzes liegt darin, dass an dem einfachen Sender-Empfänger-Modell der Informationsgehalt von Objekt, Messergebnis und Artefaktmenge leicht zugeordnet werden kann. Das hilft besonders bei der Interpretation des Gütemaßes. Bemerkenswert ist der Befund, dass in typischen Anwendungsfällen industrieller Computertomographie die Artefaktmenge durch die Entropie gerade so quantifiziert wird, dass kein Vergleich mit einer idealen Referenz nötig ist. Insofern handelt es sich um ein univariates Maß, welches jedoch, entsprechendes Vorwissen vorausgesetzt, mit größerer Aussagekraft auch referenziert werden kann (dann muss man die $H(O)$, $H(M)$ und $I(M, O)$ einzeln berechnen und ihre Verhältnisse analysieren). Letzteres ist bei einer simulativen Optimierung leicht möglich, jedoch im Rahmen der untersuchten Beispiele nicht notwendig gewesen.

Anhand der beiden gezeigten Beispiele ist, mit nicht optimaler Suchstrategie, das Konzept einer objektbezogenen Aufnahmeplanung demonstriert worden.

Die Tomogramm-Entropie (diejenige, welche „nur“ über dem Alphabet der Voxelwerte definiert wurde) ist ein histogrammbasiertes Maß. Mit dem Zweck „Quantifizierung der Artefaktmenge“ ist, von Reiter et al. [82], ein Gütemaß für Tomogramme publiziert worden (genannt Q-Maß). Das Q-Maß definiert sich aus der symmetrischen Breite¹⁴¹ und dem Abstand der Materialpeaks im Histogramm. Bei starkem Überlapp der Materialpeaks ist das Q-Maß nicht mehr wohldefiniert. Ein systematischer Vergleich mit den entropiebasierten Maßen ist bislang nicht erfolgt. Aufgrund der Definition des Q-Maß' kann man in Fällen, in denen Cupping-Artefakte wichtig sind und das Q-Maß noch berechnet werden kann, hohe Korrelation zur Tomogramm-Entropie erwarten.

¹⁴¹ Es werden Gauß-Glocken an die Peaks gefittet. Dies ist allerdings nur in grober Näherung richtig, denn, wie in Kap.4 besprochen, erzeugt gerade das häufig auftretende Cupping-Artefakt asymmetrische Materialpeaks.

8. Zusammenfassung und Ausblick

8.1. Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit drei Aspekten, welche für die Durchführung einer simulationsgestützten Aufnahmeplanung angewendet werden können. Zwei Aspekte beziehen sich dabei auf die Erweiterung der analytischen Röntgensimulation hinsichtlich ihrer Realitätsnähe.

Zum einen ein Verfahren, welches es ermöglicht die analytische Simulation auf ein reales CT-System zu kalibrieren. Die dazu nötigen Kalibrationsmessungen (mit der zugehörigen Algorithmik) ersetzen die analytische Modellierung einer Röntgenröhre und des Detektors¹⁴². Der experimentelle Aufwand für die Kalibrationsmessungen beschränkt sich auf die Aufnahme einiger Radiographien von Stufenkeilen. Je nach Detaillierungsgrad des Röntgenröhren- bzw. eines Detektormodells, ist es erheblich einfacher die Radiographien aufzunehmen und auszuwerten, als sämtliche Koeffizienten der Systemkomponenten für die Modelle zu bestimmen. Damit stellt diese Vorgehensweise eine Neuerung für die analytische Röntgensimulationsmethode bereit.

Es konnte gezeigt werden, dass mittels des sogenannten Spektrenschätzverfahrens das zur Kalibration nötige *Systemspektrum* erzeugt werden kann, um damit die analytische Simulation zu betreiben. Die Spektrenschätzung wird dazu bezüglich der experimentellen Freiheitsgrade hinsichtlich ihrer Stabilität und der Ergebnisqualität untersucht. Experimentelle Validierungen der Methode zeigen zufriedenstellende Ergebnisse hinsichtlich der Übereinstimmung von kalibrierter Simulation und Messung.

Zum anderen ist im Rahmen dieser Arbeit ein neuartiges Modell zur analytischen Simulation der Röntgenstreustrahlung bis einschließlich der zweiten Ordnung entwickelt worden. Besonderes Augenmerk bei der Entwicklung dieses Modells ist darauf gelegt, dass die analytische Streustrahlsimulation für eine CT-Simulation, also für eine größere Menge von Streuprojektionen, tauglich sein soll. Dies wird durch eine algorithmische Vereinfachung erreicht: Sämtliche Berechnungen zur Intensität der Streustrahlung sind vom Raytracing entkoppelt. Das Raytracing muss nicht für einzelne Trajektorienpositionen wiederholt

¹⁴² Jeweils hinsichtlich des spektralen Verhaltens.

werden, sondern ist ein vorgelagerter, einmaliger Rechenschritt. Dies macht die Streustrahlenberechnung besonders dann effizient, wenn mehrere Streubilder für verschiedene Trajektorienpositionen berechnet werden sollen. Das Streumodell basiert auf einem bereits existierenden Modell der ersten Ordnung. Vergleich mit der MC-Simulationsmethode, welche den Goldstandard darstellt, ergibt an ausgewählten Beispielen hohe Übereinstimmung bezüglich der Streustrahlung erster Ordnung. Die Intensität der zweiten Ordnung wird im analytischen Modell unterschätzt. Dieser Effekt konnte durch Einführung einer Korrektur gemindert werden. Sowohl die Ortsverteilung, als auch die Absolutwerte der Intensität zweiter Ordnung sind dadurch näher am MC-Ergebnis.

Der dritte Aspekt, den ich in dieser Arbeit behandle, ist die Definition eines allgemeingültigen Gütemaßes für die Computertomographie. Dem geht die Definition des Aufnahmeplanungsproblems der industriellen CT voraus. Dazu ist sowohl zusammengetragen, welche Parameter für eine CT-Messung gefunden werden müssen, als auch definiert worden, was ein physikalisch korrektes Tomogramm ist. Wichtig ist in diesem Zusammenhang die Feststellung, dass Aufnahmeplanung für CT immer spezifisch für das zu untersuchende Objekt ist.

Für diese Arbeit ist eine sogenannte „simulationsgestützte Aufnahmeplanung“ angestrebt worden. Der Ansatz besagt, dass mittels möglichst realistischer Simulation der CT-Messung eines Objektes die optimalen Parameter für eine Messung gefunden werden. Eine Optimierung verlangt immer nach einem überprüfbareren Kriterium, nach dem entschieden werden kann. Für die Ergebnisse einer CT-Messung, also die Tomogramme, ist es nicht leicht ein solches Gütemaß zu finden, welches sich zudem dazu eignet, automatisiert ausgewertet zu werden. Für die Definition von Gütemaßzahlen verwende ich eine neuartige¹⁴³ Interpretation des CT-Messprozesses im Sinne der Shannonschen Informationstheorie. Man kann den Messprozess als ein System auffassen, welches die Information bezüglich der 3D-Ortsverteilung der Schwächungskoeffizienten des Objekts mittels eines fehlerbehafteten Übertragungskanals in das Tomogramm überträgt. Die Fehler, die der „Kanal“ induziert, stammen aus den bekannten Unzulänglichkeiten laborbasierter CT-Systeme und der nachgelagerten Algorithmik zur Rekonstruktion der Tomogramme.

Diese Interpretation führt dazu, dass die mathematischen Werkzeuge der Informationstheorie auf das Aufnahmeplanungsproblem für die CT angewendet werden können. Anders als in der klassischen Informationstheorie¹⁴⁴ gilt es hier nicht Co- und Decodierer zu optimieren, sondern es kann der Kanal, also das CT-System mit seinen zugänglichen Parametern, optimiert werden. Das heißt, es werden die zur Verfügung gestellten Freiheitsgrade (= Mess-

¹⁴³ Für die CT als Technologie neuartig.

¹⁴⁴ Die Informationstheorie sieht den fehlerbehafteten Kanal als gegeben und unveränderlich an.

parameter) der CT-Messung mit den Mitteln der Informationstheorie optimiert. Durch konsequente Verfolgung dieser Interpretation wurde abgeleitet, dass, basierend auf der Shannonschen Entropie, eine Klasse aus Maßzahlen auf Tomogrammen definiert werden kann, die allesamt Gütemaße für die CT-Messung sind.

Die Verwendung der analytischen Simulation, als Modell des „fehlerbehafteten Kanals“, zusammen mit den aus der Informationstheorie abgeleiteten Gütemaßen für Tomogramme ermöglicht es eine *automatisierte* computernumerische Optimierung durchzuführen. Insofern stellt diese Arbeit alle essenziellen Werkzeuge, nämlich Verbesserungen der analytischen Simulationsmethode, sowie die Definition von Gütemaßen für eine solche Optimierung zur Verfügung. Konkrete Optimierungsverfahren, welche den optimalen CT-Parametersatz besonders effizient finden, können auf dieser Basis entwickelt werden. Dazu ist es voraussichtlich nötig, mittels der in dieser Arbeit bereitgestellten Verfahren die Kopplung der einzelnen CT-Parameter eingehend zu untersuchen¹⁴⁵. Im Rahmen einfacher „Brute-Force“ Optimierungen konnte in dieser Arbeit bereits an Beispielen nachgewiesen werden, dass die vorgeschlagene Optimierungskette funktionsfähig ist.

8.2. Ausblick auf weitere Anwendungen und Aufnahmeplanungsverfahren

Im diesem Abschnitt will ich einen Ausblick bezüglich der drei Themenfelder „Spektrenschätzung“, „analytische Streusimulation“ und „Optimierungsverfahren für CT“ geben. Dabei beschränke ich mich auf solche Themen die mir im Kontext dieser Arbeit als erwähnenswert oder weiterführend erscheinen. Teilweise mögen die hier angesprochenen Verfahren schon bearbeitet oder erdacht worden sein, sofern mir entsprechende Literatur bekannt ist, gebe ich sie an.

Das Ergebnis des Spektrenschätzverfahrens ist bereits für die Rekonstruktion von mehr-Energie-Verfahren¹⁴⁶ angewandt worden [108]. Diese Anwendung der Methodik halte ich für eine sehr wichtige. Eine Idee die darüber hinaus geht: Das Systemspektrum, welches mittels dieses Verfahrens bestimmt wird, enthält Information über den Zustand des CT-Systems. Sowohl Röntgenröhren als auch Detektoren zeigen Alterungsverhalten. Bei den Röntgenröhren gibt es beispielsweise den Effekt, dass sich der elektronische Brennfleck in das Targetmaterial einbrennt. Solche Alterungserscheinungen können das Systemspektrum

¹⁴⁵ Natürlich sind auch diverse Verfahren des sogenannten „machine learning“ denkbar, welche solche Aufgaben möglicherweise automatisch erledigen können.

¹⁴⁶ Verfahren die es erlauben, durch Anwendung verschiedener Röntgenspektren, Materialinformation aus Radiographien zu gewinnen.

in Form und Intensität verändern. Es kann mittels der Spektrenschätzung ein Verfahren zur Zustandsüberwachung von CT-Systemen gefunden werden. Davor muss eine ausführliche Untersuchung über die Stärke der alterungsbedingten Veränderung durchgeführt und gezeigt werden, dass das Spektrenschätzverfahren sensitiv genug ist, um diese zu erfassen. Der geringe experimentelle Aufwand des Verfahrens käme einer solchen Zustandsüberwachungsmethode zu gute. Man müsste, in bestimmten Zeitabständen, Radiographien der wohlbekanntesten Testkörper am Zielsystem anfertigen. Systeme, für die ein solches Überwachungsverfahren interessant ist, sind sicherlich solche mit besonders hoher Beanspruchung (z.B. Dauerbetrieb in der industriellen Fertigung).

Das Modell zur analytischen Berechnung der Streustrahlung bietet zwei weitere Anwendungsmöglichkeiten, die in dieser Arbeit gänzlich außer Acht gelassen wurden. Zum einen können die Streubilder als Korrekturdaten für eine reale Messung dienen. Für diesen Zweck ist die angesprochene kalibrierte Variante der Streusimulation nützlich (sofern die damit verbundenen Fehler in vertretbarem Rahmen bleiben). Man kann dann davon ausgehen, dass die simulierten Streustrahlenbilder direkt von den Messdaten abgezogen werden können. Voraussetzung ist allerdings, dass man ein Modell des gemessenen Objektes für die Simulation hat und dass die Trajektorie bekannt ist. Denkbar ist auch ein iteratives Verfahren, bei dem die Information über die Form des Objekts aus einem unkorrigierten Tomogramm stammt und die Materialinformation anderweitig zugefügt wird. Man kann dann die Streubilder näherungsweise berechnen und zur Korrektur verwenden. Mit dem korrigierten Tomogramm lässt sich das Vorgehen gegebenenfalls iterativ fortsetzen. Diese Vorgehensweise ist nicht weit davon entfernt, einen solchen Streusimulator in einem iterativen Rekonstruktionsverfahren einzusetzen. Für die erste Ordnung Streuung hat dies K. Dremel in [26] durchgeführt.

Zum anderen kann man die Information die an den Streuzentren, welche das Objekt homogen abtasten, entsteht nutzen. Bezüglich der Streuzentren ist in einem Zwischenschritt bekannt, wieviel Energie am jeweiligen Ort absorbiert wird. Das gilt für die Primärstrahlung und für die Streustrahlung erster Ordnung. Summiert man diese deponierte Energie über eine Trajektorie hinweg, kann man auf die Verteilung der deponierten Dosis des tomographierten Objektes rückschließen. Die so simulierte Dosimetrie mag vielleicht nicht den hohen Anforderungen aus der Medizin genügen, allerdings ist solche Information auch für industrielle Erzeugnisse interessant, wenn von diesen bekannt ist, dass sie unter Einfluss von Röntgenstrahlung degradieren.

Ausblickend bezüglich des simulationsgestützten Optimierungsansatzes sei festgehalten, dass das hier vorgeschlagene Optimierungsverfahren einen sehr generalistischen Ansatz

darstellt. Es sollen alle CT-Parameter optimiert werden. Der Ansatz setzt voraus, dass eine digitale Beschreibung des Objektes hinsichtlich Form und Material vorliegt. Für den industriellen Kontext ist es sicherlich eine brauchbare Annahme, dass das Objekt digital beschrieben ist und dass Realisierungen dieses Objektes nicht so stark von der Beschreibung abweichen, dass Änderungen an den CT-Aufnahmeparametern induziert sind.

Die simulationsgestützte Aufnahmeplanung, so wie sie hier dargestellt ist, kann also durch Verfahren ergänzt werden, welche entweder auf Basis einer Objektklassifizierung oder auf Basis von bereits aufgenommenen Messdaten (CT-Messungen oder Röntgenprojektionen) funktioniert.

Eine Untersuchung, die außerhalb des Fokus' dieser Arbeit liegt, ist die, ob das Vorwissen über das Objekt eine *nicht optimale* CT-Messung sein kann. Es ergibt sich ein direkter Anknüpfungspunkt an die simulationsgestützte Aufnahmeplanung. Denn aus einem (artefaktbehafteten) Tomogramm lässt sich die Objektform zumindest approximativ bestimmen. Mittels der so definierten Objektform und mit einer realistischen Annahme über das Material lässt sich ein iterativer Prozeß definieren: CT-Messung \rightarrow simulationsgestützte Aufnahmeplanung \rightarrow CT-Messung und so weiter. Man kann dieses Vorgehen auch anders beschreiben: Der fehlerbehaftete Informationsübertragungskanal, der im Rahmen dieser Arbeit von einer möglichst realistischen Simulation dargestellt wurde, kann auch durch ein reales System dargestellt werden.

Für beide Fälle ist es nötig, dass noch sinnvollere Optimierungsalgorithmik gefunden wird¹⁴⁷. Solche Optimierungsalgorithmik, welche effizienter als der Brute-Force Ansatz ist, zu finden stellt meiner Ansicht nach die wichtigste Aufgabe in Anknüpfung an diese Arbeit dar. In dieser Arbeit steht die Bereitstellung der Werkzeuge für den simulativen Ansatz im Fokus. Die Untersuchung der wechselseitigen Kopplung der CT-Parameter sollte ein Anknüpfungspunkt sein, um intelligente Algorithmik zur effizienten Optimierung zu finden. Das ist wichtig, denn insgesamt handelt es sich mit Simulation und tomographischer Rekonstruktion (die nötig ist um die Gütebewertung vorzunehmen) um ein eher rechenaufwändiges Verfahren.

Einen wichtigen Status unter den CT-Parametern hat die CT-Trajektorie. Sie hat einen hohen Kopplungsgrad an die Objektform und kann in neuartigen CT-Systemen, welche z.B. Industrieroboter zur Manipulation von Quelle und Detektor einsetzen, nahezu beliebige Form annehmen. Gerade solche Systeme mit hohem Freiheitsgrad erfordern Aufnahmeplanung im Sinne der Bahnplanung. Für diesen Fall mag ein Verfahren zur Aufnahmeplanung, welches keine CT-Rekonstruktion als Zwischenschritt hat, wegen der höheren Effizienz besonders interessant sein. Solche Ansätze fallen aus dem Fokus dieser Arbeit. Ich will an

¹⁴⁷ Das ist nicht notwendigerweise dieselbe für den simulativen Fall und für den Fall mit realem System.

dieser Stelle dennoch einen, meiner Ansicht nach, vielversprechenden Ansatz nennen, der den Optimierungsansatz dieser Arbeit für die Trajektorienplanung ergänzt.

Der Ansatz verfolgt das Schema: Gegeben sei die Menge von simulierten Röntgenprojektionen für alle möglichen Trajektorienpositionen. Gesucht wird das Ensemble von Projektionen (bzw. die zugehörigen Trajektorienpositionen), welches zu einer Rekonstruktion mit maximaler Güte führt. Dazu sei angenommen, dass die maximale Zahl der Trajektorienpositionen a priori gewählt wird. Mit Hilfe eines Maßes, welches bezüglich jeder Projektion berechnet wird, soll eine Projektion bezüglich ihres Beitrags (Informationsgehalts) zu einem guten Tomogramm bewertet werden können. Es muss dann also das Ensemble mit möglichst großem Beitrag zum Tomogramm gefunden werden (ohne das Tomogramm selbst zu bewerten). Auf der Suche nach einem möglichst geeigneten Maß für diese Aufgabe kann das Optimierungsverfahren dieser Arbeit gut angewendet werden. Objektspezifische Trajektorienplanung ist auch Gegenstand jüngerer Forschung. Mit speziellem Blick auf iterative Rekonstruktion findet man in Ref. [34] ein Verfahren dazu. Der Vorteil von einem rein projektionsbasierten Verfahren liegt darin, dass die Erzeugung der Projektionen auch durch Messung statt durch Simulation erfolgen kann¹⁴⁸.

Eine Idee, um zu einem projektionsbasierten Maß zu kommen, besteht darin, die spektrale Leistungsdichte (density power spectrum) der Projektionen zu bewerten bzw. zu vergleichen. Das kann sowohl über alle (Orts-)Frequenzen hinweg gemeinsam, als auch bezüglich einzelner Frequenzabschnitte geschehen. Sei die Leistungsdichte in Frequenzabschnitten betrachtet: Man wählt dann das Projektionsensemble, welches (in Summe) in allen Frequenzabschnitten den größten Betrag im Spektrum aufweist. In einer heuristischen Untersuchung [25] stellte sich dieses Vorgehen als vielversprechend heraus. Dabei ist es notwendig, dass der Algorithmus, welcher das Ensemble wählt, identische (bzw. sehr nahe beieinander liegende) Trajektorienpositionen ausschließt¹⁴⁹. Eine Weiterentwicklung dieser projektionsbasierten Trajektorienplanung hin zu einer dynamischen Trajektorienplanung (also eine Planung der Trajektorie während einer CT-Messung) ist im Hinblick auf automatisierte CT-Systeme interessant.

¹⁴⁸ Man kann z.B. ein Objekt „einlernen“, indem man es einmal mit vollständiger Trajektorie scannt und für Wiederholmessungen nur noch die als notwendig identifizierten Projektionen aufnimmt.

¹⁴⁹ Weitere Details dazu werden von H. Dorner in einer derzeit angefertigten Abschlussarbeit untersucht. Darin wird unter anderem gezeigt, dass die fourierbasierte Metrik um den angesprochenen Abstand der Trajektorienpositionen erweitert werden kann (zu einer neuen Metrik, die beides berücksichtigt).

Literaturverzeichnis

- [1] DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR ZERSTÖRUNGSFREIE PRÜFUNG E.V. (Hrsg.): *Digitale Radiologie DR1: Kursus Stufe 1*. 2005
- [2] AGOSTINELLI, S. ; ALLISON, J. ; AMAKO, K. ; APOSTOLAKIS, J. ; ARAUJO, H. ; ET AL: Geant4—a simulation toolkit. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 506 (2003), Nr. 3, S. 250–303. [http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8). – DOI 10.1016/S0168-9002(03)01368-8. – ISSN 01689002
- [3] ALLISON, J. ; AMAKO, K. ; APOSTOLAKIS, J. ; ARAUJO, H. ; ARCE DUBOIS, P. ; ASAI, M. ; BARRAND, G. ; CAPRA, R. ; ET AL: Geant4 developments and applications. In: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 53 (2006), Nr. 1, S. 270–278. <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.2006.869826>. – DOI 10.1109/TNS.2006.869826. – ISSN 0018-9499
- [4] ALLISON, J. ; AMAKO, K. ; APOSTOLAKIS, J. ; ARCE, P. ; ASAI, M. ; ASO, T. ; BAGLI, E. ; BAGULYA, A. ; BANERJEE, S. ; ET AL: Recent developments in Geant4. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 835 (2016), S. 186–225. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2016.06.125>. – DOI 10.1016/j.nima.2016.06.125. – ISSN 01689002
- [5] ALVAREZ, R. E. ; MACOVSKI, A. : Energy-selective reconstructions in X-ray computerised tomography. In: *Physics in Medicine and Biology* 21 (1976), Nr. 5, 733. <http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/21/5/002>. – DOI 10.1088/0031-9155/21/5/002. – ISSN 0031-9155
- [6] BACHMANN, A.-M. : *Charakterisierung einer Computertomographie-Anlage im Hinblick auf eine kalibrierte Simulation*. Erlangen, Universität Erlangen-Nürnberg, Bachelorarbeit, 2014
- [7] BARTSCHER, M. ; SATO, O. ; HÄRTIG, F. ; NEUSCHAEFER-RUBE, U. : Current state of standardization in the field of dimensional computed tomography. In: *Measurement*

- Science and Technology* 25 (2014), Nr. 6, S. 064013. <http://dx.doi.org/10.1088/0957-0233/25/6/064013>. – DOI 10.1088/0957-0233/25/6/064013. – ISSN 0957-0233
- [8] BENOIT, L. ; BELIN, É. ; ROUSSEAU, D. ; CHAPEAU-BLONDEAU, F. : Information-Theoretic Modeling of Trichromacy Coding of Light Spectrum. In: *Fluctuation and Noise Letters* 13 (2014), Nr. 04, S. 1450025. <http://dx.doi.org/10.1142/S0219477514500254>. – DOI 10.1142/S0219477514500254. – ISSN 0219-4775
- [9] BENOIT, L. ; BENOIT, R. ; BELIN, É. ; VADAINÉ, R. ; DEMILLY, D. ; CHAPEAU-BLONDEAU, F. ; ROUSSEAU, D. : On the value of the Kullback–Leibler divergence for cost-effective spectral imaging of plants by optimal selection of wavebands. In: *Machine Vision and Applications* 27 (2016), Nr. 5, S. 625–635. <http://dx.doi.org/10.1007/s00138-015-0717-7>. – DOI 10.1007/s00138-015-0717-7. – ISSN 0932-8092
- [10] BEUTEL, J. ; KUNDEL, H. L. ; VANMETTER, R. L.: *Handbook of medical imaging*. Bd. / Jacob Beutel; Harold L. Kundel; Richard L. Van Metter, eds. ; Vol. 1: *Physics and psychophysics*. Bellingham, Wash. : SPIE Press, 2000. – ISBN 0819436216
- [11] BLOCHIN, M. A.: *Physik der Röntgenstrahlen*. Verlag Technik, 1957
- [12] BORDA, M. : *Fundamentals in Information Theory and Coding*. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-20347-3>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-20347-3>. – ISBN 978-3-642-20346-6
- [13] BRAMBILLA, A. ; OUVRIER-BUFFET, P. ; RINKEL, J. ; GONON, G. ; BOUDOU, C. ; VERGER, L. : CdTe Linear Pixel X-Ray Detector With Enhanced Spectrometric Performance for High Flux X-Ray Imaging. In: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 59 (2012), Nr. 4, S. 1552–1558. <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.2012.2206828>. – DOI 10.1109/TNS.2012.2206828. – ISSN 0018-9499
- [14] BRAMON, R. ; BOADA, I. ; BARDERA, A. ; RODRÍGUEZ, J. ; FEIXAS, M. ; PUIG, J. ; SBERT, M. : Multimodal Data Fusion Based on Mutual Information. In: *IEEE transactions on visualization and computer graphics* 18 (2012), Nr. 9, S. 1574–1587. <http://dx.doi.org/10.1109/TVCG.2011.280>. – DOI 10.1109/TVCG.2011.280. – ISSN 1077-2626
- [15] BUZUG, T. : *Computed Tomography: From Photon Statistics to Modern Cone-Beam CT*. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2008. <http://dx.doi.org/10.1007/>

- 978-3-540-39408-2. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-39408-2>. – ISBN 978-3-540-39407-5
- [16] CHEN, M. ; FEIXAS, M. ; VIOLA, I. ; BARDERA, A. ; SHEN, H.-W. ; SBERT, M. : *Information theory tools for visualization*. Boca Raton and London and New York : CRC Press Taylor & Francis Group, 2017 (A K Peters visualization series). – ISBN 9781498740937
- [17] CHIFFRE, L. de ; CARMIGNATO, S. ; KRUTH, J.-P. ; SCHMITT, R. ; WECKENMANN, A. : Industrial applications of computed tomography. In: *CIRP Annals - Manufacturing Technology* 63 (2014), Nr. 2, S. 655–677. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cirp.2014.05.011>. – DOI 10.1016/j.cirp.2014.05.011. – ISSN 00078506
- [18] CHLAILY, S. ; AMBLARD, P.-O. ; MICHEL, O. ; JUTTEN, C. : Impact of noise correlation on multimodality. In: *2016 24th European Signal Processing Conference (EUSIPCO)*, 2016, S. 195–199
- [19] CLAUSSEN, J. : *Vergleich von Methoden und Algorithmen zur Streustrahlkorrektur in Dual-Energy Röntgenbildern*. Erlangen, Universität Erlangen–Nürnberg, Masterarbeit, 2015
- [20] CNUUDE, V. ; BOONE, M. N.: High-resolution X-ray computed tomography in geosciences: A review of the current technology and applications. In: *Earth-Science Reviews* 123 (2013), S. 1–17. <http://dx.doi.org/10.1016/j.earscirev.2013.04.003>. – DOI 10.1016/j.earscirev.2013.04.003. – ISSN 00128252
- [21] COURVEUR, C. : The EM Algorithm: A guided tour. In: KÁRNÝ, M. (Hrsg.) ; WARWICK, K. (Hrsg.): *Computer Intensive Methods in Control and Signal Processing*. Boston, MA and s.l. : Birkhäuser Boston, 1997. – ISBN 978-1-4612-7373-8
- [22] COVER, T. M. ; THOMAS, J. A.: *Elements of information theory*. 2nd ed. Wiley-Interscience <http://site.ebrary.com/lib/alltitles/docDetail.action?docID=10305137>. – ISBN 978-0471241959
- [23] DELAHAIES, A. ; ROUSSEAU, D. ; CHAPEAU-BLONDEAU, F. : Joint acquisition-processing approach to optimize observation scales in noisy imaging. In: *Optics letters* 36 (2011), Nr. 6, S. 972–974. <http://dx.doi.org/10.1364/OL.36.000972>. – DOI 10.1364/OL.36.000972. – ISSN 1539-4794
- [24] DERMOTT, E. C. ; HUBBEL, H, JOHN ; KISSEL, L. ; LAWRENCE LIVERMORE NATIONAL LABORATORY (Hrsg.): *EPDL97: the Evaluated Photon Data Library, '97 Version*. <https://www-nds.iaea.org/epd197/>. Version: 1997, Abruf: 06.09.2017

- [25] DORNER, H. : *Untersuchung fourierbasierter Gütemaße im Hinblick auf CT-Rekonstruktionen*. Nürnberg, Georg-Simon-Ohm-Hochschule Nürnberg, Praktikumsbericht, 2017
- [26] DREMEL, K. : *Modellbildung des Messprozesses und Umsetzung eines modellbasierten iterativen Lösungsverfahrens der Schnittbild-Rekonstruktion für die Röntgen-Computertomographie*. Würzburg, Universität Würzburg, Dissertation (Eingereicht), 2017
- [27] DREMEL, K. ; FUCHS, T. : Scatter simulation and correction in computed tomography: A reconstruction-integrated approach modelling the forward projection. In: *NDT & E International* 86 (2017), S. 132–139. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ndteint.2016.12.002>. – DOI 10.1016/j.ndteint.2016.12.002. – ISSN 09638695
- [28] DUVAUCHELLE, P. ; FREUD, N. ; KAFTANDJIAN, V. ; BABOT, D. : A computer code to simulate X-ray imaging techniques. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 170 (2000), Nr. 1-2, 245–258. [http://dx.doi.org/10.1016/S0168-583X\(00\)00185-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0168-583X(00)00185-3). – DOI 10.1016/S0168-583X(00)00185-3. – ISSN 0168583X
- [29] EFRON, B. : Bootstrap Methods: Another Look at the Jackknife. In: *The Annals of Statistics* 7 (1979), Nr. 1, S. 1–26. <http://dx.doi.org/10.1214/aos/1176344552>. – DOI 10.1214/aos/1176344552. – ISSN 0090-5364
- [30] EUROPÄISCHES KOMITEE FÜR NORMUNG: *Zerstörungsfreie Prüfung - Durchstrahlungsverfahren - Computertomografie - Teil 2: Grundlagen, Geräte und Proben; Deutsche Fassung*. 2011
- [31] EUSEMANN, C. ; HOLMES III, D. R. ; SCHMIDT, B. ; FLOHR, T. G. ; ROBB, R. ; MCCOLLOUGH, C. ; HOUGH, D. M. ; HUPRICH, J. E. ; WITTMER, M. ; SIDDIKI, H. ; FLETCHER, J. G.: Dual energy CT: How to best blend both energies in one fused image? In: MIGA, M. I. (Hrsg.) ; CLEARY, K. R. (Hrsg.): *Medical Imaging*, SPIE, 2008 (SPIE Proceedings), S. 691803
- [32] FELDKAMP, L. A. ; DAVIS, L. C. ; KRESS, J. W.: Practical cone-beam algorithm. In: *Journal of the Optical Society of America A* 1 (1984), Nr. 6, S. 612. <http://dx.doi.org/10.1364/JOSAA.1.000612>. – DOI 10.1364/JOSAA.1.000612. – ISSN 1084-7529
- [33] FIRSCHING, M. : *Material Reconstruction in X-ray Imaging*. Erlangen, Universität Erlangen-Nürnberg, Dissertation, 2009

- [34] FISCHER, A. ; LASSER, T. ; SCHRAPP, M. ; STEPHAN, J. ; NOËL, P. B.: Object Specific Trajectory Optimization for Industrial X-ray Computed Tomography. In: *Scientific reports* 6 (2016), S. 19135. <http://dx.doi.org/10.1038/srep19135>. – DOI 10.1038/srep19135. – ISSN 2045–2322
- [35] FRANZ, M. : *Streustrahlenkorrektur in der Computertomographie*. Erlangen, Universität Erlangen–Nürnberg, Diplomarbeit, 2003
- [36] FREUD, N. ; DUVAUCHELLE, P. ; PISTRUI-MAXIMEAN, S. A. ; LÉTANG, J.-M. ; BABOT, D. : Deterministic simulation of first-order scattering in virtual X-ray imaging. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 222 (2004), Nr. 1-2, S. 285–300. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2004.01.001>. – DOI 10.1016/j.nimb.2004.01.001. – ISSN 0168583X
- [37] FREUD, N. ; LÉTANG, J.-M. ; BABOT, D. : A hybrid approach to simulate multiple photon scattering in X-ray imaging. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 227 (2005), Nr. 4, S. 551–558. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2004.10.001>. – DOI 10.1016/j.nimb.2004.10.001. – ISSN 0168583X
- [38] FREUD, N. ; LETANG, J.-M. ; BABOT, D. : A hybrid approach to Simulate X-ray imaging techniques, combining Monte Carlo and deterministic algorithms. In: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 52 (2005), Nr. 5, S. 1329–1334. <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.2005.858223>. – DOI 10.1109/TNS.2005.858223. – ISSN 0018–9499
- [39] FUCHS, T. ; KASPERL, S. ; FRAUNHOFER IIS UND FRAUNHOFER EZRT (Hrsg.): *Grundlagen und Anwendungen der Röntgen-Computertomographie in Industrie und Technik*. 1. Auflage. 2011
- [40] GIACALONE, M. ; FRINDEL, C. ; GRENIER, E. ; ROUSSEAU, D. : Multicomponent and Longitudinal Imaging Seen as a Communication Channel—An Application to Stroke. In: *Entropy* 19 (2017), Nr. 5, S. 187. <http://dx.doi.org/10.3390/e19050187>. – DOI 10.3390/e19050187. – ISSN 1099–4300
- [41] GIERSCH, J. ; WEIDEMANN, A. ; ANTON, G. : ROSI—an object-oriented and parallel-computing Monte Carlo simulation for X-ray imaging. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 509 (2003), Nr. 1-3, S. 151–156. [http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01564-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01564-X). – DOI 10.1016/S0168–9002(03)01564–X. – ISSN 01689002

- [42] GONZÁLEZ, Á. : Measurement of Areas on a Sphere Using Fibonacci and Latitude–Longitude Lattices. In: *Mathematical Geosciences* 42 (2010), Nr. 1, S. 49–64. <http://dx.doi.org/10.1007/s11004-009-9257-x>. – DOI 10.1007/s11004-009-9257-x. – ISSN 1874–8961
- [43] GORECKI, A. ; BRAMBILLA, A. ; MOULIN, V. ; GABORIEAU, E. ; RADISSON, P. ; VERGER, L. : Comparing performances of a CdTe X-ray spectroscopic detector and an X-ray dual-energy sandwich detector. In: *Journal of Instrumentation* 8 (2013), Nr. 11, S. P11011–P11011. <http://dx.doi.org/10.1088/1748-0221/8/11/P11011>. – DOI 10.1088/1748-0221/8/11/P11011. – ISSN 1748–0221
- [44] GRODZINS, L. : Optimum energies for x-ray transmission tomography of small samples. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* 206 (1983), Nr. 3, S. 541–545. [http://dx.doi.org/10.1016/0167-5087\(83\)90393-9](http://dx.doi.org/10.1016/0167-5087(83)90393-9). – DOI 10.1016/0167-5087(83)90393-9. – ISSN 01675087
- [45] GRÖSCHEL, A. : *Untersuchung des intrinsischen Verspannungszustandes von Silizium-Wafern mit Sauerstoffpräzipitaten mittels energiedispersiver Röntgenbeugung*. Erlangen, Universität Erlangen–Nürnberg, Dissertation, 2015. <http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn:nbn:de:bvb:29-opus4-66056>
- [46] HANKE, R. ; FUCHS, T. ; FUCHS, T. O. J. ; ZABLER, S. : X-ray microtomography for materials characterization. In: HÜBSCHEN, G. (Hrsg.) ; ALTPETER, I. (Hrsg.) ; HERRMANN, H.-G. (Hrsg.): *Materials characterization using nondestructive evaluation (NDE) methods* Bd. number 88. Amsterdam and Boston and Cambridge : Elsevier/WP Woodhead Publishing, 2016. – ISBN 008100057X, S. 45
- [47] HANKE, R. ; SCHRÖPFER, S. ; GERHÄUSER, H. ; PAULUS, D. : *Verfahren und Vorrichtung zur Darstellung eines Objektes Mittels einer Durchstrahlung sowie Rekonstruktion*. 2003
- [48] HARIMA, Y. : An historical review and current status of buildup factor calculations and applications. In: *Radiation Physics and Chemistry* 41 (1993), Nr. 4-5, S. 631–672. [http://dx.doi.org/10.1016/0969-806X\(93\)90317-N](http://dx.doi.org/10.1016/0969-806X(93)90317-N). – DOI 10.1016/0969-806X(93)90317-N. – ISSN 0969806X
- [49] HENDEE, W. R. ; RITENOUR, E. R.: *Medical imaging physics*. 4th ed. Wiley-Liss <http://dx.doi.org/10.1002/0471221155>. – ISBN 9780471382263
- [50] HILLER, J. ; FUCHS, T. O. J. ; KASPERL, S. ; REINDL, L. M.: Einfluss der Bildqualität röntgentomographischer Abbildungen auf Koordinatenmessungen: Grundlagen, Messungen und Simulationen. In: *tm - Technisches Messen* 78 (2011), Nr. 7-8, S. 334–347.

- <http://dx.doi.org/10.1524/teme.2011.0137>. – DOI 10.1524/teme.2011.0137. – ISSN 0171–8096
- [51] HILLER, J. ; HORNBERGER, P. : Measurement accuracy in X-ray computed tomography metrology: Toward a systematic analysis of interference effects in tomographic imaging. In: *Precision Engineering* 45 (2016), S. 18–32. <http://dx.doi.org/10.1016/j.precisioneng.2015.12.003>. – DOI 10.1016/j.precisioneng.2015.12.003. – ISSN 01416359
- [52] HILLER, J. ; REINDL, L. M.: A computer simulation platform for the estimation of measurement uncertainties in dimensional X-ray computed tomography. In: *Measurement* 45 (2012), Nr. 8, 2166–2182. <http://dx.doi.org/10.1016/j.measurement.2012.05.030>. – DOI 10.1016/j.measurement.2012.05.030. – ISSN 02632241
- [53] HOLMES, D. R. ; FLETCHER, J. G. ; APEL, A. ; HUPRICH, J. E. ; SIDDIKI, H. ; HOUGH, D. M. ; SCHMIDT, B. ; FLOHR, T. G. ; ROBB, R. ; MCCOLLOUGH, C. ; WITTMER, M. ; EUSEMANN, C. : Evaluation of non-linear blending in dual-energy computed tomography. In: *European journal of radiology* 68 (2008), Nr. 3, S. 409–413. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ejrad.2008.09.017>. – DOI 10.1016/j.ejrad.2008.09.017. – ISSN 1872–7727
- [54] HUANG, P. H. ; KASE, K. R. ; BJARNGARD, B. E.: Reconstruction of 4-MV bremsstrahlung spectra from measured transmission data. In: *Medical physics* 10 (1983), Nr. 6, S. 778–785. <http://dx.doi.org/10.1118/1.595356>. – DOI 10.1118/1.595356. – ISSN 0094–2405
- [55] INANC, F. ; GRAY, J. : A CAD Interfaced Simulation Tool for X-Ray NDE Studies. Version:1990. http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4684-5772-8_{ }48. In: THOMPSON, D. O. (Hrsg.) ; CHIMENTI, D. E. (Hrsg.): *Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation*. Boston, MA and s.l. : Springer US, 1990 (Review of Progress in Quantitative Nondestructive Evaluation). – DOI 10.1007/978-1-4684-5772-8_48. – ISBN 978-1-4684-5774-2, S. 391–398
- [56] ISO: *Non-destructive testing - Radiation methods for computed tomography - Part 2: Principles, equipment and samples*. 2017
- [57] JUSTESEN, J. ; FORCHHAMMER, S. : *Two-dimensional information theory and coding: With application to graphics and high-density storage media*. Cambridge University Press <https://doi.org/10.1017/CB09780511840562>. – ISBN 9780521888608

- [58] KAK, A. C. (Hrsg.) ; SLANEY, M. (Hrsg.): *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001. <http://dx.doi.org/10.1137/1.9780898719277>. <http://dx.doi.org/10.1137/1.9780898719277>. – ISBN 978-0-89871-494-4
- [59] KASPERL, S. : *Qualitätsverbesserungen durch referenzfreie Artefaktreduzierung und Oberflächennormierung in der industriellen 3D-Computertomographie*. Erlangen, Universität Erlangen-Nürnberg, Dissertation, 2005
- [60] KIUNKE, M. ; STRITT, C. ; SCHIELEIN, R. ; SUKOWSKI, F. ; HÖLZING, A. ; ZABLER, S. ; HOFMANN, J. ; FLISCH, A. ; KASPERL, S. ; SENNHAEUSER, U. ; HANKE, R. : ROSI and GEANT4 – A comparison in the context of high energy X-ray physics. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 377 (2016), S. 50–58. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2016.04.029>. – DOI 10.1016/j.nimb.2016.04.029. – ISSN 0168583X
- [61] KRAMER, H. M.: The determination of X-ray spectra from attenuation data (Part II). In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* 214 (1983), Nr. 2-3, S. 445–450. [http://dx.doi.org/10.1016/0167-5087\(83\)90615-4](http://dx.doi.org/10.1016/0167-5087(83)90615-4). – DOI 10.1016/0167-5087(83)90615-4. – ISSN 01675087
- [62] KRAMER, H. M. ; SEGGERN, H. von: The determination of X-ray spectra from attenuation data (Part I). In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* 213 (1983), Nr. 2-3, S. 373–380. [http://dx.doi.org/10.1016/0167-5087\(83\)90432-5](http://dx.doi.org/10.1016/0167-5087(83)90432-5). – DOI 10.1016/0167-5087(83)90432-5. – ISSN 01675087
- [63] KRIEGER, H. : *Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes*. 3., überarb. und erw. Aufl. Vieweg + Teubner (Studium). <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-9348-2>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-9348-2>. – ISBN 978-3-8348-0801-1
- [64] KRUTH, J. P. ; BARTSCHER, M. ; CARMIGNATO, S. ; SCHMITT, R. ; CHIFFRE, L. de ; WECKENMANN, A. : Computed tomography for dimensional metrology. In: *CIRP Annals - Manufacturing Technology* 60 (2011), Nr. 2, S. 821–842. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cirp.2011.05.006>. – DOI 10.1016/j.cirp.2011.05.006. – ISSN 00078506
- [65] KUCHENBECKER, S. ; FABY, S. ; SAWALL, S. ; LELL, M. ; KACHELRIESS, M. : Dual energy CT: how well can pseudo-monochromatic imaging reduce metal artifacts? In: *Medical physics* 42 (2015), Nr. 2, S. 1023–1036. <http://dx.doi.org/10.1118/1.4905106>. – DOI 10.1118/1.4905106. – ISSN 0094-2405

- [66] KÜHNEL, G. ; GERMANISCHES NATIONALMUSEUM (Hrsg.): *Photographie "Cerveny Kornett" Inventar MI826 Gemanisches Nationalmuseum aus dem "MIMO" online Katalog*. http://194.250.19.158/MIMO/doc/IFD/OAI_GNM_DE_522685. Version: 2011, Abruf: 12.03.2017
- [67] KYRIAKOU, Y. ; LAPP, R. M. ; HILLEBRAND, L. ; ERTEL, D. ; KALENDER, W. A.: Simultaneous misalignment correction for approximate circular cone-beam computed tomography. In: *Physics in medicine and biology* 53 (2008), Nr. 22, S. 6267–6289. <http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/53/22/001>. – DOI 10.1088/0031-9155/53/22/001. – ISSN 0031-9155
- [68] KYRIAKOU, Y. ; RIEDEL, T. ; KALENDER, W. A.: Combining deterministic and Monte Carlo calculations for fast estimation of scatter intensities in CT. In: *Physics in medicine and biology* 51 (2006), Nr. 18, S. 4567–4586. <http://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/51/18/008>. – DOI 10.1088/0031-9155/51/18/008. – ISSN 0031-9155
- [69] LANGE, K. ; CARSON, R. : EM Reconstruction Algorithms for Emission and Transmission Tomography. 8 (1984), S. 306–316
- [70] LI, N. ; ZHAO, H.-X. ; CHO, S.-H. ; CHOI, J.-G. ; KIM, M.-H. : A fast algorithm for voxel-based deterministic simulation of X-ray imaging. In: *Computer Physics Communications* 178 (2008), Nr. 7, 518–523. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2007.11.008>. – DOI 10.1016/j.cpc.2007.11.008. – ISSN 0010-4655
- [71] LIECHTI, A. ; MINDER, W. : *Röntgenphysik*. Zweite, Vollständig Neubearbeitete Auflage. Springer Vienna. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-7091-7847-8>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-7091-7847-8>. – ISBN 9783709178485
- [72] LOVE, L. A. ; KRUGER, R. A.: Scatter estimation for a digital radiographic system using convolution filtering. In: *Medical physics* 14 (1987), Nr. 2, S. 178–185. <http://dx.doi.org/10.1118/1.596126>. – DOI 10.1118/1.596126. – ISSN 0094-2405
- [73] MAIER, A. : *Spektrenschätzuntersuchungen von Computertomographie-Anlagen anhand von Messdaten*. Nürnberg, Georg-Simon-Ohm-Hochschule, Bachelorarbeit, 2016
- [74] MANCIU, M. ; MANCIU, F. S. ; VULCAN, T. ; NES, E. ; WAGGENER, R. G.: Robust megavoltage x-ray spectra estimation from transmission measurements. In: *Journal of X-ray Science and Technology* 17 (2009), Nr. 1, S. 85–99. <http://dx.doi.org/10.3233/XST-2009-0214>. – DOI 10.3233/XST-2009-0214. – ISSN 0895-3996

- [75] METZNER, R. ; EGGERT, A. ; VAN DUSSCHOTEN, D. ; PFLUGFELDER, D. ; GERTH, S. ; SCHURR, U. ; UHLMANN, N. ; JAHNKE, S. : Direct comparison of MRI and X-ray CT technologies for 3D imaging of root systems in soil: potential and challenges for root trait quantification. In: *Plant methods* 11 (2015), S. 17. <http://dx.doi.org/10.1186/s13007-015-0060-z>. – DOI 10.1186/s13007-015-0060-z. – ISSN 1746-4811
- [76] OECKL, S. ; GRUBER, R. ; SCHÖN, W. ; EBERHORN, M. ; BAUSCHER, I. ; WENZEL, T. ; HANKE, R. : Process integrated inspection of motor pistons using computerized tomography. In: HEUBERGER, A. (Hrsg.) ; ELST, G. (Hrsg.) ; HANKE, R. (Hrsg.): *Microelectronic Systems*. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011. – ISBN 9783642230714, S. 271–279
- [77] OHNESORGE, B. ; FLOHR, T. ; KLINGENBECK-REGN, K. : Efficient object scatter correction algorithm for third and fourth generation CT scanners. In: *European radiology* 9 (1999), Nr. 3, S. 563–569. <http://dx.doi.org/10.1007/s003300050710>. – DOI 10.1007/s003300050710. – ISSN 0938-7994
- [78] PAGEL, L. : *Information ist Energie: Definition eines physikalisch begründeten Informationsbegriffs*. Springer Vieweg. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-2612-1>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-8348-2612-1>. – ISBN 978-3834826114
- [79] PERKINELMER INC. ; PERKINELMER INC. (Hrsg.): *Flat Panel X-ray Detectors, XRD 0822 AO, AP: Produktdatenblatt*. http://www.perkinelmer.de/images/009298B_02%20PRD_tcm137-169967.pdf. Version: 2010, Abruf: 23.03.2017
- [80] PRESS, W. H.: *Numerical recipes: The art of scientific computing*. 3. ed., this print. is corr. to software version 3.02. Cambridge : Cambridge Univ. Press, 2007. – ISBN 0521880688
- [81] REISINGER, S. : *Simulationsgestützte Aufnahmeplanung in der industriellen Computertomographie*. Bamberg, Otto-Friedrich-Universität, Masterarbeit, 2010
- [82] REITER, M. ; WEISS, D. ; GUSENBAUER, C. ; ERLER, M. ; KUHN, C. ; KASPERL, S. ; KASTNER, J. : Evaluation of a histogram-based image quality measure for X-ray computed tomography. In: *Proceedings of iCT, 2014*
- [83] RIEDER, A. : *Keine Probleme mit Inversen Problemen*. Wiesbaden : Vieweg+Teubner Verlag, 2003. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-80234-7>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-322-80234-7>. – ISBN 978-3-528-03198-5

- [84] SALVAT, F. ; FERNANDEZ-VAREA, J. M. ; SEMPAU, J. : *PENELOPE 2006: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport ; Workshop Proceedings, Barcelona, Spain, 4-7 July 2006*. Issy-les-Moulineaux, France : Nuclear Energy Agency, Organisation for Economic Co-operation and Development, 2006 (Data bank). – ISBN 9264023011
- [85] SCHIELEIN, R. ; SCHRÖPFER, S. ; KIUNKE, M. ; ZABLER, S. ; KASPERL, S. : Quantitative evaluation of CT Images by means of Shannon Entropy. In: *11th European Conference on Non-Destructive Testing (ECNDT) (2014)*. www.ndt.net/?id=16627
- [86] SCHOLZ, O. ; OECKL, S. ; KUBE, M. : High-Speed Inline Production Testing of Cast Pistons Using 3D-CT and a Digital X-Ray Detector. In: *SAE 2013 World Congress & Exhibition*, SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States, 2013 (SAE Technical Paper Series)
- [87] SCHOONJANS, T. ; BRUNETTI, A. ; GOLOSIO, B. ; SANCHEZ DEL RIO, M. ; SOLÉ, V. A. ; FERRERO, C. ; VINCZE, L. : The xraylib library for X-ray–matter interactions. Recent developments. In: *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* 66 (2011), Nr. 11-12, S. 776–784. <http://dx.doi.org/10.1016/j.sab.2011.09.011>. – DOI 10.1016/j.sab.2011.09.011. – ISSN 05848547
- [88] SEIBERT, J. A. ; BOONE, J. M.: X-ray scatter removal by deconvolution. In: *Medical physics* 15 (1988), Nr. 4, S. 567–575. <http://dx.doi.org/10.1118/1.596208>. – DOI 10.1118/1.596208. – ISSN 0094–2405
- [89] SHANNON, C. E.: A Mathematical Theory of Communication. In: *Bell System Technical Journal* 27 (1948), Nr. 3, S. 379–423. <http://dx.doi.org/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x>. – DOI 10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x. – ISSN 00058580
- [90] SHANNON, C. E. ; WEAVER WARREN: *The mathematical theory of communication*. Urbana : The university of illinois press, 1964
- [91] SIDKY, E. Y. ; YU, L. ; PAN, X. ; ZOU, Y. ; VANNIER, M. : A robust method of x-ray source spectrum estimation from transmission measurements: Demonstrated on computer simulated, scatter-free transmission data. In: *Journal of Applied Physics* 97 (2005), Nr. 12, S. 124701. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1928312>. – DOI 10.1063/1.1928312. – ISSN 0021–8979
- [92] SIEWERDSEN, J. H. ; JAFFRAY, D. A.: Cone-beam computed tomography with a flat-panel imager: magnitude and effects of x-ray scatter. In: *Medical physics*

- 28 (2001), Nr. 2, S. 220–231. <http://dx.doi.org/10.1118/1.1339879>. – DOI 10.1118/1.1339879. – ISSN 0094–2405
- [93] SILBERSTEIN, L. : Determination of the Spectral Composition of X-ray Radiation from Filtration Data*. In: *Journal of the Optical Society of America* 22 (1932), Nr. 5, S. 265. <http://dx.doi.org/10.1364/JOSA.22.000265>. – DOI 10.1364/JOSA.22.000265. – ISSN 0030–3941
- [94] STRITT, C. : *Assessment and Correction of Image Degradation in MeV Cone Beam Computed Tomography*. Zürich, ETH Zürich, Dissertation, 2017
- [95] STRITT, C. : *Setup der Monte Carlo Simulationen: Persönliche Nachricht*. 2017
- [96] STRITT, C. ; SCHUETZ, P. ; PLAMONDON, M. ; FLISCH, A. ; HOFMANN, J. ; SENNHAUSER, U. : Quantitative Untersuchung der Streubeiträge in Hochenergie-Röntgencomputertomografie. In: *Materials Testing* 58 (2016), Nr. 2, S. 122–126. <http://dx.doi.org/10.3139/120.110824>. – DOI 10.3139/120.110824. – ISSN 0025–5300
- [97] THOMPSON, A. (Hrsg.): *X-Ray Data Booklet*. Third edition. Berkeley, California : Lawrence Berkeley National Laboratory, 2009
- [98] TUCKER, D. M. ; BARNES, G. T. ; CHAKRABORTY, D. P.: Semiempirical model for generating tungsten target x-ray spectra. In: *Medical physics* 18 (1991), Nr. 2, 211–218. <http://scitation.aip.org/content/aapm/journal/medphys/18/2/10.1118/1.596709>. – ISSN 0094–2405
- [99] UHLMANN, J. K.: Satisfying general proximity / similarity queries with metric trees. In: *Information Processing Letters* 40 (1991), Nr. 4, S. 175–179. [http://dx.doi.org/10.1016/0020-0190\(91\)90074-R](http://dx.doi.org/10.1016/0020-0190(91)90074-R). – DOI 10.1016/0020-0190(91)90074-R. – ISSN 00200190
- [100] VEREIN DEUTSCHER INGENEURE: *Genauigkeit von Koordinatenmessgeräten Kenngrößen und deren Prüfung; Computertomografie in der dimensionellen Messtechnik*. 2011
- [101] VIDAL, F. P. ; LÉTANG, J. M. ; PEIX, G. ; CLOETENS, P. : Investigation of artefact sources in synchrotron microtomography via virtual X-ray imaging. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 234 (2005), Nr. 3, S. 333–348. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2005.02.003>. – DOI 10.1016/j.nimb.2005.02.003. – ISSN 0168583X

- [102] WAGGENER, R. G. ; BLOUGH, M. M. ; TERRY, J. A. ; CHEN, D. ; LEE, N. E. ; ZHANG, S. ; MCDAVID, W. D.: X-ray spectra estimation using attenuation measurements from 25 kVp to 18 MV. In: *Medical physics* 26 (1999), Nr. 7, S. 1269–1278. <http://dx.doi.org/10.1118/1.598622>. – DOI 10.1118/1.598622. – ISSN 0094–2405
- [103] WENIG, P. ; KASPERL, S. : Examination of the measurement uncertainty on dimensional measurements by X-ray computed tomography. In: *Proceedings of 9th European Conference on NDT, Berlin, Germany* (2006)
- [104] WICKLEIN, J. ; KUNZE, H. ; KALENDER, W. A. ; KYRIAKOU, Y. : Image features for misalignment correction in medical flat-detector CT. In: *Medical physics* 39 (2012), Nr. 8, S. 4918–4931. <http://dx.doi.org/10.1118/1.4736532>. – DOI 10.1118/1.4736532. – ISSN 0094–2405
- [105] XING, Y. ; ZHANG, L. ; DUAN, X. ; CHENG, J. ; CHEN, Z. : A Reconstruction Method for Dual High-Energy CT With MeV X-Rays. In: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 58 (2011), Nr. 2, S. 537–546. <http://dx.doi.org/10.1109/TNS.2011.2112779>. – DOI 10.1109/TNS.2011.2112779. – ISSN 0018–9499
- [106] YXLON INTERNATIONAL GMBH: *Mikrofokus-Röntgensysteme: Produktdatenblatt*. <http://www.yxlon.de/Resources/Products/X-ray-tubes-and-generators/Y-FXE-Product-sheet-02-ger-rz-A4-LR-de.pdf>. Version: 2017, Abruf: 30.06.2017
- [107] ZABLER, S. : *X-ray imaging by partially coherent synchrotron light: Application to metallic alloys, tooth dentin and natural rock*. Berlin, TU Berlin, Dissertation, 2007
- [108] ZHANG, G. ; CHENG, J. ; ZHANG, L. ; CHEN, Z. ; XING, Y. : A practical reconstruction method for dual energy computed tomography. In: *Journal of X-ray Science and Technology* 16 (2008), Nr. 2, 67–88. <http://content.iospress.com/articles/journal-of-x-ray-science-and-technology/xst00193>. – ISSN 0895–3996

Abbildungsverzeichnis

1.1	Variabilität der Anforderungen in der industriellen CT	6
2.1	Schematischer Aufbau Röntgenröhre	11
2.2	Energieabhängigkeit des Massenschwächungskoeffizienten	14
2.3	Differenzieller Wirkungsquerschnitt Comptoneffekt	17
2.4	Streuwahrscheinlichkeit für zwei aneinander gereihete Streueignisse	20
2.5	Aufbau einer CT-Anlage	22
2.6	Detektorantwortfunktion energieintegrierender Detektoren	24
3.1	Definition eines Tomogramms	39
3.2	Übersicht relevanter CT-Parameter	42
3.3	Flussdiagramm Optimierungsmethode	50
3.4	CT eines Kornettes	53
3.5	Klarinettenphantom und simulierte CT-Aufnahme	55
4.1	Graph der Singulärwerte einer SSP-Matrix	65
4.2	Signifikanz Transmissionsmessungen für das SSP	70
4.3	Signifikanz von Multimaterial Transmissionsmessungen für das SSP	71
4.4	Konvergenzverhalten EM-Verfahrens bei verschiedenen Initialspektren	74
4.5	Aufhärtung von Röntgenspektren	76
4.6	Experimentelle validierung EM-Verfahrens	77
4.7	MC-Simulation Stufenkeil-Transmissionsmessung	79
4.8	Spektrenschätzung und Fehler bei verschiedener Photonenzählweise	82
4.9	Transmissionsmessungen mit Röntgenkamera	84
4.10	Experimentelle Spektrenschätzung	85
4.11	Residuum der experimentellen Spektrenschätzung	86
4.12	Kalibrierte Simulation Lochplatte	88
4.13	Kalibrierte Simulation PVC-Objekt	91
5.1	Prinzipskizze deterministisches Streumodell	94
5.2	Fibonacci Abtastung der Kugel	102

5.3	Schematische Darstellung Objekt und Streuzentren	103
5.4	Schematische Darstellung zum Modell für Streustrahlung zweiter Ordnung . .	108
5.5	Testkörper „Al-Fe-Kugel“	119
5.6	Streuprojektionen Al-Fe-Kugel	121
5.7	Comptonstreuprojektionen Al-Fe-Kugel	122
5.8	Rayleighstreuprojektionen Al-Fe-Kugel	123
5.9	Einfluss Streustrahlung auf Rekonstruktionsergebnis	125
5.10	Testkörper „Hochenergie Stufenzylinder“	127
5.11	Analytisch simulierte Streuprojektionen Stufenzylinder	127
5.12	MC Streuprojektionen Al-Fe-Kugel	129
5.13	Vergleich Linienprofile für MC und analytische Simulation	130
5.14	Vergleich Linienprofile MC und analytische Simulation	131
5.15	MC-simulierte Streuprojektionen Stufenzylinder	133
5.16	Vergleich Linienprofile MC und analytische Simulation Stufenzylinder	133
5.17	Vergleich Linienprofile MC und analytische Simulation Stufenzylinder	134
5.18	Konvergenz des Streumodells	136
5.19	Fehlerkorrektur bei der Berechnung der Primärintensität	138
5.20	Streusimulation zweiter Ordnung mit Korrektur der Transmissionslängen .	140
5.21	Abtastgenauigkeit des Wirkungsquerschnitts durch die Streukegel	141
5.22	Szintillatoreffizienz und Energieübertrag der Comptonstreuung	143
6.1	Sender-Empfänger-Modell	148
6.2	Entropiediagramm CT-Messung	155
6.3	Entropie in Abhängigkeit der variierten CT-Parameter. Die Farbcodierung stellt den jeweils anderen Parameter dar.	168
6.4	Shannon-Entropie im Vergleich mit SNR	169
6.5	Shannon-Entropie verglichen mit der Totalen Variation und der mittleren Absolutdifferenz	170
6.6	Vergleich verschiedener Entropiemaße	171
7.1	Shannon-Entropie als Funktion der Objektpositionierung	174
7.2	Vergleich der Tomogramme des Kometts nach Positionsoptimierung	176
7.3	Ein Spektrum Optimierung Klarinettenphantom	179
7.4	Optimierung zwei Spektrentomogramm	182
7.5	Optimales Zweispektrentomogramm für das Klarinettenphantom	183
7.6	Mehrenergiemessung Klarinette	186
B.1	Differenzieller Wirkungsquerschnitt Rayleigheffekt	217

B.2	Wirungsquerschnitt für zweifache Streuung	218
B.3	Zeichnung Lochplatte	218
B.4	Transmissionsmessungen mit Röntgenkamera	219
B.5	Signifikanz Transmissionsmessungen für das SSP	219
B.6	Signifikanz von Multimaterial Transmissionsmessungen für das SSP	220
B.7	Signifikanz Transmissionsmessungen für das SSP	220
B.8	Signifikanz von Multimaterial Transmissionsmessungen für das SSP	221
B.9	MC-Simulation Stufenkeil-Transmissionsmessung	221
B.10	Vergleich Linenprofile MC und analytische Simulation	224
B.11	Vergleich Linenprofile MC und analytische Simulation	225
B.12	Röntgenspektrum 6 MeV	226
B.13	Kegelöffnungswinkel als Funktion der Kegelanzahl	226
B.14	Shannon-Entropie verglichen mit der Totalen Variation und der mittleren Absolutdifferenz	227
B.15	Vergleich Shannon-Entropie und andere Signalgütemaße	228

Tabellenverzeichnis

1.1	Liste relevanter industrieller Objekte für die CT	5
4.1	Experimentell validierte Spektrenschätzungen	76
4.2	Auswertung kalibrierte Simulation des Lochplattenphantoms	89
5.1	Quantitativer Vergleich MC und analytische Simulation	132
6.1	Korrelationskoeffizienten Gütemaße	172
B.1	Zusammensetzung der Aluminiumlegierung „EN-AW-1050A“	222
B.2	Zusammensetzung des Stahls „X5CrNi1810“	222
B.3	Geometriedefinition Stufenkeile	222
B.4	Geometriedefinition Stufenzylinder	223
B.5	MC-Simulation Liste der modellierten Effekte	223

Liste der verwendeten Symbole

Symbol	Beschreibung	typische Einheit
A	Fläche eines Pixels o.Ä	m^2
α_Z	Massenanteil des Elements Z	
D	mittlere Absolutdifferenz zweier Tomogramme	cm^{-1}
E	Energie bzw. Energie der Röntgenphotonen	keV
H	Entropie	Bit
I	Transinformation (nur Kap. 6)	Bit
I	Röntgenintensität	keV
$M(E)$	Strahlsumme	
μ	linearer Absorptionskoeffizient	cm^{-1}
n	Anzahldichte	m^{-3}
N_S	Anzahl der Streuzentren eines Objektes.	
Ω	Raumwinkel	sr
π	Kreiszahl	
$R(E)$	Detektorantwortspektrum	
ρ	Massendichte	kg m^{-3}
$S(E)$	Röntgenquellspektrum	
T	Transmission $T = \exp(-M)$	
$\omega_{1/2}$	Streuwinkel erster bzw. zweiter Ordnung	Grad

Liste verwendeter Abkürzungen

- CT** Röntgencomputertomographie
- SSP** Spektrenschätzproblem
- TBC** Tucker Barnes Spektren-Modell
- ML** Maximum-Likelihood
- EM** Expectation-Maximization
- CNR** Kontrast-zu-Rausch-Verhältnis
- SNR** Signal-zu-Rausch-Verhältnis
- FFT** fast Fourier transform
- FBP** gefilterte Rückprojektion
- ART** algebraische Rekonstruktion
- SART** simultane algebraische Rekonstruktion (ART)
- Gadox** Gadolinium Oxysulfid
- CsI** Caesiumiodid
- CdWO₄** Cadmiumwolframat
- POM** Polyoxymethylen
- PVC** Polyvinylchlorid
- MC** Monte-Carlo
- FFD** fixed forced detection
- C** Comptoneffekt
- R** Rayleigheffekt
- CC** Doppelter Comptoneffekt
- RR** Doppelter Rayleigheffekt
- CR** Comptoneffekt mit anschließendem Rayleigheffekt
- RC** Rayleigheffekt mit anschließendem Comptoneffekt
- LBSA** Längenbasierte Streuapproximation
- LINAC** Linearbeschleuniger
- SE** Shannon-Entropie
- CAD** computer-aided design

A. Codeausschnitte

A.1. Python Code: Fibonacci-Gitter

```
def ConstructFibonacciSphereGrid(Npoints):
    '''generates pairs of latitude and longitude angles
    for uniform unitsphere sampling
    parameters:
    -----
        :Npoints: must be an odd integer number
    returns:
    -----
        np array (Npoints,2) with latitude and longitude in radian
    see:
    ----
    González, Álvaro (2010): Measurement of Areas on a Sphere Using
    Fibonacci and Latitude{Longitude Lattices. In: Math Geosci 42 (1)
    '''
    #is Npoints odd?
    if Npoints%2 == 0 and np.isscalar(Npoints):
        raise ValueError('ConstructFibonacciSphereGrid:\
                           Npoints must be odd and integer.')

    g = 1.61803398875 #the golden number

    ret = np.zeros((Npoints,2))
    for i in xrange(-(Npoints//2),(Npoints//2)+1):
        ret[i,0] = (np.arcsin(2*float(i)/(2*(Npoints//2)+1)))+np.pi/2. #lat
        ret[i,1] = 2.*np.pi/g*np.mod(i,g) #lon
    return ret
```


B. Ergänzende Abbildungen und Tabellen

B.1. Zu Kapitel 2

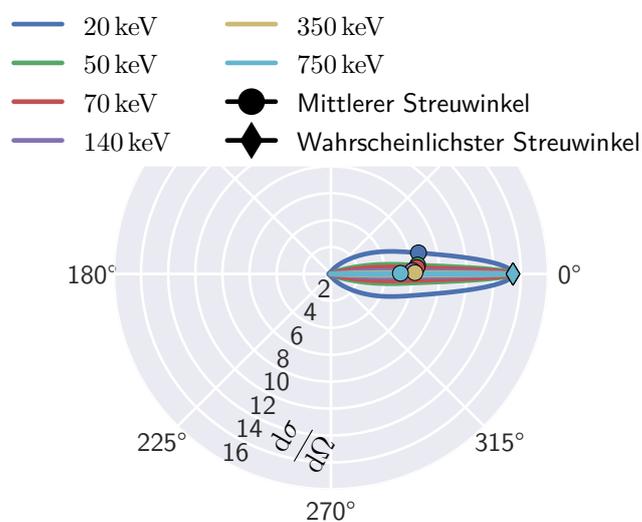


Abb. B.1.: Abbildung für den differentiellen Wirkungsquerschnitt der Rayleighstreuung analog zu Abb. 2.3.

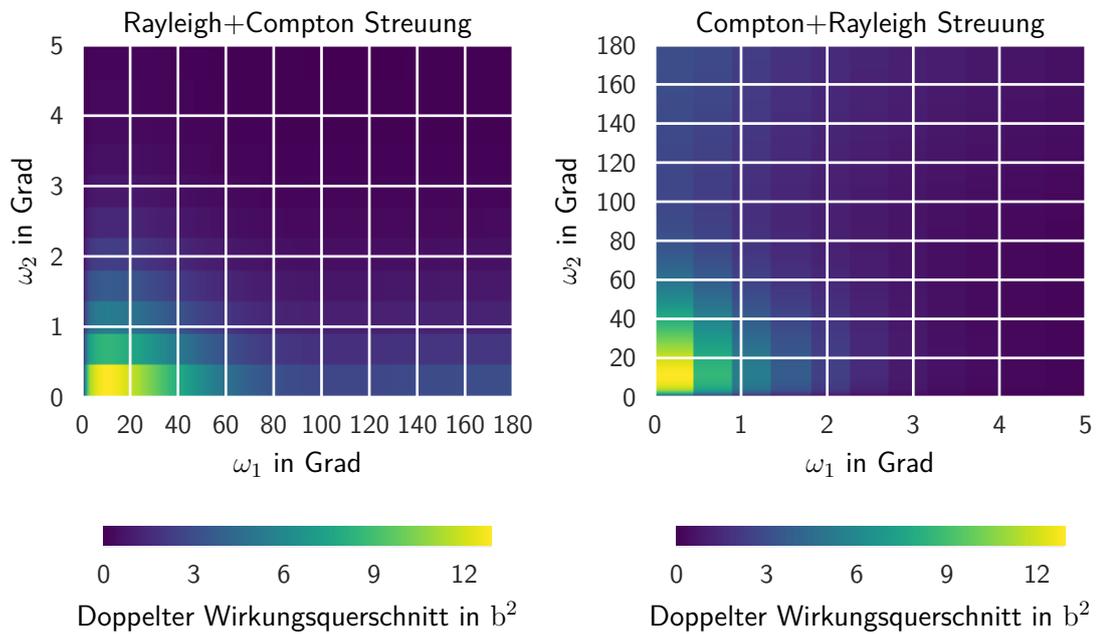


Abb. B.2.: Abbildung für den differentiellen Wirkungsquerschnitt zweimaliger Streuung für die Abfolge Rayleigheffekt-Comptoneffekt und umgekehrt.

B.2. Zu Kapitel 4

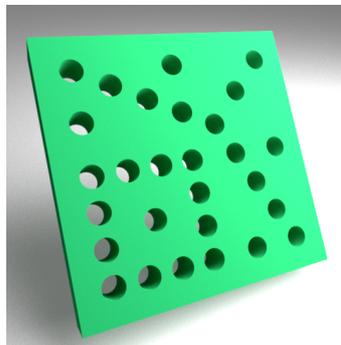


Abb. B.3.: Diese Lochplatte wurde von in Ref. [7] als Standard-Kalibrierphantom für das dimensionelle Messen an CT-Anlagen vorgeschlagen.

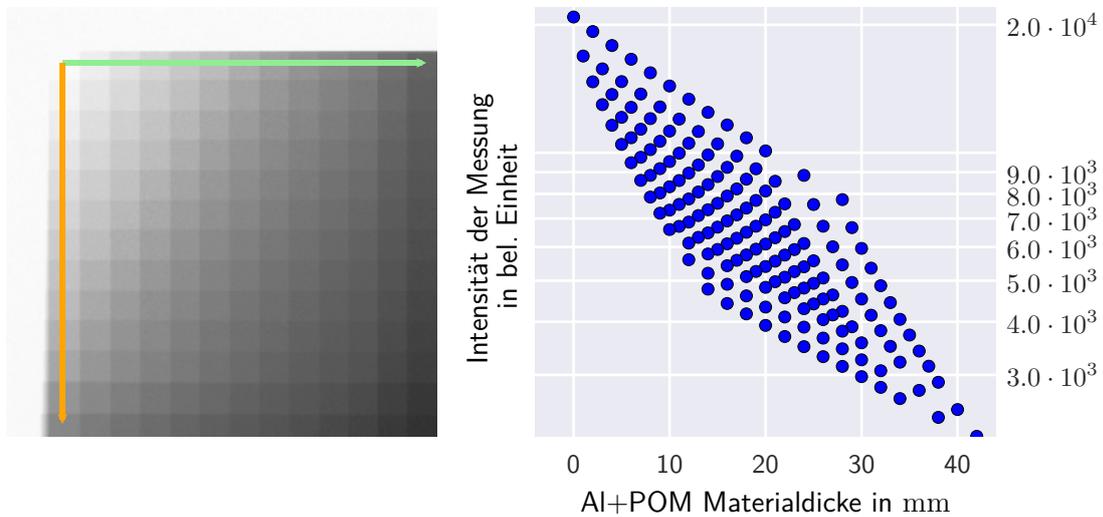


Abb. B.4.: Diese Abbildung entspricht Abb. 4.9 für den Fall eines mit einem 0,30 mm Cu-Filter aufgehärteten Spektrums.

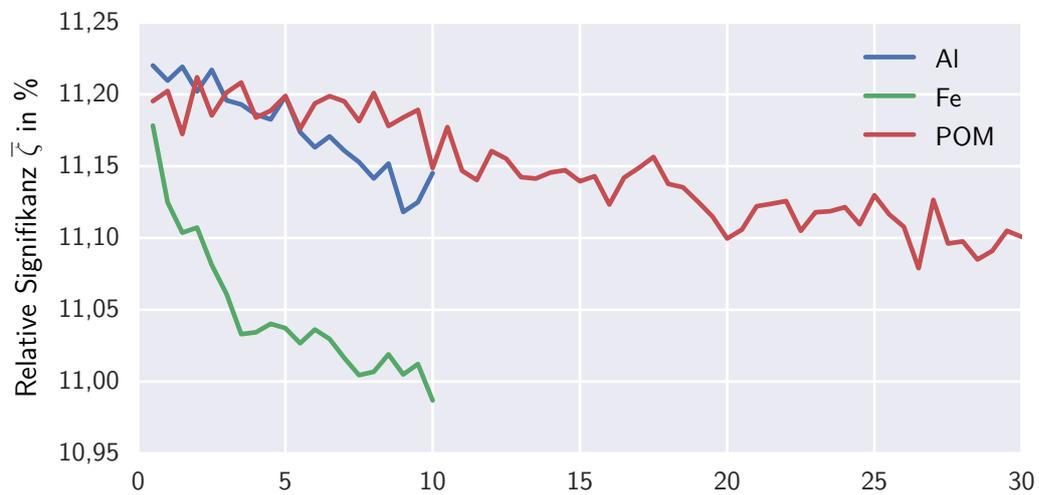


Abb. B.5.: Diese zeigt, analog zu Abb. 4.2, $\bar{\zeta}$ für eine Spektrenschatzung mit 100 keV Maximalenergie.

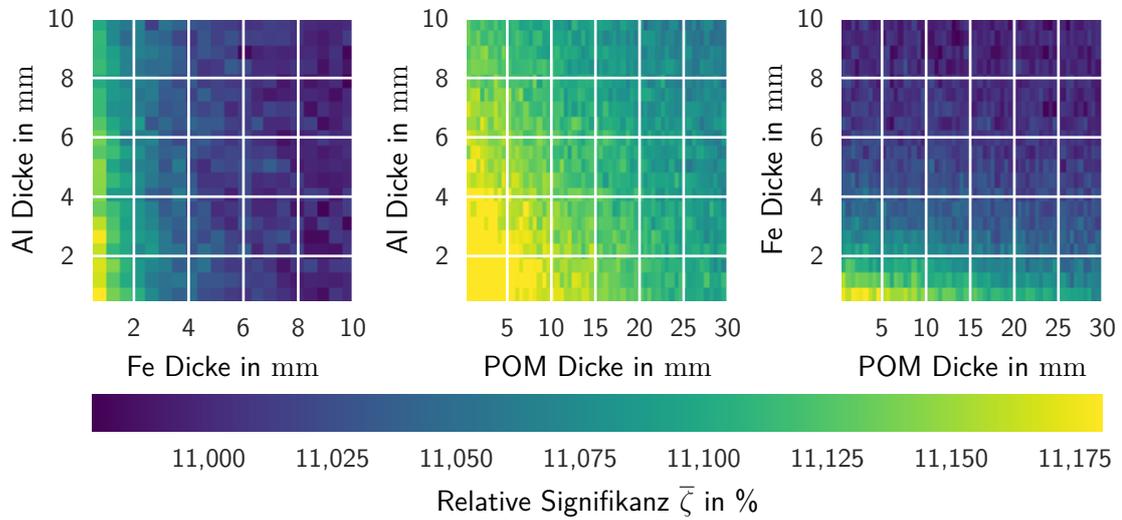


Abb. B.6.: Diese zeigt, analog zu Abb. 4.3, $\bar{\zeta}$ für eine Spektrenschtätzung mit 100 keV Maximalenergie.

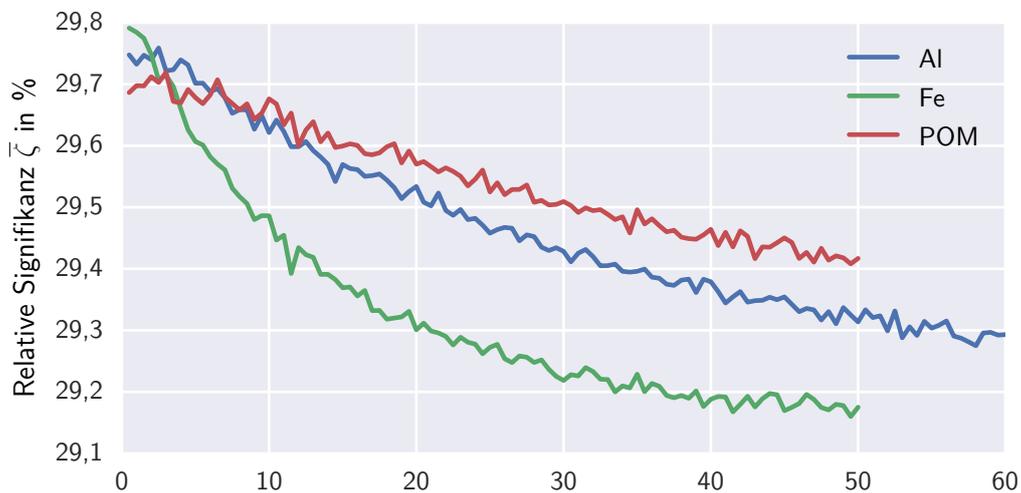


Abb. B.7.: Diese zeigt, analog zu Abb. 4.2, $\bar{\zeta}$ für eine Spektrenschtätzung mit 700 keV Maximalenergie.

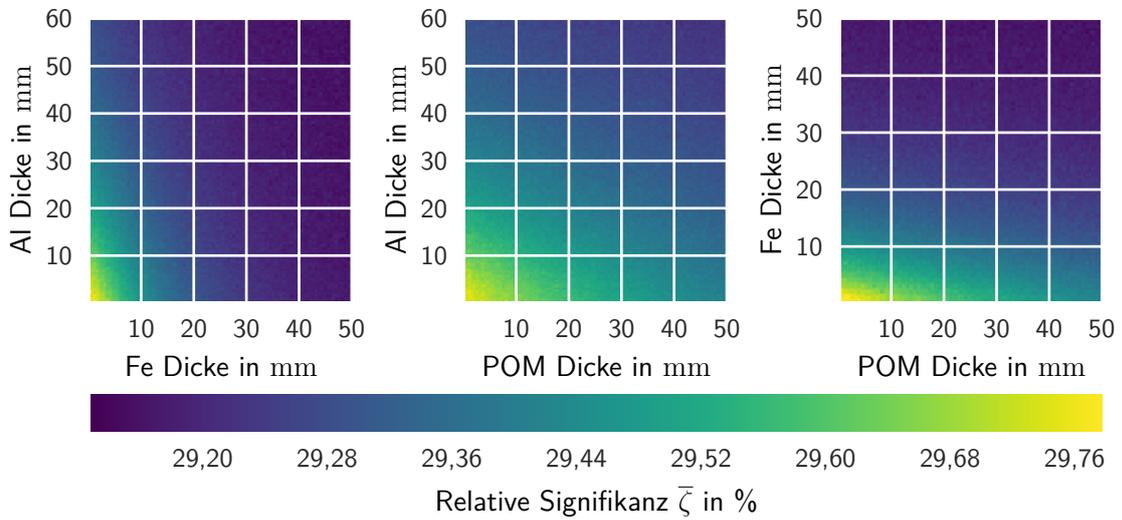


Abb. B.8.: Diese zeigt, analog zu Abb. 4.3, $\bar{\zeta}$ für eine Spektrenschätzung mit 700 keV Maximalenergie.

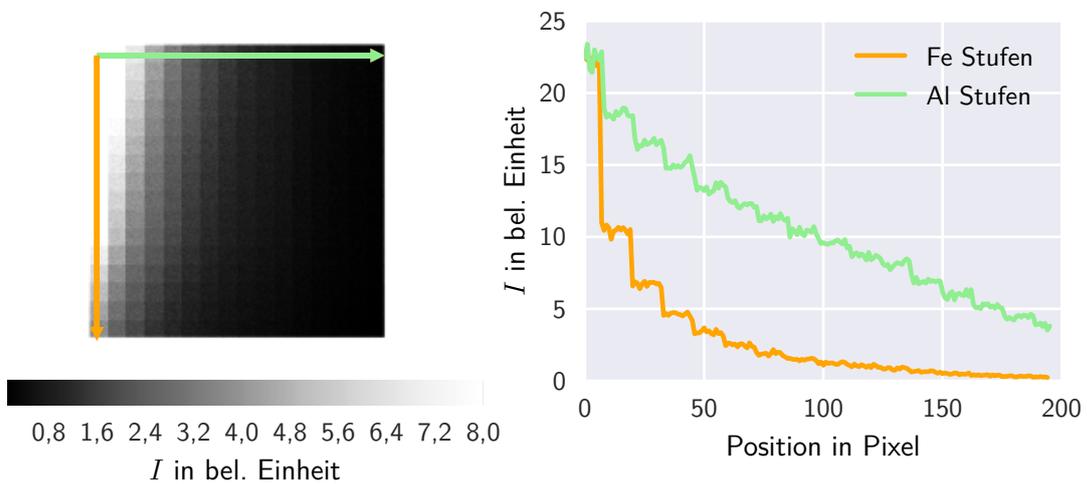


Abb. B.9.: Die Abbildung zeigt das Ergebnis der MC-Simulationen für den Fall eines CsI-Szintillators. Vergleiche dazu Abb. 4.7

Tabellen zur Definition der Stufenkeile

Die folgenden drei Tabellen (B.1, B.2, B.3) sind Ref. [6] entnommen. Sie beinhalten die Materialzusammensetzung der in Kap. 4 verwendeten Al- und Fe-Legierungen sowie eine Liste der Stufendicken der drei verwendeten Stufenkeile.

Tab. B.1.: Zusammensetzung der Aluminiumlegierung „EN-AW-1050A“

Element	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Zn	Ti	Al
Massenanteil in %	0.25	0.4	0.05	0.05	0.05	0.07	0.05	99.08
Massenzahl A	28	56	64	55	24	65	48	27

Tab. B.2.: Zusammensetzung des Stahls „X5CrNi1810“

Element	C	Cr	Ni	Si	Mn	P	S	N	Fe
Massenanteil in %	0.007	19.500	10.500	1.000	2.000	0.045	0.002	0.110	66.836
Massenzahl A	12	52	59	28	55	31	32	14	56

Tab. B.3.: Dicken der Stufen der verwendeten Keile in mm.

Material # Stufe	Stahl	Aluminium	POM
1	0.5	1.0	2.0
2	1.0	2.0	4.0
3	1.5	3.0	6.0
4	2.0	4.0	8.0
5	2.5	5.0	10.0
6	3.0	6.0	12.0
7	3.5	7.0	14.0
8	4.0	8.0	16.0
9	4.5	9.0	18.0
10	5.0	10.0	20.0
11	6.0	12.0	24.0
12	7.0	14.0	28.0
13	8.0	16.0	32.0
14	9.0	18.0	36.0
15	10.0	20.0	40.0

B.3. Zu Kapitel 5

Tab. B.4.: Radien der Stufen des Stufencylinders aus Abb. 5.10. Der Wahl des Stufenzylinders ist Ref. [96] entnommen. Die zentrale Bohrung hat einen Radius von 10 mm.

# Stufe	Radius in mm
1	20
2	30
3	40
4	50
5	60
6	80
7	100
8	110

Tab. B.5.: Liste der modellierten Effekte für die MC-Simulationen. Zusätzlich sind die Bibliotheken, welche die Streu- und Absorptionsquerschnitte enthalten gelistet. Die Informationen stammen von C. Stritt [94].

Teilchen	Prozess	Bibliothek
Photonen	Photoelektrischer Effekt	G4PenelopePhotoElectricModel
	Comptonstreuung	G4PenelopeComptonMode
	Rayleighstreuung	G4PenelopeRayleighModel
Elektronen	Ionisation	G4PenelopeIonisationModel G4UniversalFluctuation
	Bremsstrahlung	G4PenelopeBremsstrahlungModel

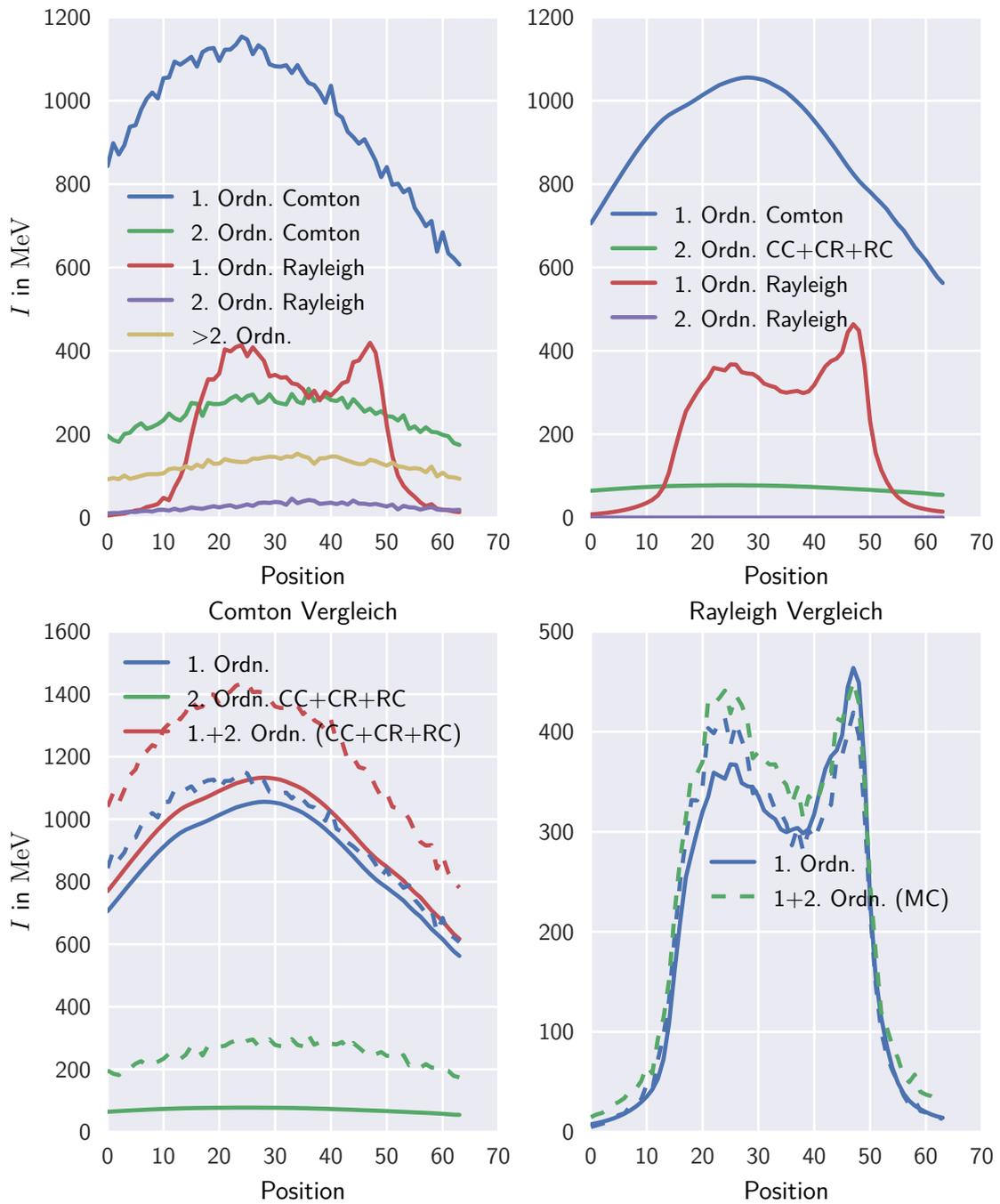


Abb. B.10.: Vergleich der Linienprofile MC und analytische Simulation für das Al-Fe-Kugelphantom. Hier nach Drehung der Kugel um 45° .

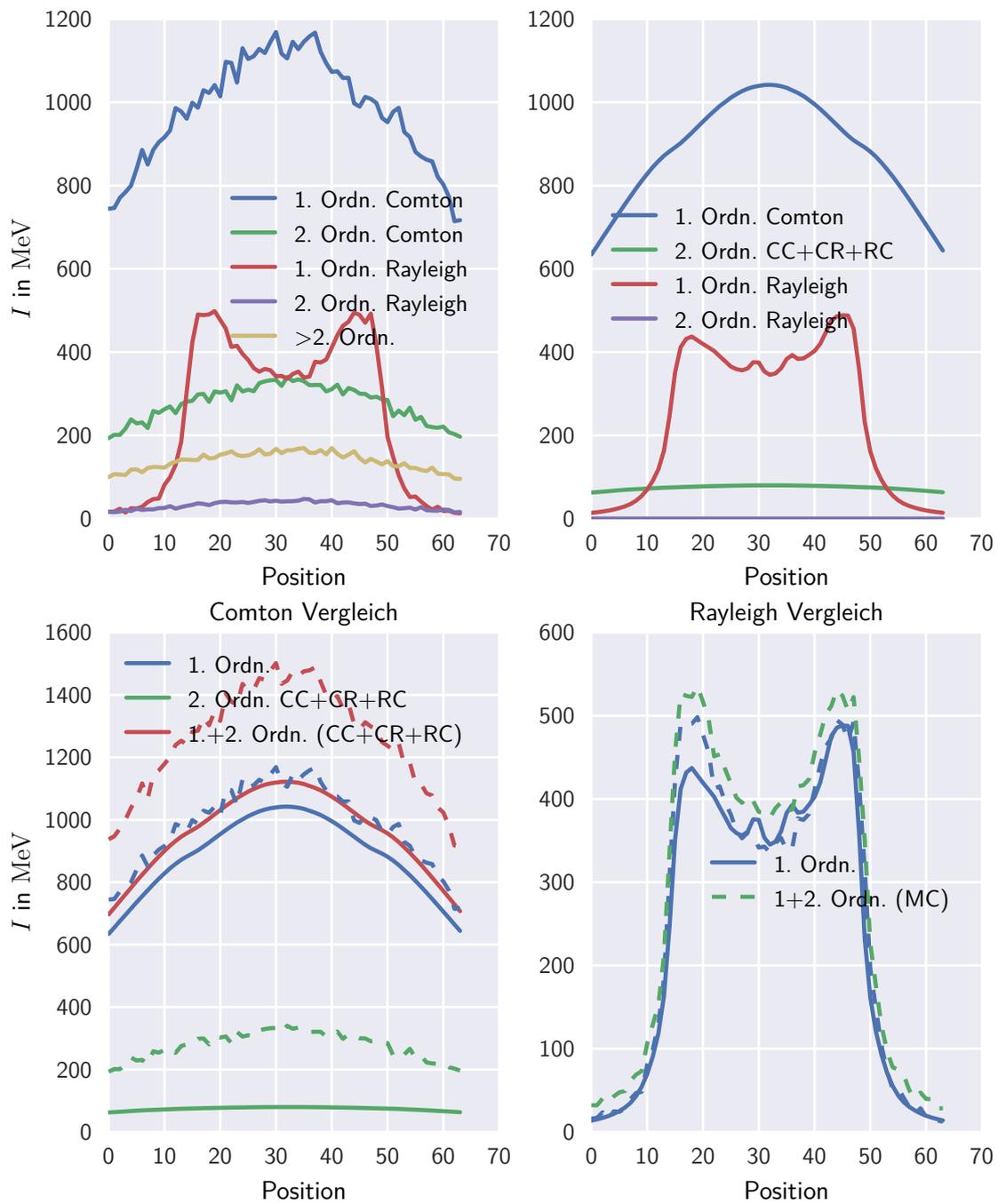


Abb. B.11.: Vergleich der Linienprofile MC und analytische Simulation für das Al-Fe-Kugelphantom. Hier nach Drehung der Kugel um 90° .

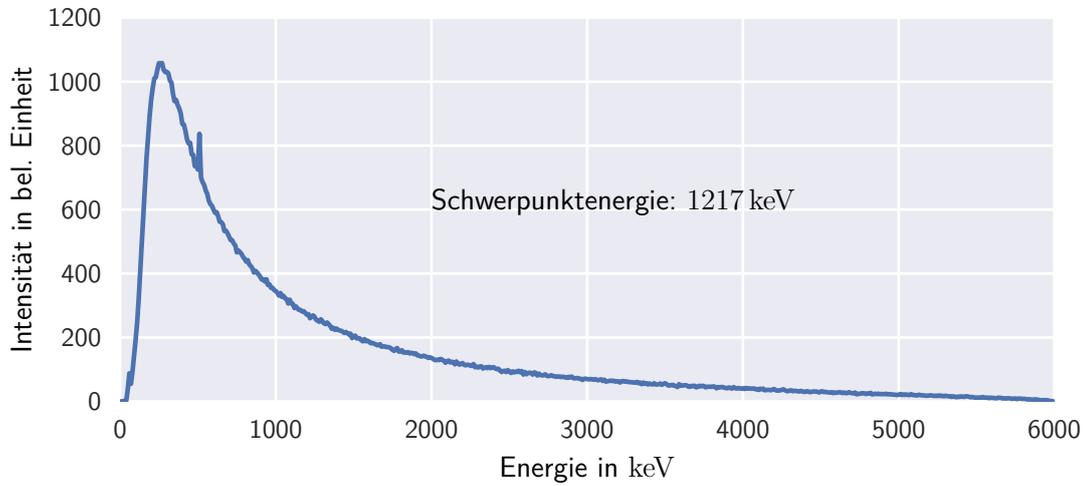


Abb. B.12.: 6 MeV Röntgenspektrum einer Linearbeschleunigerbasierten Röntgenquelle mit Transmissionstarget. Dieses Spektrum ist für die Simulation der Streuprojektionen des Stufenzylinders in Kapitel 5.6 verwendet worden.

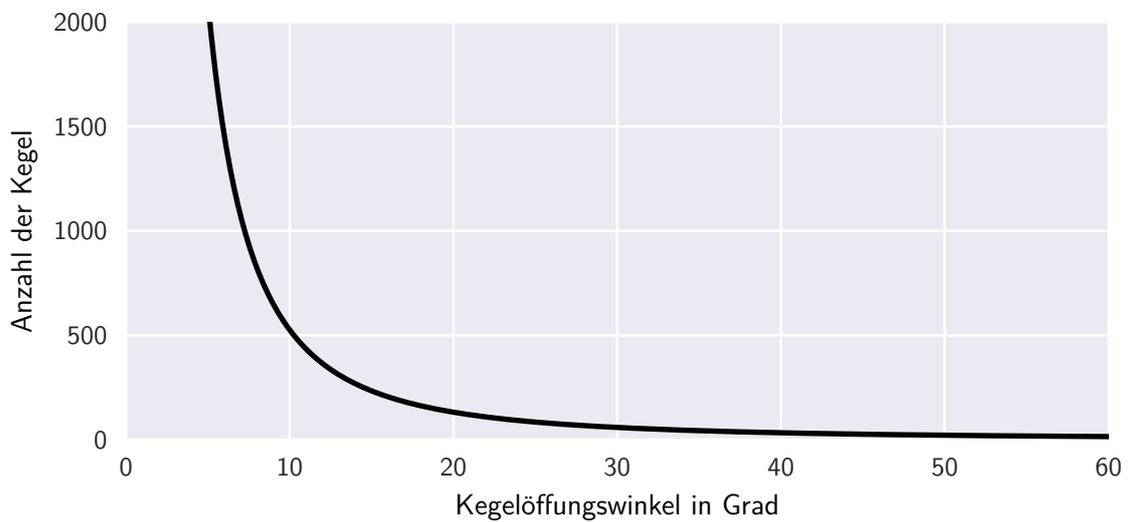


Abb. B.13.: Dargestellt ist der ebene Kegelöffnungswinkel als Funktion der Kegelanzahl für die Streukegel.

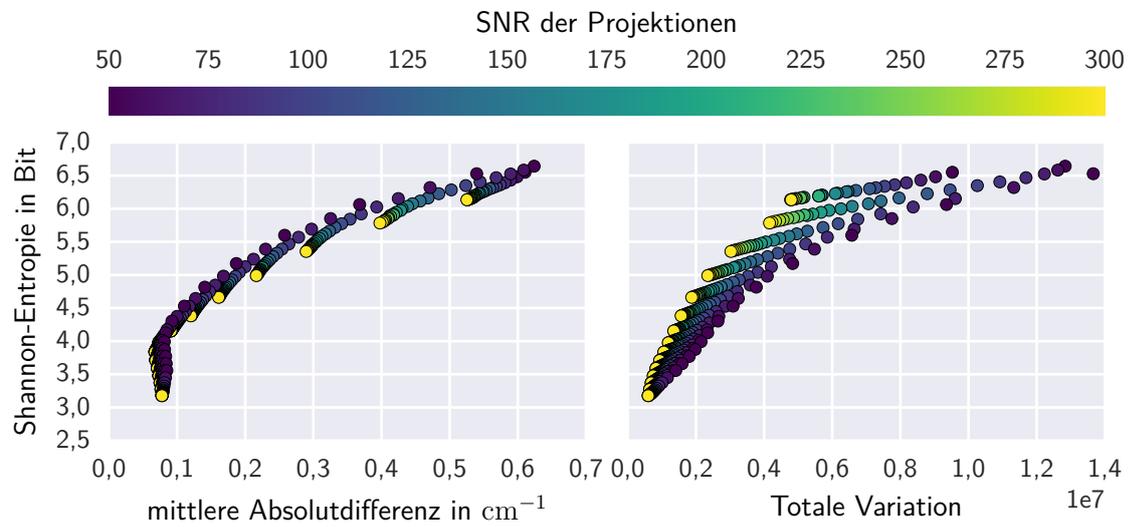
B.4. Zu Kapitel 6

Abb. B.14.: Entropie im Vergleich mit der mittleren Abweichung zwischen Ergebnis und dem idealen Tomogramm (links) und Entropie im Vergleich mit der totalen Variation. Die Farbcodierung gibt jeweils das SNR der Projektionen an.

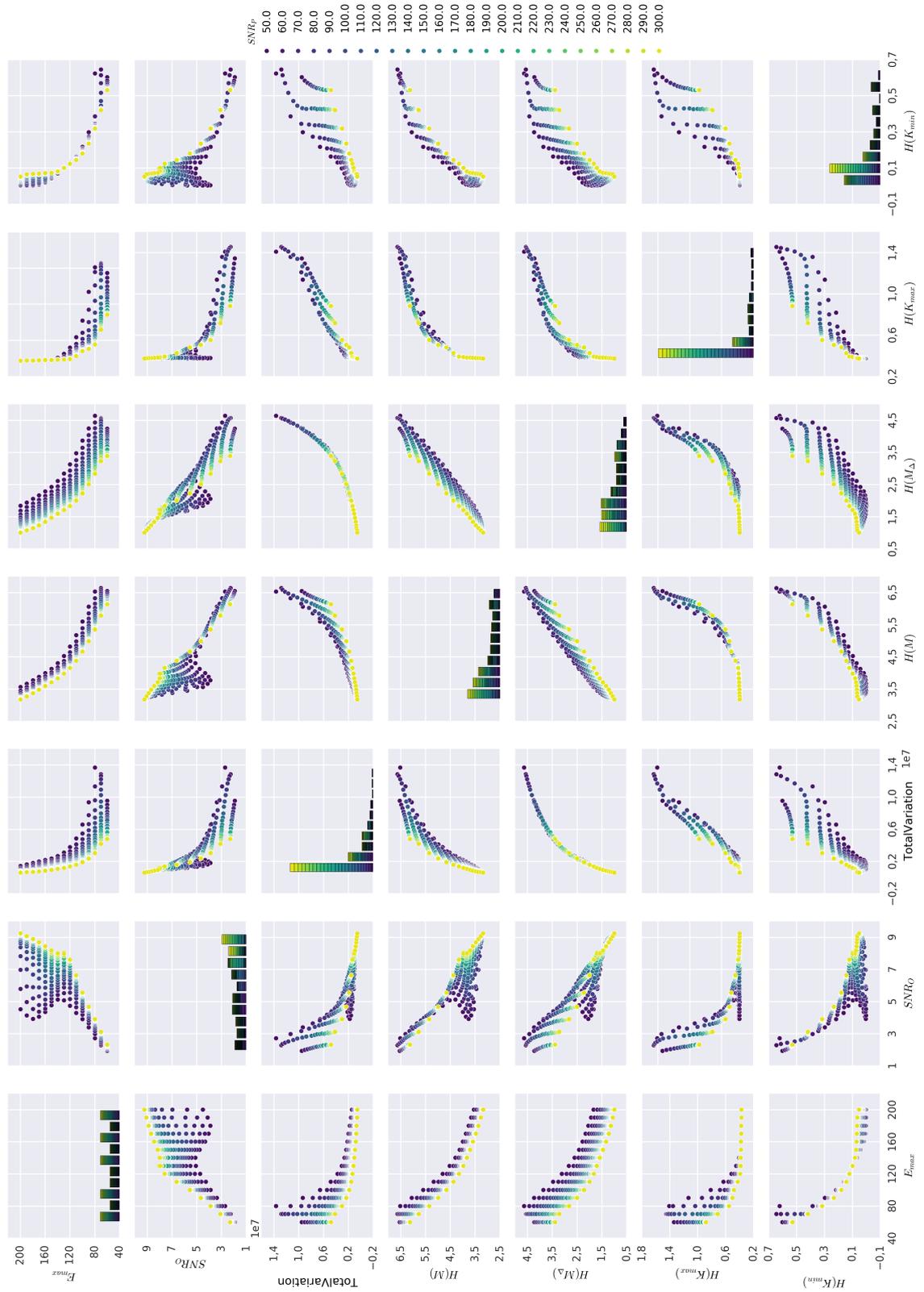


Abb. B.15.: Vergleich verschiedener entropiebasierter Gütemaße mit Signalgütemaßen.