



FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK UND NATURWISSENSCHAFTEN
BERGISCHE UNIVERSITÄT WUPPERTAL

Materialselektive CT-Bildgebung mittels Röntgendiffraktometrie

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

vorgelegte

Dissertation

von **Dipl.-Phys. Simon Schlesinger**

in der Fakultät 4,
Mathematik und Naturwissenschaften,
an der Bergischen Universität Wuppertal

Eingereicht am 22.12.2017

Referenten

Prof. Dr. rer. nat. Hartwin Bomsdorf

Prof. Dr. rer. nat. Uwe Pietrzyk

Wuppertal
2017

Die Dissertation kann wie folgt zitiert werden:

urn:nbn:de:hbz:468-20180405-154000-7

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn%3Anbn%3Ade%3Ahbz%3A468-20180405-154000-7>]

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	iv
Symbolverzeichnis	vii
Abbildungsverzeichnis	xi
1. Einleitung	1
2. Stand von Wissenschaft und Technik	5
2.1. Physikalische Grundlagen	5
2.1.1. Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie	5
2.1.2. Energiedispersive Röntgenbeugung	8
2.2. Röntgenstrebildgebung	13
2.2.1. Direkte Verfahren	14
2.2.2. Computertomographische Ansätze	16
2.2.3. Coded Aperture	18
2.3. Computertomographie	19
2.3.1. Radon-Transformation	20
2.3.2. Rekonstruktion	21
2.3.3. Kegelstrahl-Geometrie	25
3. Simulation	27
3.1. Einführung	27
3.1.1. Anforderungen	27
3.1.2. Gängige Simulationsverfahren	28
3.1.3. Simulationsansatz der Arbeit	29
3.2. Simulationsroutine	33
3.2.1. GATE	34
3.2.2. Primärstrahl	35
3.2.3. Streuung	37
3.2.4. Preprocessing	39
3.2.5. Scans	40
3.2.6. Schwächung	41
3.3. Ergebnisse	42
3.3.1. Validierung	42
3.3.2. Optimierung der Kollimatorgeometrie	47
4. Rekonstruktion	55
4.1. Einleitung	55
4.1.1. Kegelstrahl CT (CBCT)	57

4.1.2.	Kohärentes Streu-CT (CSCT)	57
4.2.	Mathematische Grundlagen der Rekonstruktion	59
4.2.1.	Compressed-Sensing	60
4.2.2.	Sparse-Coding	62
4.2.3.	K-SVD Dictionary-Learning	65
4.2.4.	Rekonstruktionsalgorithmen	66
4.3.	CSCT-Rekonstruktionsalgorithmus	70
4.3.1.	Dictionary Learning	71
4.3.2.	Präprozess	73
4.3.3.	Generierung der Radonmatrix	75
4.3.4.	EDXRD-Scan („CBCT-Schätzer“)	77
4.3.5.	CSCT-Rekonstruktionsprozedur	79
4.3.6.	Overlay	81
4.4.	Untersuchung zur Rekonstruktionsperformance	82
4.4.1.	Generierung künstlicher Daten	82
4.4.2.	Studie zur Rekonstruktionsperformance	85
4.4.3.	Parameterwahl	89
4.4.4.	Prominente CSCT-Artefakte	97
5.	Experimenteller Aufbau	105
5.1.	Das kombinierte EDXRD-CBCT-System	105
5.1.1.	CSCT-Modus	105
5.1.2.	CBCT-Modus	107
5.2.	Datenakquisition	107
5.2.1.	Software „EasyTomography“	108
5.2.2.	Durchführung von Scans	108
5.3.	Datenverarbeitung und Rekonstruktion	109
6.	Ergebnisse	113
6.1.	Phantombasierte Rekonstruktionen	113
6.1.1.	Bestimmung der Ortsauflösung: Ein-Material-Phantom	114
6.1.2.	Bestimmung der Ortsauflösung: Mehr-Material-Phantom	115
6.1.3.	Rekonstruktion ausgewählter Flüssigkeiten	116
6.1.4.	Artefakte bei der CSCT-Rekonstruktion	119
6.2.	Erkennung unbekannter Substanzen	127
6.2.1.	Materialerkennung bei teilweisen iso-intensen CBCT-Daten	127
6.2.2.	Eingebettete Materialien	129
6.3.	Ortsaufgelöste Darstellung des Ladezustands von Li-Ionen Akkumulatoren	133
6.3.1.	EDXRD-basierte Ladezustandsmessungen	133
6.3.2.	Untersuchung degradierter Akkumulatorzellen	135
7.	Zusammenfassung und Ausblick	141
	Anhang	143
A.	Beugungsanlage	145
A.1.	Geometrie	145

A.2. Materialien (GATE)	146
Literaturverzeichnis	147
Eidesstattliche Erklärung	161

Abkürzungsverzeichnis

ADXRD	Winkeldispersive Röntgenbeugung
BP	Basis Pursuit Minimierungsproblem
BPDN	Basis Pursuit Denoising Minimierungsproblem
CAD	Rechnergestütztes Konstruieren
CAXDI	Coded Aperture Röntgenstreubildgebung
CBCT	Kegelstrahl-CT
CS	Compressed Sensing
CSCT	Kohärente Streutomographie
CDF9/7	Cohen-Daubechies-Feauveau 9/7 Wavelets
CT	Computertomographie
DCT	Diskrete Cosinus-Transformation
EDXRD	Energiedispersive Röntgenbeugung
FBP	gefilterte Rückprojektion
FDK	Feldkamp-Davis-Kress Rekonstruktionsalgorithmus
FISTA	Fast Iterative Shrinkage Thresholding Algorithmus
FPD	Flatpanel Detektor
FWHM	Full Width at Half Maximum, Halbwertsbreite
HPGe	Hochreiner Germanium Detektor
HQ	„High Quality“, hohe Qualität
ISTA	Iterative Shrinkage Thresholding Algorithmus
LGS	Lineares Gleichungssystem
LQ	„Low Quality“, geringe Qualität
MIFB	mehrfach invertierte Fächerstrahlgeometrie
MP	Matching Pursuit Algorithmus
MTF	Modulationsübertragungsfunktion
NNLS	Kleinste-Quadrate Minimierung unter Nichtnegativitätsbedingung
OMP	Orthogonaler Matching Pursuit Algorithmus
PA6	Polyamid 6 Kunststoff
PE	Polyethylen

PEEK	Polyetheretherketon
PETG	Mit Glykol modifiziertes Polyethylenterephthalat
PixD	pixellierte Röntgendiffraktometrie
Pixel	Bildelement
PMMA	Polymethylmethacrylat, Acrylglas
POM	Polyoxymethylen
PP	Polypropylen
PTFE	Polytetrafluorethylen, Teflon
PVC	Polyvinylchlorid
RIP	Restringierte Isometrie Bedingung („Restricted Isometry Property“)
SEI	„Solid Electrolyte Interphase“
SoC	Ladezustand („State of Charge“)
SSH	Secure Shell
SVD	Singulärwertzerlegung
VOI	Volume Of Interest
Voxel	Volumenelement
XDI	Röntgenstreubildgebung
XRD	Röntgendiffraktometrie

Symbolverzeichnis

$\dot{a}_{\Lambda 0}$	Aktivität einer Flächenquelle [#Photonen $\text{mm}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{s}^{-1}$]
\dot{a}_{V0}	Aktivität einer Volumenquelle [#Photonen $\text{mm}^{-3} \text{sr}^{-1} \text{s}^{-1}$]
\vec{b}	Vektorisierte Projektionsdaten $\in \mathbb{R}^{n_m \times n_e}$
$\vec{\beta}$	Dünnbesetzter Vektor $\in \mathbb{R}^{n_D \times 1}$
c	Vakuumlichtgeschwindigkeit $\approx 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
C	Nebenbedingungsmatrix
D	Dictionary Matrix $\in \mathbb{R}^{n_r \times n_d}$
E	Photonenenergie [keV]
f	Atomformfaktor
F	Strukturfaktor
FOD	Fokus-Objekt Abstand [mm]
λ	Regularisierungs- bzw. Sparsity-Parameter
I	Intensität [$\text{J s}^{-1} \text{mm}^{-2}$]
I_{CBCT}	CBCT-CT Bild [cm^{-1}] $\in \mathbb{R}^{n_x \times n_y \times n_z}$
I_{CSCT}	CSCT-Bild [cm^{-1}] $\in \mathbb{R}^{n_y \times n_y \times n_e}$
J	Allgemeine Zielfunktion eines Minimierungsproblems
κ	Kompressionsfaktor
MDD	Maske-Detektor Abstand [mm]
m_e	Ruhemasse des Elektrons $\approx 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 511 \text{ keV c}^{-2}$
M_p	Matrix zur Beschreibung der Phantom-Materialverteilung
μ	Linearer Schwächungskoeffizient [cm^{-1}]
\dot{n}_0	Aktivität der Röntgenröhre [#Photonen $\text{keV}^{-1} \text{s}^{-1} \text{mm}^{-2}$]
n_a	(Anzahl-)Dichte [#Teilchen cm^{-3}]
n_d	Anzahl der der Atome einer Dictionary Matrix D
n_e	Anzahl der Energiekanäle
n_{iter}	Anzahl der maximalen Iterationen eines Algorithmus
n_k	Anzahl der von Null verschiedenen Komponenten eines Vektors
n_m	Anzahl der Messungen $n_m = n_{\delta y} \cdot n_{\delta \gamma}$
n_r	Anzahl der Pixel im Ortsraum $n_r = n_x \cdot n_y \cdot n_z$
n_t	Anzahl der K-SVD Trainingsvektoren
n_x	Anzahl der Pixel in x-Richtung
n_y	Anzahl der Pixel in y-Richtung
n_z	Anzahl der Pixel in z-Richtung
$n_{\delta y}$	Anzahl der Translationsschritte
$n_{\delta \gamma}$	Anzahl der Rotationsschritte
\dot{n}	Photonenflussdichte [#Photonen $\text{mm}^{-3} \text{sr}^{-1} \text{keV}^{-1} \text{s}^{-1}$]
\dot{n}_Q	Photonenquelle mit räumlicher Ausdehnung [#Photonen $\text{mm}^{-3} \text{sr}^{-1} \text{keV}^{-1} \text{s}^{-1}$]
N	Photonenanzahl bzw. energieaufgelöstes Spektrum [#Photonen]
\dot{N}	Zählrate [#Photonen s^{-1}]

\dot{N}_0	Zählrate pro Fläche [#Photonen $\text{mm}^{-2} \text{s}^{-1}$]
\dot{N}_{BF}	Orts- und energieabhängige Brennfleckaktivität [#Photonen s^{-1}]
ODD	Objekt-Detektor Abstand [mm]
p	Projektionsbild
p_{OR}	Wahrscheinlichkeit der korrekten Orientierung eines Kristallits
p_{SP}	Intensitätsverteilung des Röntgenstrahls (Strahlprofil)
p_{SW}	Streuwinkelverteilung (orts- und energieabhängig)
q	Impulsübertrag $q = E \cdot \sin(\Theta/2) / (hc)$ [nm^{-1}]
r_{D}	Redundanz eines Dictionaries D, $n_{\text{d}}/n_{\text{r}}$
r_{e}	Klassischer Elektronenradius $\approx 2,818 \cdot 10^{-15} \text{ m}$
R	Radon- bzw. Systemmatrix $\in \mathbb{R}^{n_{\text{m}} \times n_{\text{r}}}$
ρ	Massendichte [g cm^{-3}]
ρ_{e}	Elektronendichte [cm^{-3}]
\vec{s}	Streuvektor [nm^{-1}]
S	Inkohärente Streufunktion
σ_{coh}	Totaler Wirkungsquerschnitt der kohärenten Streuung [b]
σ_{ges}	Totaler Gesamtwirkungsquerschnitt = $\sigma_{\text{ph}} + \sigma_{\text{inc}} + \sigma_{\text{coh}}$ [b]
σ_{inc}	Totaler Wirkungsquerschnitt der inkohärenten Streuung [b]
σ_{ph}	Totaler Wirkungsquerschnitt der Photoabsorption [b]
Θ	Streuwinkel - Winkel zwischen einlaufendem und gestreutem Strahl [°]
V_{Vox}	Voxelvolumen [m^3]
w	Patchlänge; Anzahl der Pixel im Segment: $w \times w$
\vec{x}_{CB}	Vektorisiertes Kegelstrahl-CT Bild bzgl. Standardbasis $\in \mathbb{R}^{n_{\text{r}} \times 1}$
\vec{x}	Vektorisiertes CSCT Bild bzgl. Standardbasis $\in \mathbb{R}^{n_{\text{r}} \times n_{\text{e}}}$
Z	Ordnungszahl

Abbildungsverzeichnis

1.	Definition des Streuvektors	6
2.	Verhältnis der Wirkungsquerschnitte kohärenter und inkohärenter Streustrahlung	7
3.	Korrekte Orientierung der Kristallite	11
4.	Typische EDXRD Zählraten in Abhängigkeit der Materialstärke	13
5.	Streugeometrie EDXRD-basierter XDI-Verfahren	13
6.	Aufbau eines MIFB-Systems	14
7.	Aufbau eines CSCT-Systems	16
8.	Aufbau eines CAXDI-Systems	18
9.	Abtastung des zweidimensionalen Radon-Raums	20
10.	Rekonstruktion eines Li-Ionen Akkumulators	23
11.	Prinzip der algebraischen Rekonstruktion	24
12.	Anforderungen zur Simulation von XDI-Systemen	28
13.	Schematischer Aufbau eines XDI-Simulationsvolumens	30
14.	Schematische Darstellung der Simulationsroutine	33
15.	Untersuchung zur Wahl des minimalen primären Abstrahlwinkels	35
16.	Simulation des primären Intensitätsprofils und der Abstrahlverteilung	36
17.	Streusimulation, Anteil direkter und indirekter Strahlung	37
18.	Simulation der Systemfunktionen	38
19.	Visualisierung der Streupfadsimulation ($\vec{r}_S \rightarrow \vec{r} \rightarrow \vec{r}_D$)	39
20.	Validierung der Primärstrahlsimulation	43
21.	Darstellung des Aufbaus zur Primärstrahl-Simulation Validierung	44
22.	Validierung der Variation des Streuwinkels	44
23.	Validierung, Untersuchung des VOI	45
24.	Validierung, Intensitätsanpassung der Streuspektren	46
25.	Vergleich, ideale vs. reale Schwächung	48
26.	Nadel- vs. Fächerstrahl: CAD Darstellung	49
27.	Nadel- vs. Fächerstrahl: Räumliche Auflösung	50
28.	Nadel- vs. Fächerstrahl: Quantendurchsatz	50
29.	Kollimatoroptimierung: Streuwinkel	51
30.	Kollimatoroptimierung: Aspektverhältnis	52
31.	Kollimatoroptimierung: Kollimatormaterial	53
32.	Kollimatoroptimierung: Design Abstandhalter	53
33.	Bildinformation CBCT vs. CSCT	56
34.	Modellierung des CBCT- und CSCT-Systems	58
35.	Abschätzung der RIP-Konstante einer Radonmatrix	61
36.	Phasengrenze Gaußscher Zufallsmatrizen	62
37.	Komprimierbarkeit: K-SVD vs. analytische Transformationen	63

38.	Exemplarische Darstellung der Atome eines erlernten Dictionarys	65
39.	Demonstration Dictionary-Training	71
40.	Demonstration der zufälligen Wasserscheiden-Segmentierung	73
41.	Demonstration Radon-Matrix Generierung	76
42.	Abschätzung der benötigten Anzahl an Messungen	78
43.	Darstellung der iterativen Rekonstruktionsroutine	80
44.	Kombinierte CBCT-CSCT-Darstellung	82
45.	Künstliche Phantom-Erzeugung	84
46.	Ablauf der simulativen Rekonstruktionsstudien	86
47.	Studie zur Rekonstruktionsperformance	88
48.	Untersuchung zur Wahl von λ_{\min}	89
49.	Untersuchung zur Wahl von n_k^p	90
50.	Untersuchung zur Wahl von v_{\max}	91
51.	Untersuchung zur Wahl der Patchgröße w	92
52.	Untersuchung zur Dictionary Redundanzreduzierung	93
53.	Untersuchung zur Auswirkung des Segmentierungs-Präprozesses	95
54.	Untersuchung zur Block-Artefakt-Reduzierung	96
55.	Phantomübersicht zur Charakterisierung von Rekonstruktionsartefakten	98
56.	Auswirkung stark schwächender Materialien auf die Rekonstruktion	99
57.	Generierung von in Teilen iso-intensen CBCT-Daten	100
58.	Auswirkung iso-intenser a priori CBCT-Daten auf die Rekonstruktion	100
59.	Sinogramme zur Untersuchung der Auswirkung nicht isotroper Streuung	101
60.	Rekonstruktionen zur Untersuchung der Auswirkung des Texturmusters A	102
61.	Rekonstruktionen zur Untersuchung der Auswirkung des Texturmusters B	103
62.	Schematischer Aufbau der kombinierten EDXRD-CBCT-Röntgenbeugungsanlage	106
63.	Schematische Darstellung der Datenakquisitionssystems	107
64.	Screenshot des Programms EasyTomography	109
65.	Scan zur Ermittlung des VOI-Profiles	110
66.	Screenshot des Programms mEasyTomography	111
67.	CSCT-Rekonstruktionen zur Untersuchung der Systemauflösung	114
68.	CSCT-Rekonstruktionen zur Untersuchung der Systemauflösung	115
69.	Bestimmung der Systemauflösung mit Hilfe eines Mehr-Materialien-Phantoms	116
70.	Rekonstruktionen zur Bestimmung der Systemauflösung (Multi-Material)	117
71.	CBCT-Rekonstruktionen: Untersuchung der Unterscheidbarkeit von Flüssigkeiten	118
72.	Rekonstruktionen zur Fremdflüssigkeit-Identifikation	119
73.	Phantom Definition zur Untersuchung von Metall-Artefakten	120
74.	CSCT-Rekonstruktionen zur Untersuchung von Metall-Artefakten	121
75.	Phantom Definition zur Untersuchung von Aliasing-Artefakten	122
76.	CSCT-Rekonstruktionen zur Untersuchung von Aliasing Artefakten	122
77.	Auswirkung von Ringartefakten auf die CSCT-Rekonstruktion	123
78.	Phantom zur Untersuchung von anisotropem Streuverhalten	124
79.	Untersuchung zu Auswirkungen von anisotropem Streuverhalten	125
80.	Untersuchung zur Materialerkennbarkeit bei in Teilen iso-intenser CBCT-Daten	128
81.	Rekonstruktion: Materialerkennbarkeit bei in Teilen iso-intenser CBCT-Daten	129
82.	Experimentelle Untersuchung zur Materialerkennbarkeit eingebetteter Proben	130

83.	Auswahl der CSCT-Scanparameter und Messzeitoptimierung	131
84.	Rekonstruktionen zur Materialerkennung eingebetteter Proben	132
85.	Typische Bauformen von Li-Ionen Akkumulatorzellen	134
86.	Beugungsspektrum einer Li-Ionen Zelle - geladen vs. entladen	135
87.	Zeitaufgelöste Beugungsmessung eines Li-Ionen Akkumulators	136
88.	Untersuchung zur Degradation von Li-Ionen Akkumulatoren: EDXRD-Rasterscan .	137
89.	Untersuchung zur Degradation von Li-Ionen Akkumulatoren: Kapazitätsvergleich .	138
90.	Schichtaufgelöste Darstellung des „Grad der Entladung“ einer degradierten Zelle .	139
91.	CBCT-Rekonstruktion einer degradierten Zelle	139

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Hartwin Bomsdorf. Durch ihn wurde erstmalig mein Interesse an der Thematik im Rahmen meiner Diplomarbeit geweckt. Die Möglichkeit neue Ideen im Zuge dieser Arbeit umzusetzen und zu verfolgen ist ihm zu verdanken. Die während dieser Zeit regelmäßigen und häufig auch spontanen Rücksprachen bezüglich theoretischer und technischer Fragestellungen, waren stets förderlich und hilfreich.

Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. Uwe Pietrzyk für die Übernahme des Zweitgutachtens und Herrn Prof. Dr. Reinhard Hentschke sowie Prof. Dr. Dirk Lützenkirchen-Hecht für die Teilnahme an der Prüfungskommission. Des Weiteren möchte ich mich für die stets kollegiale Hilfsbereitschaft der Arbeitsgruppen aus dem Gebiet der angewandten Physik bedanken.

Auch möchte ich Herrn Stepan Nassyr für die Vielzahl der (programmier)technischen Diskussionen danken. Zudem danke ich meinen Kommilitonen und Promotionskollegen, hier seien insbesondere Andreas Behrendt, Sebastian Mathys, Tobias Neumann und Sascha Reinecke genannt, für eine schöne Studienzeit, inspirierende und spannende Gespräche.

Ein ganz besonderer Dank geht an meine Familie, die mich im Laufe des Studiums und der Promotion fortwährend unterstützt haben und somit zum Gelingen der Arbeit maßgeblich beigetragen haben.

EINLEITUNG

Bereits kurz nach der Entdeckung der Röntgenstrahlung hat sich eine Vielzahl von röntgenbasierten Methoden weitreichend etabliert. Trotz dieser Vielfalt lässt sich die Menge der Röntgenmethoden hauptsächlich in zwei Bereiche unterteilen.

Der erste Bereich umfasst die bildgebenden Verfahren, welche, z.B. durch Röntgenschwächung, im wesentlichen Informationen über die Morphologie des zu untersuchenden Objekts liefern. Charakterisierend für diese Gruppe von Verfahren ist die häufige Verwendung von polychromatischer Strahlung vergleichsweise hoher Röntgenenergie (z.B. $> 60\text{keV}$) in einer Kegel- oder Fächerstrahlgeometrie mit dem Ziel der bildlichen Darstellung der Messdaten. Mit der Entwicklung des ersten Computertomographen durch Hounsfield[1] konnte die Röntgenschwächung von ausgedehnten Objekten erstmalig räumlich aufgelöst und zerstörungsfrei zugänglich gemacht werden. Medizinische Computertomographie (CT) Systeme der aktuellen Generation ermöglichen es Aufnahmen bei einer Zeitauflösung von $< 100\text{ms}$ mit bis zu $400\text{ }\mu\text{m}$ Ortsauflösung[2] im Dual-Energy Verfahren durchzuführen. Mit Kegelstrahl-Systemen, wie sie beispielsweise in der dentalen Volumetomographie eingesetzt werden, sind isotrope Voxelgrößen von bis zu $100\text{ }\mu\text{m}$ erzielbar[3]. Für industrielle Anwendungen, beispielsweise im Bereich der Werkstofftechnik (Faserverteilung in Verbundwerkstoffen, Porositätsanalyse, Defektanalyse, ...), Metrologie oder auch in der begleitenden Qualitätssicherung kommen zunehmend Mikro-CT Systeme zum Einsatz[4]. Hierbei sind durch die Verwendung von Mikrofokus-Röntgenröhren in Reflektions- bzw. Transmissionsgeometrie Ortsauflösungen von $< 1\text{ }\mu\text{m}$ bei einer Scandauer von wenigen Minuten[5] erzielbar.

Der zweite Röntgenmethoden Bereich zeichnet sich durch analytische Verfahren aus, welche, z.B. mittels Röntgenbeugung, -absorption, oder -fluoreszenz, Aufschluss über materialspezifische Eigenschaften der Probe liefern. So erlaubt die Röntgendiffraktometrie (XRD) neben der Kristallstrukturanalyse auch die Untersuchung von Phasenübergängen, Änderungen der chemischen Zusammensetzung, Textur, Temperatur oder dem Grad der Kristallinität der Probe und bietet somit vielfältige industrielle Anwendungsmöglichkeiten[6]. Typischerweise kommt bei der winkeldispersiven Röntgenbeugung (ADXRD) weiche und monochromatische Röntgenstrahlung in einer Nadel- bzw. Parallelstrahlgeometrie zum Einsatz[7].

Die Entwicklung der energiedispersiven Röntgenbeugung (EDXRD) durch Giessen/Gordon[8] und Buras[9] ermöglicht hingegen die Verwendung polychromatischer Strahlung und bewirkt einen Geschwindigkeitszuwachs bei der Datenakquisition von mehr als einer Größenordnung[10].

Durch die energiedispersive Röntgendiffraktometrie können Diffraktogramme an ausgedehnten Objekten mit harter Röntgenstrahlung in einer Transmissionsgeometrie unter Verwendung kon-

ventioneller Röntgenröhren ortsaufgelöst gemessen werden[11]. Somit bildet das EDXRD-Verfahren die Grundlage vieler Röntgenstreubildgebungsverfahren (XDI) und ermöglicht die Verknüpfung zwischen den Bereichen der Röntgenanalytik und Röntgenbildgebung. Anwendungen aus dem medizinischen Bereich, wie etwa die Mineralienanalyse von Knochen[12] oder Brustgewebeuntersuchungen[13], sowie aus dem Bereich der Gepäckinspektion zur Detektion verbotener Substanzen, wie Betäubungsmittel[14] und Sprengstoffe[15][16][17], wurden bereits früh aufgezeigt. Erste kommerziell erhältliche XDI-Systeme zur Gepäckinspektion vermögen Streuung aus $\sim 10^2$ Voxeln parallel zu akquirieren und erlauben es somit einen kompletten Koffer in wenigen Minuten zu scannen[18]. Mithilfe von Multifokus-Röntgenröhren kann der Parallelisierungsgrad bei Geräten der aktuellen Generation auf $\sim 10^4$ Voxel erhöht werden, sodass ebenfalls Untersuchungen von Handgepäck bei Sicherheitskontrollen ermöglicht werden[19].

Trotz der geringen Scandauer im Fall der Gepäckinspektion, ist die Länge der Aufnahmezeit eines Streubildes bei XDI-Verfahren eine kritische Größe. So können beispielsweise Messungen mit gewöhnlichen Röntgenröhren, anwendungsabhängig, bei einer hohen örtlichen und spektralen Auflösung durchaus mehrere Stunden in Anspruch nehmen. Ein weiteres, inhärentes Problem der energiedispersiven kohärenten Röntgenstreubildgebung ist die geringe Ortsauflösung entlang der Primärstrahlrichtung. Trotz des erhöhten Durchsatzes neuer Systeme, liegt die sogenannte longitudinale Auflösung auch dort mit lediglich 20 mm etwa eine Größenordnung über der transversalen Auflösung senkrecht zum Strahl und begünstigt somit Teilvolumeneffekte[19]. Mittels kohärenter Streutomographie lässt sich durch Rekonstruktion der Streudaten eine isotrope Ortsauflösung erzielen, sie ist jedoch aufgrund der Fächerstrahlgeometrie auf einige Millimeter begrenzt[20]. Die Gantry basierte Kohärente Streutomographie (CSCT)-Geometrie erlaubt eine direkte Integration in konventionelle CT-Systeme und ist insbesondere für medizinische Anwendungen konzipiert[21][22]. Die erforderliche Dosis bei einer Auflösung von 10 mm beträgt etwa 20 mSv[23]. Der Einsatz von CSCT in Kegelstrahl-CT Anlagen wird hingegen nicht verfolgt. Dabei eröffnen gerade neue Anwendungsfelder der industriellen Mikro-Computertomographie, wie die Untersuchung elektrochemischer Prozesse an Li-Ionen-Akkumulatoren[24][25][26], die Qualitätskontrolle bei additiven Fertigungstechniken[27][28][29] oder Prozessoptimierungen im Bereich der Lebensmittelindustrie[30][31][32], Möglichkeiten der Erweiterung mittels ortsaufgelöster Information zum Ladungszustand von Batterien[33][34], Phasen- und Texturbestimmung während Erstarrungsvorgängen[35][36], sowie Materialbestimmung in biologischen Proben[37][38].

Ansatz dieser Arbeit

Obwohl die Kombination von Modalitäten in der medizinischen Bildgebung durchaus üblich ist (PET/CT, PET/MR, SPECT/CT, ...)[39], werden EDXRD-Systeme als eigenständig, d.h. isoliert von bestehenden konventionellen Röntgenbildgebungssystemen, betrachtet[18]. Demgegenüber wird an CSCT-Systemen geforscht, welche sich modular und kosteneffizient in vorhandene Computertomographen integrieren lassen. Auf diese Art kann die, in der Computertomographie üblicherweise durch Streustrahlenraaster unterdrückte, Streustrahlung einen signifikanten Informationsgewinn bewirken[20].

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Kegelstrahl-CT-System und ein CSCT-System in Nadelstrahlgeometrie kombiniert, um Streubildgebung mit einer Ortsauflösung im Milli- und Submillimeterbereich zu ermöglichen. Im Gegensatz zu den existierenden Ansätzen, bei denen eine parallele

Akquisition von Schwächungs- und Streudaten stattfindet, wird hier die Idee eines sequentiellen Scans verfolgt. Verglichen mit der Streubildgebung liefert das aufgebaute Kegelstrahl-CT-System 3d-Bilder des Schwächungskoeffizienten mit hoher Ortsauflösung ($\sim 100 \mu\text{m}$) bei kurzen Aufnahmezeiten. Diese Daten werden als sogenanntes a priori Wissen verwendet, um Streuspektren mithilfe eines reduzierten Streudatensinogramms zu rekonstruieren.

In den folgenden Kapiteln werden zunächst die für die Streubildgebung relevanten physikalischen Prozesse dargestellt. Es wird über den Stand von Wissenschaft und Technik bildgebender EDXRD-Verfahren berichtet, Grundlagen der Transmissions-Computertomographie werden beschrieben. Die Simulation von EDXRD-basierten XDI-Systemen wird thematisiert und ein Monte-Carlo basiertes Simulationsverfahren vorgestellt. Neben der Validierung der Simulationsroutine werden verschiedene XDI-Topologien z.B. im Hinblick auf Quantendurchsatz, Ortsauflösung und spektrale Auflösung miteinander verglichen.

Anschließend wird der entwickelte Rekonstruktionsalgorithmus und dessen Erprobung anhand von simulierten Daten vorgestellt. Es wird die mathematische Modellierung des Problems beschrieben und Grundlagen zu dessen Lösung erläutert. Untersuchungen zur Rekonstruktionsgüte in Abhängigkeit verschiedener Scanparameter werden mithilfe unterschiedlicher virtueller Phantome durchgeführt. Vorteile gegenüber einer konventionellen Rekonstruktion mit gefilterter Rückprojektion werden veranschaulicht.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird der experimentelle Aufbau der kombinierten EDXRD-CT Anlage beschrieben. Die verwendete Hardware und entwickelte Software zur Datenakquisition wird beleuchtet, sowie die Performance beider Systeme spezifiziert. Das Potential des Verfahrens wird des Weiteren anhand von Anwendungsbeispielen demonstriert. Als zentrale Beispiele sind hier die zerstörungsfreie und schichtaufgelöste Darstellung des Ladungszustands von kommerziell erhältlichen zylindrischen Lithium-Ionen Akkumulatoren als auch die Erkennung unbekannter Substanzen bei geringen Teilvolumeneffekten zu nennen.

STAND VON WISSENSCHAFT UND TECHNIK

In diesem Abschnitt wird auf den Stand von Wissenschaft und Technik in der Röntgenstreubildgebung eingegangen. Zunächst werden die physikalischen Grundlagen der energiedispersiven Röntgenbeugung zusammengefasst und Grenzen des Verfahrens aufgezeigt. Neue Ansätze der Streubildgebung, wie das Multiple-inverse-Fanbeam Verfahren (MIFB), die kohärente Streutomographie (CSCT) und das Coded-Aperture Diffraction-Imaging (CAXDI) werden vorgestellt. Grundlagen und Entwicklungen in der konventionellen Transmissionscomputertomographie werden beschrieben.

2.1. Physikalische Grundlagen

Den folgenden Ausführungen liegt der in dieser Arbeit relevante Energiebereich von $\sim 20 - 150$ keV bei einem typischen Streuwinkel von $\Theta \approx 3,5^\circ$ zugrunde (vgl. Unterabschnitt 3.3.2). Physikalische Wechselwirkungsprozesse und Ergebnisse der Beugungstheorie werden im Hinblick auf die quantitative Beschreibung energiedispersiver Röntgendiffraktogramme zusammengefasst.

2.1.1. Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie

Als relevante Wechselwirkungsprozesse werden üblicherweise Photoeffekt, Compton-Streuung und Paarbildung aufgeführt[40]. Im konkreten Fall der energiedispersiven Röntgenbeugung besitzt der Paarbildungseffekt allerdings aufgrund des typischerweise verwendeten Energiebereiches von $\sim 20 - 150$ keV keine Relevanz. Hingegen ist angesichts des Streuwinkels von wenigen Grad (hier $\Theta \approx 3,5^\circ$) die für die Röntgenbeugung notwendige kohärente Thomson-Streuung von großer Bedeutung.

Mithilfe des totalen Gesamtwirkungsquerschnittes σ_{ges} , bestehend aus den Beiträgen der Photoabsorption σ_{ph} , der kohärenten Streuung σ_{coh} und der inkohärenten Streuung σ_{inc} , lässt sich die Schwächung von Röntgenstrahlung durch das Lambert-Beersche Gesetz berechnen.

$$I(E) = I_0(E) \cdot \exp(-n_a \cdot \sigma_{\text{ges}}(Z, E) \cdot x) \quad (2.1)$$

Dabei beschreibt I_0 die Intensität des Röntgenstrahls vor Beginn der Wechselwirkung, n_a die Anzahldichte der enthaltenen Atome bzw. Moleküle und x gibt die Position innerhalb des zu durchdringenden Objekts an. Häufig wird Gleichung 2.1 mithilfe des linearen Schwächungskoeffizienten $\mu = n_a \sigma_{\text{ges}}$ oder des Massenschwächungskoeffizienten μ/ρ ausgedrückt. Die Werte für die Massenschwächungskoeffizienten sind für alle chemischen Elemente bis $Z = 92$ und eine Vielzahl an chemischen Verbindungen über einen weiten Energiebereich beispielsweise in [41] tabelliert.

Photoeffekt

Bezogen auf den hier betrachteten Energiebereich stellt der Photoeffekt bei kleinen bis mittleren Energien den dominantesten Effekt dar. Abhängig von der Ordnungszahl ist der Absorptionswirkungsquerschnitt um bis zu zwei Größenordnungen höher als bei den konkurrierenden Streuprozessen. Der totale Wirkungsquerschnitt dieses Prozesses ist approximativ durch

$$\sigma_{\text{ph}} \propto Z^n \cdot E^{-3.5} \quad (2.2)$$

gegeben und gilt außerhalb der Absorptionskanten. Der Exponent n kann quantenmechanisch zu $n = 5$ bestimmt werden[42], experimentell zeigt sich jedoch, dass n im Bereich von $4 - 5$ in Abhängigkeit von der Photonenergie liegt[43, Seite 49].

Thomson-Streuung

Für die kohärente Streuung eines Röntgenphotons an einem Atom ergibt sich für den differentiellen Wirkungsquerschnitt nach Thomson

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{coh}} = r_e^2 \cdot \frac{1 + \cos^2(\Theta)}{2} \cdot |f(s, Z)|^2. \quad (2.3)$$

Dabei beschreibt r_e den klassischen Elektronenradius. Der Atomformfaktor f ist von der Ordnungszahl Z und dem Betrag des Streuvektors $|\vec{s}| = s = 2 \sin(\Theta/2) / \lambda$ abhängig; die Definition der Richtung des Streuvektors \vec{s} ist in Abbildung 1 dargestellt. In der energiedispersiven Röntgenbeugung wird s üblicherweise als Impulsübertrag bezeichnet[18]. Der totale Wirkungsquerschnitt ergibt sich entsprechend durch Integration der Gleichung 2.3 über $d\Omega$. Häufig ist in Näherung eine Proportionalität zu $Z^2 \cdot E^{-2}$ angegeben[44]. Dieser Wechselwirkungsbeitrag wird beispielsweise in der medizinischen Bildgebung oftmals nicht betrachtet. Der totale Wirkungsquerschnitt

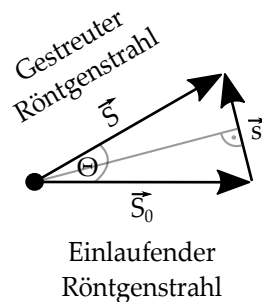


Abbildung 1: Definition des Streuvektors \vec{s} .

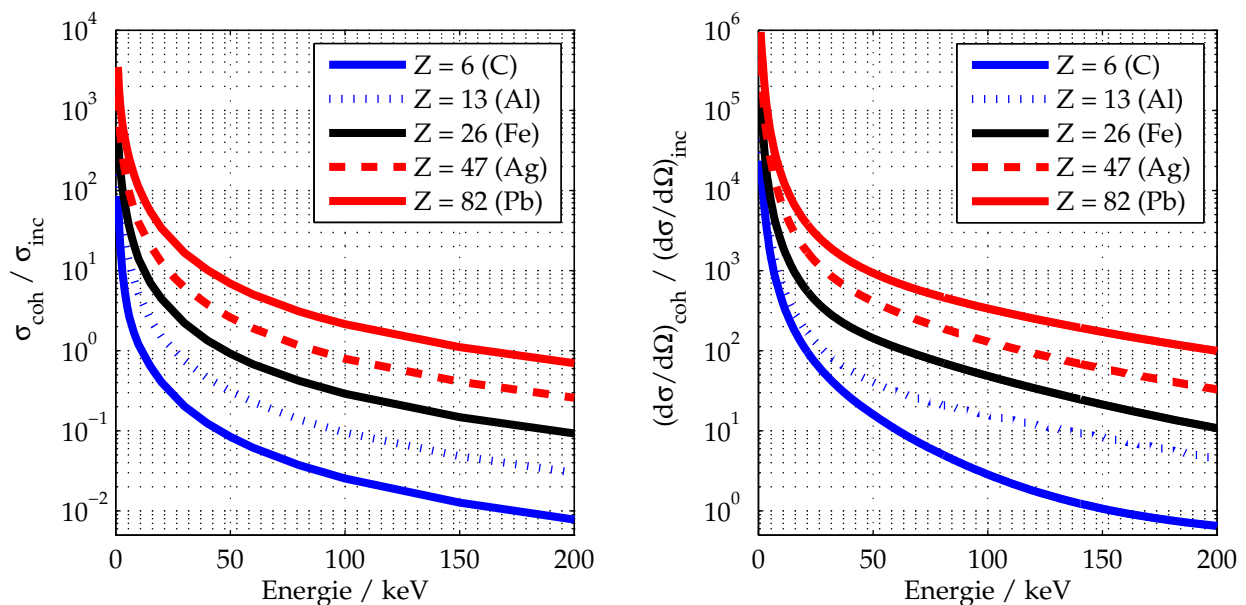
fällt bei den anwendungsspezifischen Röntgenenergien für Elemente mit niedriger Ordnungszahl im Vergleich zur inkohärenten Streuung klein aus, siehe Abbildung 2 a), ist dafür aber stark vorwärtsgerichtet, vgl. Abbildung 2 b).

Compton-Streuung

Der Compton-Effekt beschreibt die inelastische Streuung von Photonen an Elektronen. Für freie Elektronen ist die Wechselwirkungswahrscheinlichkeit durch den Klein-Nishina Wirkungsquerschnitt gegeben. Für Elektronen im atomaren Verbund ist die Wechselwirkungswahrscheinlichkeit verringert, da der Energietransfer auf die Elektronen den quantenmechanischen Auswahlregeln unterliegt. Durch eine multiplikative Korrektur mit der inkohärenten Streufunktion $S(s, Z)$ kann der Streuvorgang über einen großen Energiebereich hinreichend genau beschrieben werden[47]. Der atomare differentielle Wirkungsquerschnitt berechnet sich entsprechend zu

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{inc}} = \underbrace{\frac{1}{2}r_e^2 \cdot \left(\frac{E'}{E}\right)^2 \cdot \left(\frac{E'}{E} + \frac{E}{E'} - \sin^2(\Theta)\right)}_{=:(\frac{d\sigma}{d\Omega})_{\text{KN}}} \cdot S(s, Z). \quad (2.4)$$

Wobei E die Energie des Photons vor und E' die Energie des Photons nach der Streuung darstellt. Der relative Energieverlust hängt dabei vom Streuwinkel, der Primärenergie des Photons und der



(a) Verhältnis der totalen Streuquerschnitte für verschiedene Materialien.

(b) Verhältnis der differentiellen Streuquerschnitte ($\Theta = 3,5^\circ$) für verschiedene Materialien.

Abbildung 2: Verhältnis der Streuquerschnitte von kohärenter und inkohärenter Streustrahlung in Abhängigkeit der Photonenenergie. Vergleich der totalen Wirkungsquerschnitte a), entnommen aus [45], und der differentiellen Querschnitte b), berechnet mithilfe von [46].

Ruheenergie des Elektrons $m_e c^2 \approx 511 \text{ keV}$ in folgender Weise ab:

$$\frac{E'}{E} = \frac{1}{1 + E / (m_e c^2) (1 - \cos(\Theta))}. \quad (2.5)$$

Der totale inkohärente Streuquerschnitt ergibt sich durch Integration von Gleichung 2.4 und zeigt annähernd eine Proportionalität zur Ordnungszahl Z auf. Es ist anzumerken, dass sich bei stark vorwärts gerichteter Streuung ($\Theta < 3,5^\circ$) und einer Photonenenergie von 150 keV sowohl die Abweichung der Klein-Nishina Formel von dem Thomson Wirkungsquerschnitt als auch der relative Energieverlust zu $< 1 \%$ berechnen lässt.

Röntgenfluoreszenz

Auch wenn die Röntgenfluoreszenz keine Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie darstellt, wird sie im hier relevanten Energiebereich als Folge des Photo-Effekts in EDXRD Messungen bei Elementen mit Ordnungszahlen $Z \gtrsim 45$ beobachtet. Die Emissionen von Fluoreszenz-Photonen sowie Auger-Elektronen nach der Photoionisation stellen konkurrierende Prozesse dar. Es gilt $p_{\text{Auger}} + p_{\text{Fluo}} = 1$, wobei die Wahrscheinlichkeit für einen Strahlungsübergang p_{Fluo} als Fluoreszenzausbeute bezeichnet wird. Im Falle einer K-Schalen Ionisation ist die Wahrscheinlichkeit für eine K-Fluoreszenzlinie durch $p_{\text{Fluo,K}} \cdot p_{\text{K}i}$ bestimmt. Dabei gibt $p_{\text{K}i}$ die Wahrscheinlichkeit für einen entsprechenden Elektronenübergang von Zustand i nach $1s$ an. Der Wirkungsquerschnitt der K-Schalen Fluoreszenz ist proportional zum Wirkungsquerschnitt der Photoionisation von $1s$ Elektronen. Dieser kann mithilfe des Sprungverhältnisses S_K des totalen Photoabsorptionsquerschnitts σ_{ph} an der K-Absorptionskante berechnet werden. Entsprechend folgt für den Wirkungsquerschnitt [48, Seite 309 ff.]

$$\sigma_{\text{K}i} \propto \frac{S_K - 1}{S_K} \sigma_{\text{ph}} \cdot p_{\text{Fluo,K}} \cdot p_{\text{K}i}. \quad (2.6)$$

Elementabhängige Werte für Fluoreszenzausbeute, Übergangswahrscheinlichkeiten und Kantenhöbe sind in der Literatur tabelliert, vgl. beispielsweise [49] zur Übersicht.

2.1.2. Energiedispersive Röntgenbeugung

Es werden zunächst grundlegende Resultate der einschlägigen Literatur zur winkeldispersiven Röntgendiffraktometrie [50][51][52] aufgeführt, um anschließend Formeln zur quantitativen Beschreibung energiedispersiver Pulverdiffraktogramme zu formulieren.

Zur Bestimmung der gebeugten Intensität $I(\vec{s})$ muss das Betragsquadrat der Streuamplitude berechnet werden. Wird der Streuer durch eine Elektronendichte $\rho_e(\vec{y})$ beschrieben, erhält man unter Vernachlässigung von Absorption

$$\begin{aligned} I(\vec{s}) &\propto \left| \int \rho_e(\vec{y}) \cdot \exp(-2\pi i \vec{y} \cdot \vec{s}) dV_{\vec{y}} \right|^2 \\ &= \int \int \rho_e(\vec{y}') \cdot \rho_e(\vec{y}) \cdot \exp(-2\pi i (\vec{y} - \vec{y}') \cdot \vec{s}) dV_{\vec{y}} dV_{\vec{y}'} \end{aligned} \quad (2.7)$$

als Ausdruck für die Intensität. Dabei entspricht das in Zeile 1 auftretende Integral dem Formfaktor $f(\vec{s})$ der Elektronendichte. Das Quadrat des Formfaktors wurde in ein Doppelintegral überführt, sodass Gleichung 2.7 mit Hilfe einer Substitution weiter zu

$$\begin{aligned} I(\vec{s}) &\propto \int \int \rho_e(\vec{y}') \cdot \rho_e(\vec{y}' + \vec{x}) \cdot \exp(-2\pi i \vec{x} \cdot \vec{s}) dV_{\vec{x}} dV_{\vec{y}'} \\ &=: \int \mathcal{P}(\vec{x}) \cdot \exp(-2\pi i \vec{x} \cdot \vec{s}) dV_{\vec{x}} \end{aligned} \quad (2.8)$$

umformuliert werden kann. Dabei lässt sich die Intensität $I(\vec{s})$ als Fourier-Transformation der Autokorrelationsfunktion der Elektronendichte, der sog. Pattersonfunktion, $\mathcal{P}(\vec{x})$ auffassen.

Debye-Formel

Wird die Streuamplitude eines Moleküls, welches sich aus N verschiedenen Atomen zusammensetzt, durch die Addition aller Atomformfaktoren $f_j(\vec{s})$ unter Berücksichtigung der Streuphase berechnet, wird die resultierende Größe als molekularer Strukturfaktor $F(\vec{s})$ bezeichnet. Im Fall idealer Gase und Lösungen kann die Orientierung der Moleküle zum Streuvektor \vec{s} als gleichverteilt angenommen werden. Mittelt man die Intensität über alle Orientierungen, zeigt sich, dass die mittlere Intensität pro Molekül lediglich vom Betrag des Streuvektors s und dem Abstand x_{jk} der Atome untereinander abhängt[50, Seite 49].

$$I_{\text{Debye}}(s) \propto |F(\vec{s})|^2 = \sum_{j=1}^N f_j^2(s) + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^N f_j(s) f_k(s) \cdot \text{sinc}(2\pi s x_{jk}) \quad (2.9)$$

Gleichung 2.9 wird Debye-Formel genannt. Sie besitzt ebenfalls Gültigkeit für feine Pulver mit nahezu einheitlicher Korngröße. Die Summation muss dann über ein komplettes Korn ausgeführt werden.

Im Falle realer Flüssigkeiten und amorpher Feststoffe kann aufgrund von intermolekularen Wechselwirkungen keine Gleichverteilung der Molekülorientierungen angenommen werden. Für eine monomolekulare Substanz ergibt sich entsprechend für die Intensität[52, Seite 52]:

$$\begin{aligned} I_M(\vec{s}) &\propto \sum_{j=1}^{N_M} F_j^2(\vec{s}) + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{N_M} F_j(\vec{s}) F_k(\vec{s}) \cdot \exp(-2\pi i \vec{x}_{jk} \cdot \vec{s}) \\ &= N_M F^2(\vec{s}) \cdot \underbrace{\left(1 + \frac{1}{N_M} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{N_M} \exp(-2\pi i \vec{x}_{jk} \cdot \vec{s}) \right)}_{\mathcal{F}(\vec{s})} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die eingeführte Funktion $\mathcal{F}(\vec{s})$ wird Interferenzfunktion genannt. Sie beschreibt die Abweichung zur Streuintensität von N_M unabhängigen Molekülen. Nimmt man an, dass die Verteilung der Moleküle im Mittel durch eine kontinuierliche Paarkorrelationsfunktion $g(\vec{x})$ zu beschreiben ist,

lässt sich $\mathcal{F}(\vec{s})$ durch

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(\vec{s}) &= 1 + N_M \int g(\vec{x}) \exp(-2\pi i \vec{s} \cdot \vec{x}) \cdot \frac{1}{V} dV_{\vec{x}} \\ &= 1 + \frac{N_M}{V} \underbrace{\int \exp(-2\pi i \vec{s} \cdot \vec{x}) dV_{\vec{x}}}_{=\delta(\vec{s})} + \frac{N_M}{V} \int (g(\vec{x}) - 1) \cdot \exp(-2\pi i \vec{s} \cdot \vec{x}) dV_{\vec{x}}\end{aligned}\quad (2.11)$$

ausdrücken. Da die Integration über den gesamten \mathbb{R}^3 ausgeführt wird, entspricht der zweite Summand gerade der Fouriertransformation einer Konstanten und liefert damit exakt 0 für $s \neq 0$. Gleichung 2.11 erlaubt neben der anschaulichen Interpretation der Röntgendiffraktogramme auch deren Vergleich mit theoretischen Modellen betreffend der Struktur und Wechselwirkung der Moleküle [53][54].

Beugungsbedingung

Durch die Beschreibung eines Kristalls als periodische Aneinanderreihung von Elementarzellen auf dem Kristallgitter, lässt sich dessen Elektronendichte als Faltung der Gitterfunktion $z(\vec{x})$ mit der Elektronendichte der Einheitszelle $\rho_{EZ}(\vec{x})$ auffassen. Die Streuamplitude kann mithilfe der Fouriertransformation und des Faltungssatzes durch

$$F_C(\vec{s}) = F_{EZ}(\vec{s}) \cdot \frac{1}{V_C} \cdot \sum_{h,k,l} \mathcal{F}(\vec{s} - \vec{r}_{hkl}^*) \quad (2.12)$$

ausgedrückt werden, wobei V_C dem Volumen der Elementarzelle entspricht, $F_{EZ}(\vec{s})$ die Fouriertransformation der Elektronendichte der Elementarzelle beschreibt und h, k, l für die Millerschen Indizes stehen. Für einen unendlich ausgedehnten Kristall geht die Interferenzfunktion \mathcal{F} in eine Deltafunktion über. Damit liefert Gleichung 2.12 nur an den reziproken Gitterpunkten

$$\vec{s} = \vec{r}_{hkl}^* \quad (2.13)$$

von Null verschiedene Werte. Es ist anzumerken, dass auch im Fall von Kristallen mit endlichem Volumen, F_{Kristall} nur bei Erfüllung der Beugungsbedingung signifikante Beiträge liefert. Betrachtet man beispielsweise einen kubischen Kristall, beinhaltet $\mathcal{F}(\vec{s})$ die Fouriertransformation einer Boxfunktion. Deutet man die erste Nullstelle als Breite der Kurve, so errechnet sich für einen Kristall mit einer Kantenlänge von $10 \mu\text{m}$ etwa $\Delta s = 1 \cdot 10^{-4} \text{ nm}^{-1}$. Vergleicht man diesen Wert mit der Auflösung eines typischen EDXRD Systems von $\approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ nm}^{-1}$ ergibt sich eine Diskrepanz von zwei Größenordnungen. Bei Kristallitgrößen von $< 0,1 \mu\text{m}$ muss die Verbreiterung hingegen berücksichtigt werden. Sie lässt sich insbesondere nutzen, um Rückschlüsse auf die Kristallitgröße zu ziehen[55].

Wie auch bei winkeldispersiven Verfahren sind die Positionen der Beugungsreflexe durch die Beugungsbedingung definiert. Für einen konstanten Beugungswinkel Θ folgt aus Gleichung 2.13 die Bragg-Bedingung. Sie lässt sich über

$$q := \frac{1}{2d_{hkl}} = \frac{E \cdot \sin(\Theta/2)}{hc} \quad (2.14)$$

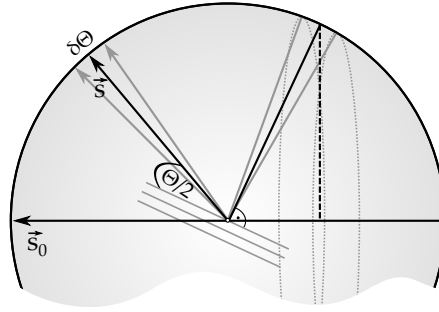


Abbildung 3: Korrekt orientierter Kristallit im Winkelintervall $[\Theta - \delta\Theta/2, \Theta + \delta\Theta/2]$.

mit dem Impulsübertrag q verknüpfen, wobei h dem Planckschen Wirkungsquantum und c der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum entspricht. Der für ein EDXRD-System zugängliche Impulsübertragsbereich ist entsprechend durch $\Delta q = \sin(\Theta/2) \cdot (E_{\max} - E_{\min}) / 1,2398 \text{ keV} [\text{nm}^{-1}]$ gegeben. Für typische Beugungswinkel bei der Gepäckinspektion[56] von $2,5^\circ$ beträgt $\Delta q \sim 2,5 \text{ nm}^{-1}$, bei Untersuchungen biologischer Proben[21] hingegen führen Streuwinkel von beispielsweise $\Theta \approx 6^\circ$ zu $\Delta q \sim 5 \text{ nm}^{-1}$.

Intensität

Für die Berechnung der Intensität bei pulverdiffraktometrischen Messungen wird von der Gleichverteilung der Kristall-Orientierungen ausgegangen, wobei ein Kristallit bezüglich einer Netzebenenchar hkl als korrekt orientiert gilt, wenn der Normalenvektor der Netzebene einen Winkel von $\pi/2 - \Theta/2$ mit dem einlaufenden Strahl \vec{S}_0 bildet. Unter Berücksichtigung der Strahldivergenz ($\delta\Theta$) in einem realen Experiment, ergibt sich nach Abbildung 3 für die Wahrscheinlichkeit p_{or} , dass ein Kristallit korrekt orientiert ist: $p_{or} = \frac{1}{2} m \cos(\Theta/2) \delta\Theta$. Hier ist m die aufgrund der Symmetrie gegebene Multiplizität der betrachteten Netzebenenchar. Die integrale Zählrate eines Beugungspeaks \dot{N}_P einer Pulverprobe lässt sich für den energiedispersiven Fall unter Berücksichtigung der Quanteneffizienz $\eta_{Det}(E)$ des Detektors und der mittleren Schwächung der Strahlung $A(E)$ für einen kompletten Debye-Scherrer Ring durch

$$\dot{N}_P = \dot{n}_0(E) \delta E \cdot r_e^2 \cdot \mathcal{L}\mathcal{P}(\Theta, E) \cdot \frac{m |F_{hkl}|^2}{V_C^2} \cdot V \cdot \eta_{Det}(E) \cdot A(E) \quad (2.15)$$

berechnen[9]. Dabei wurde die Primärintensität mit dem Spektrum der Röntgenröhre $\dot{n}_0(E)$, Einheit $[\#\text{Photonen keV}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ mm}^{-2}]$, sowie der Breite δE der entsprechenden Beugungslinie formuliert. Sämtliche auftretenden Winkelfunktionen wurden zum sog. Lorentz-Polarisationsfaktor zusammengefasst, welcher durch

$$\mathcal{L}\mathcal{P}(\Theta, E) = \frac{1 + \cos^2(\Theta)}{8 \sin(\Theta/2)} \cdot \left(\frac{hc}{E}\right)^3 \quad (2.16)$$

gegeben ist.

Die Gültigkeit von Gleichung 2.15 fußt auf der Annahme, dass eine große Anzahl korrekt orientierter Kristallite im sog. Volume Of Interest (VOI) des EDXRD-Systems vorhanden ist, vgl. Abbildung 5. Mithilfe der Wahrscheinlichkeit der korrekten Orientierung eines Kristallits p_{or} lässt sich

die mittlere Anzahl der korrekt orientierten Körner n_C durch die mittlere Korngröße v_C (Volumen) wie folgt abschätzen:

$$n_C = \frac{V_{\text{VOI}}}{v_C} \cdot p_{\text{or}} = m \frac{\delta\varphi \cdot \delta\Theta \cdot \cos(\Theta/2)}{4\pi \cdot v_C} V_{\text{VOI}} \quad (2.17)$$

Dabei beschreibt $\delta\varphi$ das Ringsegment eines Debye-Scherrer Rings und V_{VOI} das Probenvolumen innerhalb des VOI. Im Falle des in dieser Arbeit verwendeten Systems wird stets ein kompletter Debye-Scherrer Ring, d.h. $\delta\varphi = 2\pi$ aufgenommen.

Für ein typisches Volumen¹ von $V_{\text{VOI}} = 1 \text{ mm}^3$, eine Probe mit Multiplizität $m = 8$ (z.B. kubisches System, hhh Reflex), $\Theta = 3,5^\circ$ und $\delta\Theta = 0,175^\circ$ ergibt sich $n_C = 1,2 \cdot 10^{-2} \text{ mm}^3/v_0$. Bei einer mittleren Korngröße von $v_C = (10 \mu\text{m})^3$ errechnen sich demnach $1,2 \cdot 10^4$ Körner in korrekter Orientierung.

Linienauflösung

Die Breite der Beugungspeaks im Linienspektrum ist von mehreren Faktoren abhängig[57]. Als dominante Effekte sind insbesondere die energieabhängige Detektorauflösung $\delta E_{\text{Det}}(E)$ und die Winkelunschärfe $\delta\Theta$ des Systems zu nennen. Hauptursachen für die Winkelunschärfe des Systems sind die Strahldivergenz sowie der Winkelakzeptanzbereich des Streukollimators. Ist die mittlere Verteilung der möglichen Streuwinkel² bekannt, lässt sich die Form der Beugungspeaks mithilfe der Bragg-Gleichung berechnen. Die Energieunschärfe des Detektors δE_{Det} kann durch eine Faltung der Beugungspeakkurve mit der spektralen Stoßantwort des energiedispersiven Detektors berücksichtigt werden. Typischerweise ist die Pulsantwort des Detektors in sehr guter Näherung normalverteilt[43, Seite 416 ff.], so dass die Unschärfe der Beugungslinien mithilfe der Bragg-Gleichung durch Gaußsche Fehlerfortpflanzung beschrieben werden kann. Es ergibt sich

$$\frac{\delta E}{E} = \sqrt{\left(\frac{\delta E_{\text{Det}}}{E}\right)^2 + \left(\frac{\cot(\Theta/2) \delta\Theta}{2}\right)^2} \quad (2.18)$$

für die relative Linienbreite eines Beugungspeaks[19]. So ist die Limitierung der Auflösung prinzipiell durch die Energieunschärfe der Detektoren bestimmt. Bei hochreinen Germanium (HPGe) Halbleiterdetektoren beträgt sie ca. 1% für $E = 100 \text{ keV}$. In der Praxis ist die Auflösung jedoch häufig durch die Winkelunschärfe des Systems beschränkt. Anwendungsabhängig liegt sie zwischen 1 – 15%, sodass gegenüber HPGe Detektoren spektral geringer auflösende und kostengünstigere CdTe-Halbleiterdetektoren zum Einsatz kommen[58].

Schwächung

Für ein Nadelstrahl basiertes Streuexperiment gemäß Abbildung 5 stellt die Annahme, dass die Schwächung der gestreuten Strahlung vergleichbar mit der Schwächung des Zentralstrahls ist, aufgrund der geringen Streuwinkel eine gute Näherung dar[11]. Geht man weiter von einem homogenen Intensitätsprofil innerhalb des VOI aus, lässt sich die Zählrate der gestreuten Photonen \dot{N}_S durch

$$\dot{N}_S = \dot{n}_0(E) \delta E \cdot A_{\text{VOI}} \cdot n_a \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \delta\Omega \cdot d \cdot \exp(-\mu d) \quad (2.19)$$

¹Bei einem rekonstruktiven Verfahren muss V_{VOI} durch das Rekonstruktionsvolumen eines Voxels ersetzt werden.

²Diese Verteilungsfunktion weist im Allgemeinen eine Ortsabhängigkeit auf, vgl. Kapitel 3.

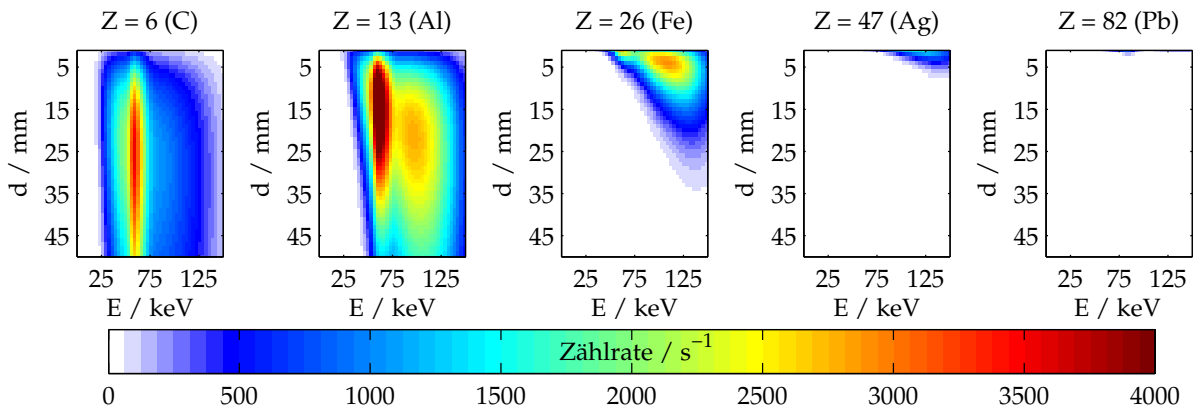


Abbildung 4: Zählraten aufgrund kohärenter Streuung für verschiedene Materialien in Abhängigkeit der Materialstärke d . Berechnung bei einem Streuwinkel von $\Theta = 3,5^\circ$, einer Bandbreite von $\delta E/E = 6\%$ und einem Streu-Raumwinkel von $\delta\Omega = 1 \cdot 10^{-3}$ sr. Das Röhrenspektrum $n_0(E)$ entstammt einer Wolfram-Drehanoden Röntgenröhre ($I = 10$ mA, $U = 150$ kV) und wurde durch Messung in der Standard-Nadelstrahl-Anordnung (vgl. Kapitel 5, Divergenz $1 \cdot 10^{-6}$ sr) ermittelt.

bestimmen. Dabei entspricht A_{VOI} der Querschnittsfläche des VOI und d gibt die longitudinale Ausdehnung (z -Richtung) eines sich innerhalb des VOI befindlichen Objekts an. Für den Fall von kohärenter Streuung gemäß Gleichung 2.3 sind die Zählraten bei verschiedenen Elementen in Abhängigkeit der Materialstärke exemplarisch nach Gleichung 2.19 in Abbildung 4 für typische Anlagenparameter dargestellt.

2.2. Röntgenstreubildgebung

Die zerstörungsfreie Streubildgebung an ausgedehnten Objekten mittels EDXRD wird durch die Verwendung einer Vorwärtsstreugeometrie ermöglicht. Wie in Abbildung 5 schematisch gezeigt ist, können Streubilder im einfachsten Fall mithilfe eines Rasterscans aufgenommen werden. Methoden zur Parallelisierung der Datenakquisition zwecks Minimierung der Aufnahmedauer lassen sich in rekonstruktive und nicht-rekonstruktive („direkte“) Ansätze unterteilen. Bei rekonstruktiven Verfahren wird ferner zwischen tomographischer und blendenbasierter Datenakquisition unterschieden. Im Folgenden wird über den Stand von Wissenschaft und Technik im Bezug auf direkte und rekonstruktionsbasierte XDI-Verfahren berichtet.

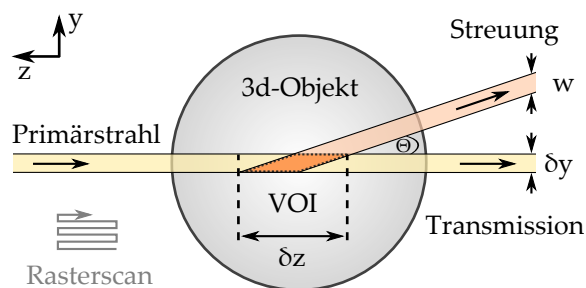


Abbildung 5: Typische Vorwärtsstreugeometrie bei EDXRD-basierten XDI-Verfahren. Bildgebung wird durch einen Rasterscan ermöglicht.

2.2.1. Direkte Verfahren

Unter direkten Verfahren sollen Verfahren verstanden werden, in denen Streustrahlung unter einem konstanten Streuwinkel Θ volumenselektiv durch Kollimation energiedispersiv detektiert wird. Durch die Kenntnis von Streuwinkel und Energie lassen sich die detektierten Streudaten mittels Gleichung 2.14 direkt als Funktion des Impulsübertrags und des Ortes $\vec{N}(\chi, y, z, q)$ darstellen. Typischerweise werden die direkten Verfahren nach ihrem Parallelisierungsgrad der Streudatenakquisition klassifiziert.

Test- und Laborsysteme, welche - wie in Abbildung 5 dargestellt - das Objekt punktwise abrastern, weisen keine örtliche Parallelisierung auf. Erste kommerziell erhältliche Systeme erlauben durch die Verwendung eines segmentierten Halbleiterdetektors hingegen, Streuung entlang einer Linie (1d Parallelisierung) zu registrieren[18]. Die parallele Akquisition der Daten aus einer Ebene im Objekt (2d Parallelisierung) kann mit einer Fächerstrahlgeometrie erreicht werden. Zur Minimierung der Kollimator- und Detektorgröße werden Systeme mit speziellen Multifokus-Röntgenröhren ausgestattet. Dies eröffnet die Möglichkeit eine mehrfach invertierte Fächerstrahlgeometrie (MIFB)[59] zu realisieren: Wie in Abbildung 6 dargestellt, werden primärseitig von jedem Fokuspunkt der Röntgenröhre zwei Fächer diskreter Nadelstrahlen in Richtung eines gemeinsamen Detektorarrays kollimiert. Eine sequenzielle Aktivierung der einzelnen Foki bewirkt entsprechend eine Abtastung des Objekts entlang der y-Achse unter Verwendung weniger energiedispersiver Detektorelemente. Ein dreidimensionaler Scan wird durch die Translation des Objekts entlang der x-Achse erreicht.

Die Kernanwendung derartiger kommerzieller Systeme ist die Gefahrstoffdetektion bei der Inspektion von aufgegebenem Reisegepäck an Flughäfen. Durch den Messzeitvorteil einer MIFB-basierten Geometrie wird erstmals auch die Untersuchung von Handgepäck und die Klassifizierung von Flüssigkeiten bei der Sicherheitskontrolle ermöglicht[19]. Dabei stellt insbesondere die Falschalarmrate der Systeme eine wichtige Kenngröße dar, welche durch mehrere Parameter beeinflusst wird: Die Korngrößenverteilung oder eine mögliche Texturierung der Probe kann zu sog. Peakinstabilitäten führen[60], sodass die Reproduzierbarkeit von Peakform, -intensität und

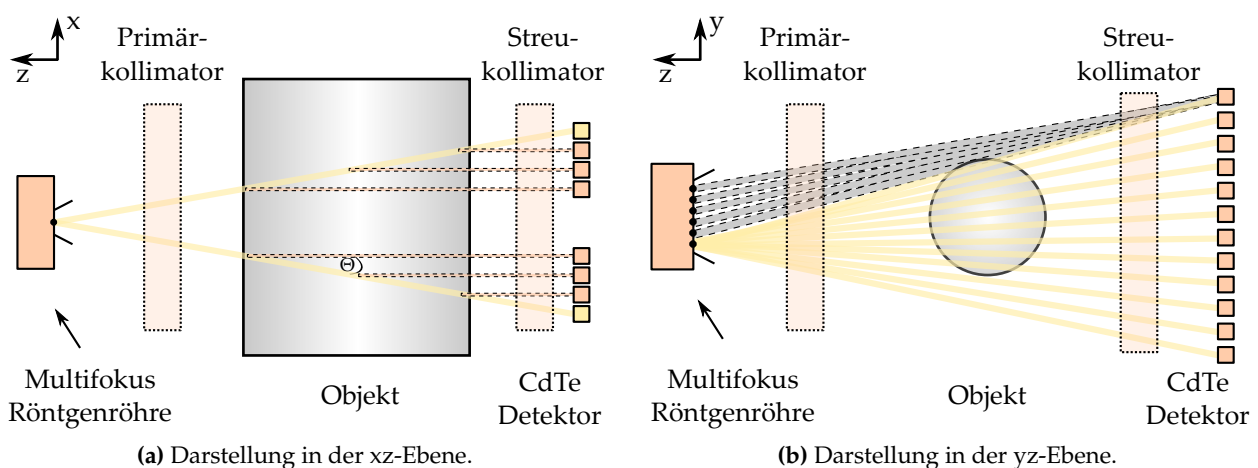


Abbildung 6: Schematischer Aufbau eines MIFB-basierten EDXRD-Systems. Es wird parallel Streustrahlung aus Voxeln in der yz-Ebene detektiert. Für einen dreidimensionalen Scan muss das Objekt entlang der x-Achse verschoben werden.

-position nicht mehr gegeben ist. Entsprechend Gleichung 2.17 muss das Detektionsvolumen, d.h. die Ortsauflösung des Systems, bzw. die Größe des detektierten Kreissegments $\delta\varphi$ eines Debye-Scherrer Ringes, angepasst werden. Andererseits beeinflussen sowohl die spektrale als auch die räumliche (aufgrund von Teilvolumeneffekten) Auflösung ebenfalls die Detektionszuverlässigkeit des Systems. Während die laterale Ortsauflösung in der xy-Ebene durch die Primärkollimatoreigenschaften bestimmt ist, hängt die longitudinale Auflösung in z-Richtung sowohl von der Primär- als auch von der Streukollimatorgeometrie ab. Die spektrale Auflösung ist nach Gleichung 2.18 unter anderem vom Beugungswinkel Θ und der Winkelunschärfe $\delta\Theta$ des gesamten Systems - und damit insbesondere von den Kollimatoren - abhängig. Zur Optimierung dieser Systemgrößen kann der Quantendurchsatz eines Detektorelements für einen gegebenen Röntgenreflex mittels Gleichung 2.15 durch Einsetzen der Bragg-Bedingung und unter Verwendung von $\delta E = \frac{1}{2} E \cot(\Theta/2) \delta\Theta$ in Kleinwinkelnäherung erster Ordnung zu

$$\dot{N}_P \propto \dot{n}_0(E) \eta_{\text{Det}}(E) A(E) \cdot \delta\Theta \cdot \frac{\delta\varphi}{2\pi} \frac{m d_{hkl}^2 |F_{hkl}|^2}{V_C^2} \cdot V \quad (2.20)$$

bestimmt werden. Entsprechend ist die integrale Zählrate \dot{N}_P von der Größe des streuenden Volumens in x-, y- bzw. z-Richtung und der Winkelauflösung des Systems linear abhängig. Für Systeme mit $\delta E_{\text{Det}}/E \ll \delta\Theta/\Theta$ ändert sich die Streuintensität bei gleichbleibender relativer Linienauflösung ebenfalls linear mit dem Streuwinkel.

Auch wenn die kommerzielle Nutzung direkter XDI-Systeme derzeit auf die Gefahrstoffdetektion beschränkt ist, wurden bereits früh weitere Anwendungen, etwa die der zerstörungsfreien Prüfung[61], die der archäometrischen Untersuchungen[62] oder die der Kontrollen in der Nahrungsmittelindustrie[63] aufgezeigt. Durch aktuelle Entwicklungen bei energiedispersiven Pixeldetektoren für harte Röntgenstrahlung werden neue Strahltopologien für die Streubildgebung mit konventionellen Röntgenröhren ermöglicht. So sind bereits CdTe-basierte Pixeldetektoren mit einer Energieauflösung von < 1 keV im Energiebereich 4 – 200 keV und einer Pixelgröße von 250 μm kommerziell verfügbar - Konfigurationen mit bis zu 400x400 Pixeln wurden demonstriert[64]. Dieser Detektortyp erlaubt es durch die pixellierte Röntgendiffraktometrie (PixD) 2d-Streubildgebung mittels Lochkameraabbildung durchzuführen. Materialwissenschaftliche Fragestellungen, wie etwa die Darstellung der Kristallorientierungen an Schweißnähten[65], wurden erstmals mit einer konventionellen Mikrofokus-Röntgenröhre ($U = 160$ kV, $I = 0,375$ mA) demonstriert. Medizinische Anwendungen zwecks Tumordiagnostik bei der Mammographie werden diskutiert[66][67]. Im Spezialfall flacher Proben wird bei Verwendung einer Nadelstrahlanordnung aufgrund der hohen Pixeldichte und geringen Pixelgröße kein Streukollimator für die EDXRD benötigt. Dies ermöglicht die punktweise Probenuntersuchung in portablen Systemen mit kleinsten Röntgenröhren ($U = 50$ kV, $I = 80$ μA) bei Aufnahmedauern von 0,5 s zur Materialidentifikation[68].

Auf den ersten Blick scheint die Erhöhung des Quantendurchsatzes durch Parallelisierung eine rein technische Herausforderung darzustellen. Es ist allerdings anzumerken, dass die geometrischen Restriktionen aufgrund der Streugeometrie (Verkleinerung von $\delta\varphi$, Gleichung 2.20) dazu führen, dass eine Verkürzung der Scandauer unterproportional mit der Anzahl der Detektorelemente skalieren kann. Als weiteres Problem ist die intrinsische Anisotropie der räumlichen Auflösung direkter Verfahren zu nennen. Die räumliche Auflösung in Strahlrichtung Δz ist aufgrund der Vorwärtsstreugeometrie deutlich geringer als die räumliche Auflösung senkrecht zur Strahlrichtung (transversal). Gemäß Abbildung 5 ist $\delta z = (\delta y + w) / \tan(\Theta)$ und für $\delta y \approx w$ folgt

mit $\Theta < 10^\circ$ eine um $\delta z > 10 \cdot \Delta y$ verringerte longitudinale Auflösung. Resultierende Teilvolumeneffekte können sich negativ auf die Detektionsquote des Systems auswirken. Ansätze zur Auflösungsverbesserung durch Mehrfachmessungen werden in der Literatur beschrieben[69][70], führen jedoch nicht zu isotroper Auflösung in allen Raumrichtungen.

2.2.2. Computertomographische Ansätze

Im Gegensatz zu direkten XDI-Verfahren wird bei der kohärenten Streutomographie (CSCT) die Streustrahlung aus Objektbereichen entlang einer Linie überlagert akquiriert und das Streubild $\dot{N}(y, z, q)$ durch eine computerbasierte Rekonstruktion ermittelt. Wie in Abbildung 7 a) dargestellt, wird der Streuwinkel Θ durch die Position a des energiedispersiven Detektors entlang der x -Achse und dem Ort der Streuung entlang der Linie l über $\tan(\Theta) = a/l$ festgelegt. In Kleinwinkelnäherung erster Ordnung kann der Impulsübertrag durch $q \approx Ea/(2\hbar cl)$ berechnet werden. Entsprechend Abbildung 7 b) werde durch α das betrachtete Strahlenbündel des Fächerstrahls in der yz -Ebene indiziert und durch γ die Rotation des Objekts um die x -Achse festgelegt. Die Zählrate der Projektionsstreudaten ist dann durch Integration von Gleichung 2.19 entlang des Zentralstrahls durch

$$\dot{N}_{\text{proj}}(\gamma, \alpha, E) \propto \frac{\int \dot{N}_s(\gamma, \alpha, l, q = \frac{Ea}{2\hbar cl}) dl}{A(\gamma, \alpha, E)} \quad (2.21)$$

gegeben, wobei die Schwächung $A(\gamma, \alpha, E)$ mithilfe der Transmissionsdetektoren unter $\Theta = 0^\circ$ abgeschätzt wird. Die aufgenommenen Projektionsspektren $\dot{N}_{\text{proj}}(\gamma, \alpha, E)$ weisen aufgrund des variablen Streuwinkels eine spektrale Verschmierung auf. Für die Rekonstruktion des Streubildes muss daher eine Inversion im dreidimensionalen xyq -Raum erfolgen. Analog zu den Rekonstruktionsverfahren in der Transmissionscomputertomographie (vgl. Unterabschnitt 2.3.2) lässt sich die

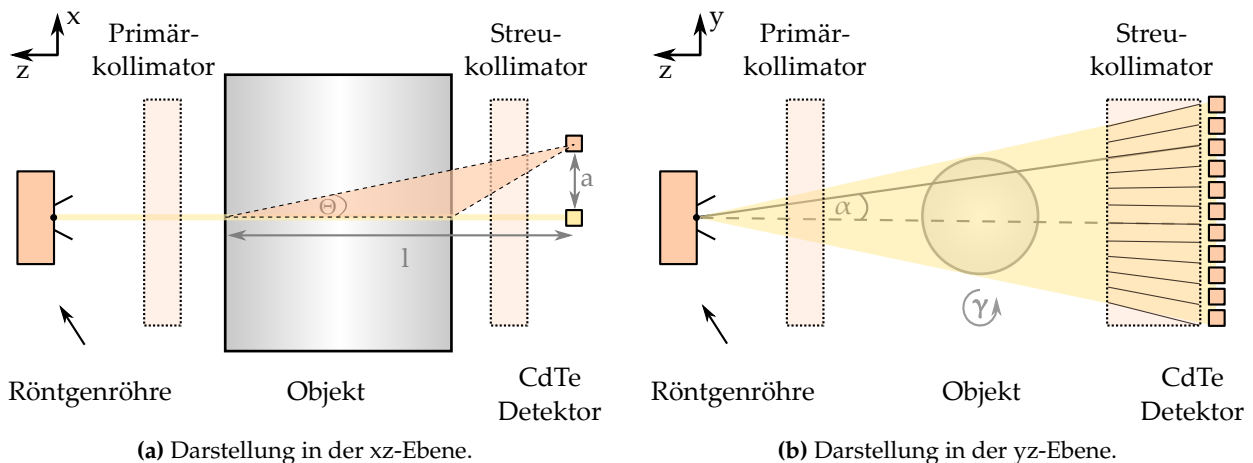


Abbildung 7: Schematischer Aufbau eines CSCT-basierten EDXRD-Systems. Es wird parallel Streustrahlung aus Voxeln entlang von Linien in der yz -Ebene detektiert. Der zur Schichtrekonstruktion benötigte Datensatz ergibt sich durch Rotation des Objekts um die x -Achse. Für einen 3d-Scan muss das Objekt entlang der x -Achse verschoben werden.

Inversion mittels einer 3d gefilterte Rückprojektion erzielen[71] und ist durch

$$\dot{N}_S(y, z, q) \propto \int_0^{2\pi} \int_V \dot{N}_{\text{proj}}(\alpha, \gamma, E) \otimes w(\alpha) \delta(y' - y) \delta(z' - z) \delta(q' - q) dy' dz' dqd\gamma \quad (2.22)$$

gegeben, wobei $V = V(y, z, q)$ dem Integrationsvolumen der Probe und w einem gewichteten Hochpassfilter entspricht. Dabei sind y' und z' analog wie in Unterabschnitt 2.3.1 mit y und z verknüpft, sodass die Integration im Ortsraum nur entlang des zugehörigen Zentralstrahls durchgeführt wird (örtliche Rückprojektion). Durch den Zusammenhang $q \approx Ea/(2hcl)$ wird die gesamte Rückprojektion im dreidimensionalen yzq -Raum allerdings entlang von hyperbolisch gekrümmten Linien ausgeführt. Ein vierdimensionales Streubild $\dot{N}_S(x, y, z, q)$ kann durch die sequenzielle Messung von Schichtbildern entlang der x -Achse gewonnen werden.

Im Gegensatz zu den direkten Verfahren wird durch die Rekonstruktion im CSCT-Verfahren eine isotrope Ortsauflösung im yz -Raum erzielt. Sie ist durch den Abstand der Lamellen des divergenten Sollerkollimators limitiert und liegt typischerweise im Millimeterbereich, wohingegen die Ortsauflösung in x -Richtung durch die Schlitzblendenweite des Primärkollimators festgelegt wird. Die Auflösung im Impulsübertragungsraum ist von geometrischen Größen, wie Detektor- und rekonstruierte Voxelgröße, sowie der spektralen Auflösung des energiedispersiven Detektors abhängig. Unter Verwendung eines CdTe-Detektors wurden Auflösungen von $\delta q/q = 6\%$ bei einer Ortsauflösung von 4,5 mm (@0.04 der Modulationsübertragungsfunktion (MTF)) demonstriert[20]. Durch die Verwendung mehrerer Detektorelemente entlang der x -Achse kann der Quantendurchsatz eines CSCT-Systems derart gesteigert werden, dass die parallele Akquisition von Transmissions- und Streudaten in einem Gantry basierten Aufbau ermöglicht wird[22].

Der rekonstruierbare Impulsübertragungsbereich $q_{\min} \approx E_{\min}\Theta_{\max}/(2hc) \dots q_{\max} \approx E_{\max}\Theta_{\min}/(2hc)$ ist durch den variablen Streuwinkel gegenüber direkten Verfahren eingeschränkt. Ebenso liefern die Rohdaten aufgrund der Ortsabhängigkeit des Streuwinkels und der daraus resultierenden spektralen Verschmierung in den akquirierten Beugungsspektren, vgl. Gleichung 2.21, keinen direkten Informationsgewinn. Die dreidimensionale Rekonstruktion der Streudaten setzt zudem eine isotrope Streucharakteristik des Probenmaterials voraus. Eine Verletzung dieser Voraussetzung ist beispielsweise bei grobkristallinen bzw. texturierten Materialien gegeben - Streifenartefakte und Geisterpeaks können als Folge im rekonstruierten Streubild beobachtet werden[72]. Da bei Fächerstrahl basierten CSCT-Systemen nur ein kleiner Anteil $\delta\varphi$ eines Debye-Scherrer Rings registriert wird, werden texturbedingte Artefakte begünstigt.

Durch medizinische Anwendungen motiviert, wurden Ansätze zur Streubildgebung mittels Gantry basierten CT-Geometrien bereits frühzeitig verfolgt[73]. Es konnte gezeigt werden, dass die für eine Aufnahme erforderliche Dosis bei einer Auflösung von 10 mm etwa 20 mSv beträgt und so mit einem konventionellen Thorax CT vergleichbar wird[23]. Insbesondere die sogenannte „virtuelle“ Brustgewebeuntersuchung zur Früherkennung von bösartigen Tumorerkrankungen ist Gegenstand aktueller Forschung[74][75][76].

Im Rahmen der vom US amerikanischen Heimatschutzministeriums geförderten ALERT[77] Kolaboration werden aktuell auch Anwendungen zur Sprengstoffdetektion erforscht[78]. Die verfolgten Ansätze basieren dabei auf der Verwendung algebraischer Rekonstruktionsverfahren (vgl. Unterabschnitt 2.3.2). Hierbei wird das zu rekonstruierende Streubild $\dot{N}_S(y, z, q)$ diskretisiert als Vektor $\vec{f} \in \mathbb{R}^{N_x^2 \cdot N_q \times 1}$ aufgefasst, welcher über die Systemmatrix $R \in \mathbb{R}^{M \times N_x^2 \cdot N_q}$ mit den Messdaten $\vec{p} \in \mathbb{R}^{M \times 1}$ verknüpft ist. Die Inversion des resultierenden Gleichungssystems wird über die

Minimierung einer Zielfunktion

$$\vec{f} = \arg \min_{\vec{f}} J(\vec{f}) = \arg \min_{\vec{f}} \|\vec{p} - R\vec{f}\|_2^2 + \lambda\phi(\vec{f}) \tag{2.23}$$

erreicht. Die Zielfunktion setzt sich aus dem Datenterm und einem Strafterm $\phi(\vec{f})$ zusammen. Bei einer l_1 -Norm basierten Wahl des Strafterms zeigt der Vergleich mit konventionellen Rekonstruktionsmethoden insbesondere eine verbesserte Performance bei der Rekonstruktion von Kanten. Eine geringere Empfindlichkeit bzgl. Rauschen in den Eingangsdaten wird beobachtet[79].

2.2.3. Coded Aperture

Wie bei den computertomographischen Ansätzen, wird auch bei Coded-Aperture basierten XDI-Verfahren (CAXDI)[80] das Streubild durch eine computergestützte Rekonstruktion ermittelt. Das Verfahren ist mit dem Lochkameraprinzip zur Abbildung von Streustrahlung (vgl. direkte Verfahren in Unterabschnitt 2.2.1) vergleichbar, wobei die Lochblende durch eine kodierte Maske mit einem räumlich modulierten Muster ersetzt wird. Primärseitig können verschiedene Strahltopologien, wie etwa Nadel-[81], Fächer-[82] oder Teilkegelstrahl[83], verwendet werden. Wie in Abbildung 8 dargestellt, wird hier das Funktionsprinzip des relativ jungen CAXDI-Verfahren stellvertretend anhand einer Fächerstrahlgeometrie erläutert. Die integrale Streuleistung, welche in einem Detektorpixel an der Stelle \vec{r}_{det} detektiert wird, lässt sich durch

$$\dot{N}_{proj}(\vec{r}_{det}, E) \propto \int \dot{n}_0(E) \cdot A(E, \vec{r}', \vec{r}_{det}) \cdot \frac{d\sigma(E, \vec{r}')}{d\Omega} \delta\Omega \cdot t(\vec{r}', \vec{r}_{det}) d\vec{r}' \tag{2.24}$$

beschreiben. Dabei wird die Integration über das beleuchtete Objektvolumen ausgeführt. Der auftretende differentielle Wirkungsquerschnitt ist als Gesamtstreuquerschnitt kohärenter und inkohärenter Streuung zu verstehen. $\delta\Omega$ gibt den Raumwinkel, unter dem das zugehörige Detekto-

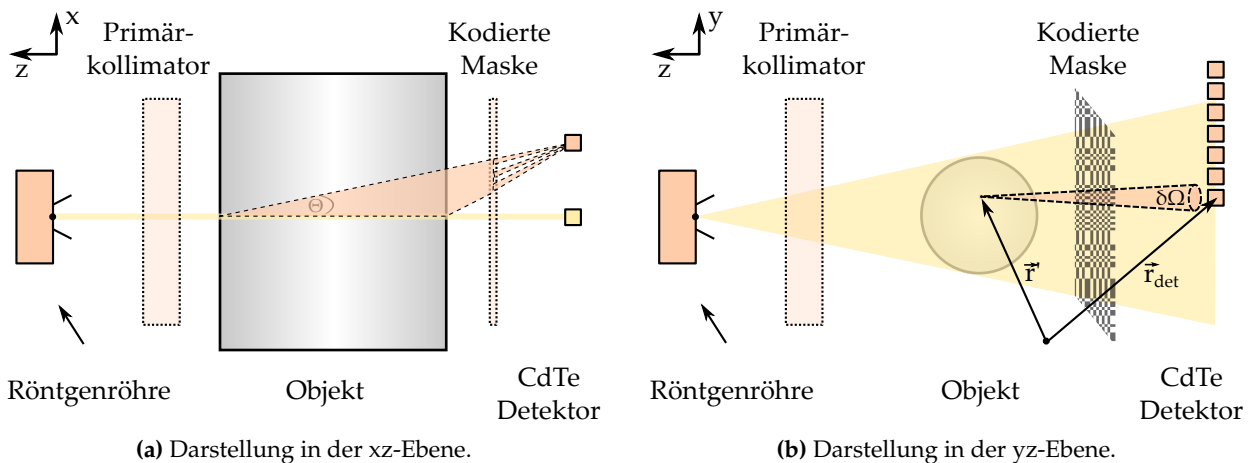


Abbildung 8: Schematischer Aufbau eines CAXDI basierten Systems in einer Fächerstrahlgeometrie. Mit einem energiedispersiven Zeilendetektor wird Streustrahlung aus einer Objektschicht in der yz-Ebene detektiert. Die zulässigen Streuwinkel sind aufgrund der kodierte Maske vom Ort der Streuwechselwirkung abhängig. Für einen dreidimensionalen Scan muss das Objekt entlang der x-Achse verschoben werden.

relement sichtbar ist, an und $t(\vec{r}', \vec{r}_{\text{det}})$ entspricht der Transmission der verwendeten kodierten Maske. Zur Rekonstruktion des Streubildes wird Gleichung 2.24 diskretisiert und ein Minimierungsproblem wie in Gleichung 2.23 formuliert. Die Inversion wird durch eine 3d algebraische Rekonstruktion, ähnlich eines Expectation-Maximization Verfahrens, mit Nebenbedingungen zur Forcierung von stückweise konstanten Funktionsverläufen im Ortsraum und stetigen Funktionen im q -Raum durchgeführt[84]. Durch die Annahme, dass das Objekt im dreidimensionalen yzq -Raum dünn besetzt repräsentiert werden kann, wird eine Dimensionsreduktion ermöglicht. Das dreidimensionale Streubild $\dot{N}(y, z, q)$ kann durch einen zweidimensionalen Datensatz $\dot{N}_{\text{proj}}(y, E)$ rekonstruiert werden. Ein vierdimensionales Streubild $\dot{N}(x, y, z, q)$ kann wie beim CSCT durch die sequenzielle Messung von Schichtbildern entlang der x -Achse akquiriert werden.

Durch den Wegfall der konventionellen Streukollimatoren wird ein um Größenordnungen höherer Quantendurchsatz erzielt. Bei gewöhnlichen Strahlparametern ($U = 170 \text{ kV}$, $I = 10,5 \text{ mA}$) erlauben Masken mit einer Transmission³ von 40 % die Aufnahme eines räumlich zweidimensional aufgelösten Streubildes in weniger als einer Sekunde[85]. Die erzielte Ortsauflösung ist dabei mit $\delta y = 2 \text{ mm}$ in y -Richtung und $\delta z = 13 \text{ mm}$ in z -Richtung zwar mit der eines CSCT-Systems vergleichbar, jedoch ist die Auflösung im q -Raum mit $\delta q/q = 14 \%$ deutlich verringert. Die Ortsauflösung lässt sich geometrisch, d.h. ohne Berücksichtigung von Rauschen, durch

$$\delta y = v_y \cdot \frac{\text{ODD}}{\text{MDD}} \quad \delta z = \frac{v_x}{L} \cdot \frac{\text{ODD}^2}{\text{MDD}} \quad (2.25)$$

im Objektzentrum abschätzen[86, Seite 76 ff.]. ODD bzw. MDD bezeichnen dabei den Objekt-Detektor bzw. Masken-Detektor Abstand, v ist die Schlitzweite der Maske und L die Länge der Detektorzeile. In Kleinwinkelnäherung lässt sich hieraus die Winkelauflösung

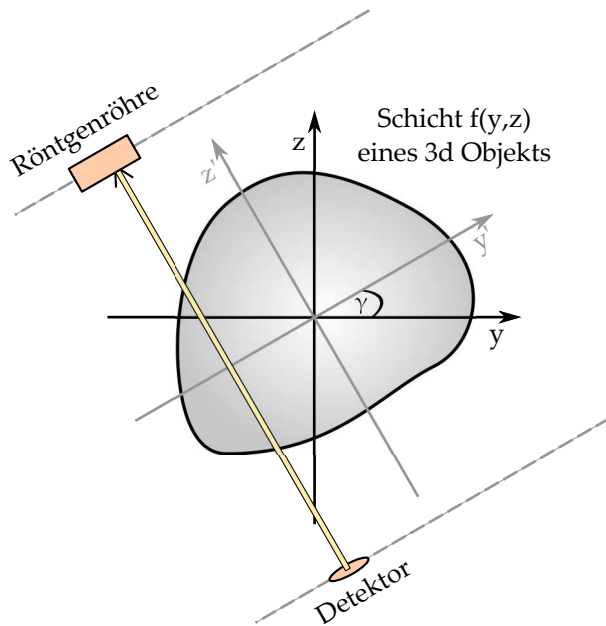
$$\delta\Theta \approx \frac{v}{\text{MDD}} \cdot \left(1 + \frac{y}{L}\right) \quad (2.26)$$

des Systems berechnen[86, Seite 104 ff.], wobei y die Position entlang des Zeilendetektors beschreibt. Auswirkungen durch inkohärente Streuung, Mehrfachstreuung oder nicht-isotropes Streuverhalten der Probe auf die Systemeigenschaften sind zu untersuchen und sind Gegenstand aktueller Forschung. Ebenfalls die Untersuchung komplexer Objekte mit stark schwächenden Materialien ist vorzunehmen. Aufgrund der Vielzahl an möglichen Streupfaden gestaltet sich eine adäquate Absorptionskorrektur der Daten als schwierig - es sind keine Verfahren aus der Literatur bekannt. Aktuell wird die Anwendbarkeit des Verfahrens für die Sprengstoffdetektion ebenfalls im Rahmen des ALERT-Programms[77] untersucht.

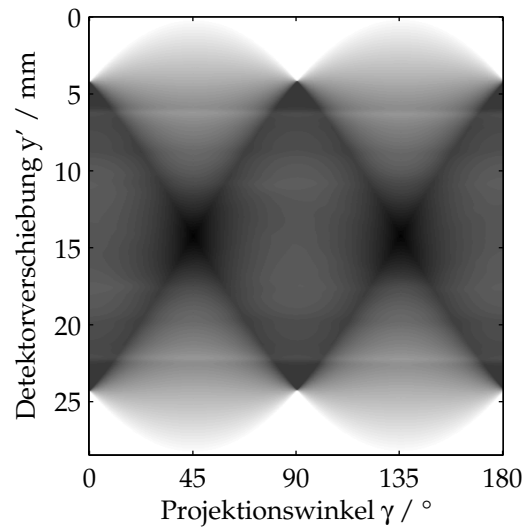
2.3. Computertomographie

In diesem Abschnitt soll auf Grundlagen und Trends der Transmissions-Computertomographie eingegangen werden. Dazu wird zunächst die Radon-Transformation sowie deren direkte Inversion anhand der Parallelstrahl-Geometrie definiert. Hiermit lassen sich auch fächerstrahlbasierte Systeme, wie sie beispielsweise zur Streustrahlreduzierung bei der zerstörungsfreien Prüfung großer Objekte oder in medizinischen Multi-Slice-Systemen mit Flying Focus Technik[87] Anwen-

³Die Transmission einer kodierten Maske ist als Anteil der Fläche, welche die Strahlung ungeschwächt passieren lässt (Durchlass), von der Gesamtfläche der Maske definiert.



(a) Koordinatensysteme bei der Abtastung des zwei-dimensionalen Radon-Raums durch Parallelprojektionen; $y'z'$ systemgebunden, yz objektfest.



(b) Exemplarisches Sinogramm eines Polkontaktes einer Li-Ionen Akkuzelle. Rekonstruktion in Abbildung 10 gezeigt.

Abbildung 9: Die Abtastung des 2d-Radon-Raums durch Parallelprojektionen $p(\gamma, y')$ geschieht in Nadelstrahlanordnung, wie in a) gezeigt, durch sukzessive Translation und Rotation des Röntgensystems relativ zur Probe. Stellt man die Projektionsdaten in einem kartesischen Koordinatensystem wie in b) dar, spricht man von einem Sinogramm.

dung finden[4], beschreiben. Zudem bildet dieses Akquisitionsschema die Grundlage des in Kapitel 5 beschriebenen EDXRD-CT Verfahrens.

Die Aufnahme von konventionellen, d.h. auf Röntgenschwächung basierten, Schichtbildern geschieht in dieser Arbeit hingegen mit einem Kegelstrahl-CT (CBCT). Diese, als modernste geltende CT-Generation[88], wird gesondert erläutert. Neben dem gängigen Rekonstruktionsverfahren der gefilterten Rückprojektion werden ebenfalls Ansätze der algebraischen Rekonstruktion vorgestellt.

2.3.1. Radon-Transformation

Mathematisch formuliert entspricht die Computertomographie der Bestimmung einer Funktion $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ (Bild) durch ihre Integralwerte entlang gerader Linien (Projektionen). Im Fall der Transmissions-Röntgentomographie ist das Bild dabei durch die orts aufgelösten Schwächungskoeffizienten $\mu(y, z)$ gegeben. Die zugehörigen Projektionen ergeben sich beim Durchstrahlen eines Objekts mittels Gleichung 2.1 zu

$$p = \log \left(\frac{I_0}{I} \right) = \int \mu(y, z) dl. \tag{2.27}$$

Für die Streutomographie hingegen können die differentiellen Streuwirkungsquerschnitte als Bildinhalt von $f(y, z)$ identifiziert werden (vgl. Kapitel 4). Die systematische Aufnahme der Projektionsdaten in einer Nadelstrahl-Geometrie wird in Abbildung 9 a) veranschaulicht. Es werden

jeweils Parallelprojektionen entlang der y' -Achse für einen Satz von Drehwinkeln $\gamma \in [0, \pi]$ akquiriert⁴. Mithilfe der Abbildung lässt sich das ortsfeste und das rotierte Bezugssystem durch $y = y' \cos(\gamma) - z' \sin(\gamma)$ bzw. $z = y' \sin(\gamma) + z' \cos(\gamma)$ in Beziehung setzen. Die kontinuierliche Abtastung der Projektionen kann entsprechend durch

$$\mathcal{R}(f(y, z)) = p(\gamma, y') = \int_{-\infty}^{\infty} f(y' \cos(\gamma) - z' \sin(\gamma), y' \sin(\gamma) + z' \cos(\gamma)) dz' \quad (2.28)$$

beschrieben werden. $\mathcal{R}(f(y, z))$ wird Radon-Transformation der Funktion f genannt. Für stückweise stetige Funktionen mit $f(y, z) = 0$ für $y^2 + z^2 > R_{\max}^2$ ist Gleichung 2.28 wohldefiniert. Dies ist bei der Computertomographie durch die endliche Ausdehnung des zu untersuchenden Objekts gesichert. Die Darstellung der Radon-Transformation, d.h. der Projektionsdaten $p(\gamma, y')$, erfolgt üblicherweise in kartesischen- oder polaren Koordinaten. Die kartesische Darstellung, wie sie beispielhaft in Abbildung 9 b) gezeigt ist, wird als Sinogramm bezeichnet. Die direkte Inversion von Gleichung 2.28 kann mithilfe des Fourier-Scheiben-Theorems formuliert werden. Man betrachtet dazu die eindimensionale Fourier-Transformation der Projektionen $p(\gamma, y')$ bei konstantem Winkel γ :

$$\begin{aligned} P_{\gamma}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} p(\gamma, y') \cdot \exp(-2\pi i \omega y') dy' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(y, z) \cdot \exp(-2\pi i (\omega \cos(\gamma) y + \omega \sin(\gamma) z)) dy dz \end{aligned} \quad (2.29)$$

Dabei wurden die gestrichelten Koordinaten (y', z') mittels Substitution durch (y, z) ersetzt. Damit entspricht $P_{\gamma}(\omega)$ der Fourier-Transformation des Bildes $f(y, z)$ entlang einer Ursprungsgeraden unter dem Winkel γ . Das zweidimensionale Fourier-Spektrum von f lässt sich durch scheinweises Einsortieren von $P_{\gamma}(\omega)$ in Polarkoordinaten rekonstruieren.

2.3.2. Rekonstruktion

Bis heute ist die gefilterte Rückprojektion (FBP) als gängigstes Verfahren zur Rekonstruktion realer Messdaten anzusehen[89]. Neben der exakten zweidimensionalen Rekonstruktion im Falle einer Fächerstrahlgeometrie[90] wird auch die exakte dreidimensionale Rekonstruktion, wie beispielsweise beim Kegelstrahl-basierten Helix-CT[91] oder bei Systemen mit komplizierteren Quelledetektor-Trajektorien[92], ermöglicht. Die FBP bietet insbesondere im Hinblick auf Implementierung und Rechenaufwand Vorteile und wird daher im Folgenden exemplarisch anhand der Parallelstrahlgeometrie erläutert. Neben der gefilterten Rückprojektion werden auch regularisierende algebraische Verfahren beschrieben. Diese iterativen Verfahren gewinnen immer mehr an Bedeutung, da sie eine geringere Rauschempfindlichkeit besitzen und höhere Rekonstruktionsgüten erzielt werden können[93].

⁴In der Skizze ist das ortsfeste Koordinatensystem exemplarisch mit dem Objekt verknüpft, sodass bei der Datenaufnahme das komplette System, bestehend aus Röntgenröhre und Detektor, verschoben bzw. rotiert wird. Die Translation bzw. Rotation des Objekts unter Verwendung eines ruhenden Röntgensystems kann äquivalent beschrieben werden.

Gefilterte Rückprojektion

Die gefilterte Rückprojektion ergibt sich direkt mithilfe des Fourier-Scheiben-Theorems. Dazu wird das Bild $f(y, z)$ durch seine zweidimensionale Fouriertransformation $F(u, v)$ in Polarkoordinaten ausgedrückt und scheibenweise mit den eindimensionalen Fouriertransformationen der Radon-Projektionen p identifiziert:

$$\begin{aligned}
 f(y, z) &= \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega \cos(\gamma), \omega \sin(\gamma)) \cdot \exp(2\pi i \omega (y \cos \gamma + z \sin(\gamma))) \cdot \omega d\omega d\gamma \\
 &= \int_0^{2\pi} \underbrace{\left(\int_{-\infty}^{\infty} |\omega| \cdot P_{\gamma}(\omega) \cdot \exp(2\pi i \omega y') d\omega \right)}_{=h_{\gamma}(y')} d\gamma
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

Das Ergebnis lässt sich derart deuten, dass das eigentliche Bild durch eine „Rückverschmierung“ der Funktionswerte von $h_{\gamma}(y')$ gewonnen werden kann. Dabei entspricht $h_{\gamma}(y')$ lediglich den mittels Rampenfilter gefilterten einzelnen Projektionen, so dass zur Rekonstruktion die spaltenweise gefilterten Werte des Sinogramms in Richtung der Röntgenquelle rückprojiziert und aufsummiert werden müssen. Aufgrund der messtechnisch limitierten Detektorbreite und des Rauschens in den Projektionsdaten, wird der Rampenfilter durch eine geeignete Fensterung modifiziert. Anwendungsspezifisch gilt es zwischen Filtern mit verstärkter Rauschunterdrückung (z.B. Blackman, Parzen) und mit verstärkter Kantenbetonung (z.B. „Ram-Lak“ oder Shepp-Logan) abzuwägen.

Unter Vernachlässigung der Fortpflanzung von Fehlern in den Eingangsdaten, kann die Anzahl der benötigten Messwerte für eine Rekonstruktion mittels gefilterter Rückprojektion abgeschätzt werden. In einem zu untersuchenden Objekt mit Objektdurchmesser d_{Obj} sollen Strukturen mit einem Durchmesser d_{min} aufgelöst werden können. Für die Anzahl der Messungen $n_{y'}$ entlang der y' -Achse gilt pro Projektion[94, Seite 206 ff.]

$$n_{y'} \approx 2d_{Obj}/d_{min}. \tag{2.31}$$

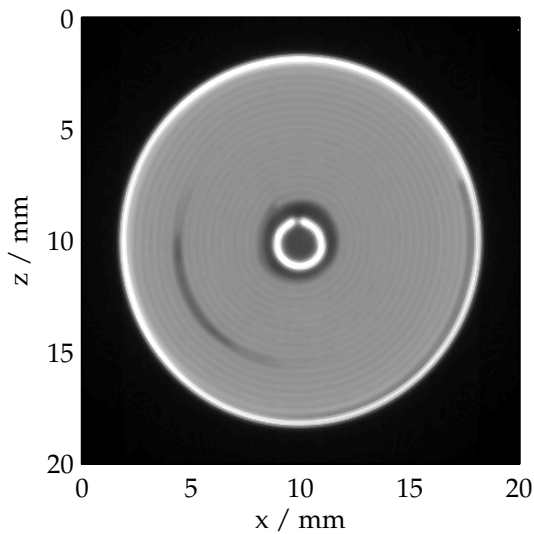
Die benötigte Zahl an Projektionen n_{γ} kann mittels Fourier-Scheiben-Theorem abgeschätzt werden. Im polaren Fourier-Raum ist die größte Unsicherheit $\delta\omega$ aufgrund des Abtastintervalls $\delta\gamma$ im maximalen Abstand ω_{max} durch $\delta\omega \approx \omega_{max} \cdot \delta\gamma$ bestimmt. Ausgedrückt durch die objektbezogenen Parameter liefert diese Abschätzung

$$n_{\gamma} = \pi/\delta\gamma \approx \pi\omega_{max}/\delta\omega = \pi d_{Obj}/d_{min} \approx n_{y'}. \tag{2.32}$$

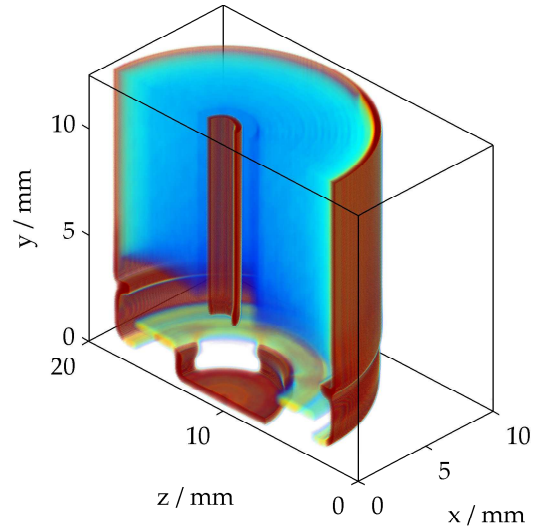
Bei Verwendung eines Zeilendetektors muss die Zahl der Projektionen also in etwa der Pixelanzahl des Detektorarrays entsprechen. Die Gesamtzahl der benötigten Messwerte ist folglich durch $n \approx n_{y'}^2 = 4d_{Obj}^2/d_{min}^2$ gegeben.

Algebraische Rekonstruktion

Bei der algebraischen Rekonstruktionsmethode wird, im Gegensatz zur gefilterten Rückprojektion, die Rekonstruktionsvorschrift mithilfe der diskretisierten Radon-Transformation über ein lineares Gleichungssystem formuliert. Die Rekonstruktion wird folglich durch die Lösung dieses



(a) Zweidimensionale Schichtrekonstruktion, Schnittbild aus 3d Datensatz extrahiert.



(b) Volumenrendering eines Ausschnitts des rekonstruierten 3d-Datensatzes mit isotroper Ortsauflösung.

Abbildung 10: Exemplarische Feldkamp-Davis-Kress (FDK)-Rekonstruktion eines Li-Ionen Akkumulators bei einer Voxelgröße von $50\ \mu\text{m}$. Vergleich zwischen Schichtrekonstruktion a) und dreidimensionaler Rekonstruktion mit Volumenrendering b).

Gleichungssystemes beschrieben. Für ein zu rekonstruierendes Bild $\vec{f} \in \mathbb{R}^{n_y \times n_y}$ mit n_y^2 Pixeln ergibt sich formal

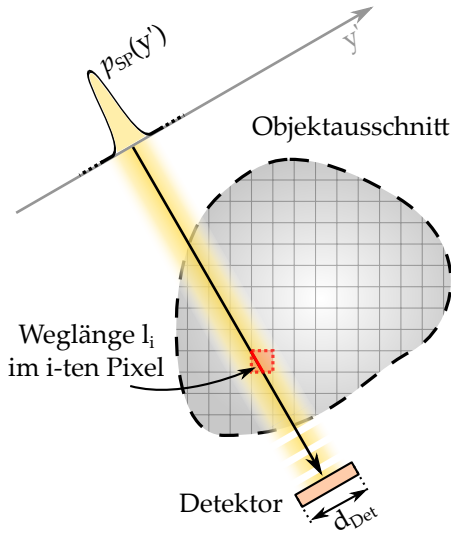
$$\mathcal{R}(f(y, z)) = p(\gamma, y') \rightarrow \vec{p} = R \cdot \vec{f} \quad (2.33)$$

für die Diskretisierung. Die Matrix $R \in \mathbb{R}^{n_m \times n_y^2}$ wird üblicherweise als Systemmatrix bezeichnet, $\vec{p} \in \mathbb{R}^M$ entspricht dem Messvektor. Abbildung 11 a) verdeutlicht den Diskretisierungsprozess und erlaubt es die Systemmatrix zu beschreiben. Der Beitrag eines Voxels f_j zur i -ten Projektion p_i ist durch die zugehörige Pfadlänge l_{ij} des Strahls durch dieses Voxel gegeben. Für einen idealen Nadelstrahl ergibt sich entsprechend

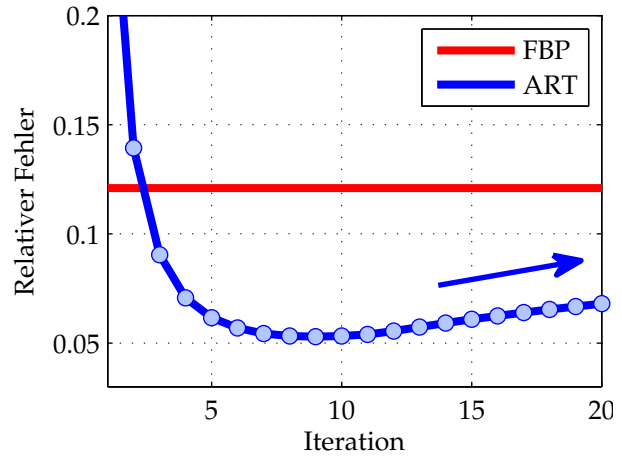
$$p_i^{\text{ideal}} = \sum_j l_{ij} \cdot f_j \quad (2.34)$$

für die Zusammensetzung der i -ten Projektion. Wird zusätzlich die Intensitätsverteilung der Röntgenstrahlen (Strahlprofil) $p_{SP}(y')$ berücksichtigt, lassen sich die Projektionen für reale Nadelstrahlen durch Integration über das Intensitätsprofil des Strahls berechnen. Die Integration läuft dabei über den gesamten Durchmesser der aktiven Detektorfläche d_{Det} .

$$p_i^{\text{real}} = \int_{d_{\text{Det}}/2}^{-d_{\text{Det}}/2} p_{SP}(y') \cdot p_i^{\text{ideal}}(y') dy' \quad (2.35)$$



(a) Diskretisierung der Radon-Transformation zur Modellierung der System Matrix R . Der gelb hinterlegte Bereich symbolisiert das Strahlprofil des realen Strahls.



(b) Rekonstruktionsgüte des Kaczmarz Algorithmus in Abhängigkeit der Iteration am Beispiel des Sinogramms (mit 5% normalverteiltem Rauschen kontaminiert) aus Abbildung 9 b).

Abbildung 11: Prinzip der algebraischen Rekonstruktion: Visualisierung der Systemmatrix Generierung a), sowie Darstellung der regularisierenden Wirkung der iterativen Kaczmarz Rekonstruktion mittels der Rekonstruktionsgüte b).

Im diskreten Fall liegt das Strahlprofil p_{SP} als N_{SP} -dimensionaler Vektor mit Einträgen $p_{SP,i}$ vor. Gleichung 2.35 geht nach numerischer Quadratur unter Verwendung der Mittelpunktsregel in

$$p_i^{real} = d_{Det}/N_{SP} \cdot \sum_{j=1}^{N_{SP}} p_{SP,j} \cdot p_{i,j}^{ideal} \quad (2.36)$$

über. Entsprechend sind die Matrixelemente von R durch die effektiven Voxelflächen

$$R_{ij} = d_{Det}/N_{SP} \cdot \sum_{k=1}^{N_{SP}} p_{SP,k} \cdot l_{ji} \quad (2.37)$$

definiert. Es ist anzumerken, dass die Modellierung sowohl für Transmissions- als auch für Streu- bzw. Emissionstomographie Gültigkeit hat. Aufgrund der Dimensionierung des Gleichungssystems haben sich besonders iterative Verfahren zum Lösen von Gleichung 2.33 bewährt. Des weiteren erlauben iterative Verfahren, regularisierend über die Anzahl der Iterationen, den Einfluss von Unsicherheiten in den Eingangsdaten auf die Rekonstruktion zu steuern. Eine Vielzahl solcher Verfahren beruht auf dem Kaczmarz Algorithmus[95], dessen Iterationsvorschrift durch

$$\vec{f}^{v+1} = \vec{f}^v - \frac{\vec{R}_i \cdot \vec{f}^v - (\vec{p})_i}{\vec{R}_i \cdot \vec{R}_i^T} \cdot \vec{R}_i^T \quad (2.38)$$

gegeben ist. Zur Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit lassen sich die algebraischen Verfahren durch Ordered Subset (OS) Techniken[96] optimieren.

Eine Alternative zu der direkten Lösung von Gleichung 2.33 bilden sogenannte statistische Verfahren. Bei diesen werden durch die Maximierung der Verbundwahrscheinlichkeit, d.h. der Wahrscheinlichkeit bei gegebenen Erwartungswerten der Messgrößen die Messdaten zu beschreiben, die gesuchten Messgrößen bestimmt. Dies wird, ähnlich wie in Gleichung 2.23, durch die Minimierung einer Zielfunktion erreicht. Da durch diese Verfahren die Zählstatistik der Detektion berücksichtigt wird, finden sie häufig aufgrund des geringen Quantenaufkommens in der Emissionstomographie Anwendung. Neben den Maximum Likelihood Expectation-Maximization (MLEM)[97] Methoden kommen ebenfalls Ordered Subset Expectation-Maximization (OS-EM) Verfahren zum Einsatz.

Die Anzahl der benötigten Messungen zur Rekonstruktion eines Objekts mit Durchmesser d_{Obj} bei einer Detailerkennbarkeit d_{max} kann ähnlich, wie bei der gefilterten Rückprojektion abgeschätzt, werden. Nach dem Abtasttheorem muss eine Pixelgröße von $d_{\text{max}}/2$ bei der Rekonstruktion gewählt werden, was zu insgesamt $4d_{\text{Obj}}^2/d_{\text{max}}^2$ Unbekannten im linearen Gleichungssystem führt. Diese grobe Abschätzung verdeutlicht, dass die benötigte Anzahl der Messungen mit den Anforderungen an die gefilterte Rückprojektion übereinstimmt. Nichtsdestotrotz stellen sich ART basierte Ansätze, insbesondere bei unzureichender Datenqualität, z.B. durch Unterabtastung oder starkes Rauschen, gegenüber FBP-Verfahren als überlegen heraus[98].

2.3.3. Kegelstrahl-Geometrie

CT-Systeme der aktuellen Generation nutzen den kompletten Kegelstrahl einer Röntgenröhre zur Akquisition von zweidimensionalen Projektionsdaten mit einem Flächendetektor. Die Rekonstruktion aus den Projektionsdaten liefert einen dreidimensionalen Datensatz mit isotroper Ortsauflösung und ermöglicht eine Darstellung durch ein Volumenrendering (vgl. Abbildung 10). Durch diese Kegelstrahl-Anordnungen werden mit medizinischen C-Bogen-Systemen[99] vielseitige Anwendungen zur radiologischen Intervention, Therapieplanung und -kontrolle ermöglicht. Beispielsweise ist in der dentalen Volumentomographie eine isotrope Ortsauflösung von bis zu $100\ \mu\text{m}$ erzielbar[3]. Kardiologische Anwendungen profitieren von großvolumigen Aufnahmen mit 320 Schichten (Voxelgröße $500\ \mu\text{m}$) bei Zeitaufösungen von $< 175\ \text{ms}$ [87]. Die Verwendung von Dual-[100] und Multiple-Energy[101] Verfahren, sowie ausblickend die selektive K-Kanten Bildgebung[102], ist als aktueller Trend zur Kontrastverbesserung zu beobachten. Die Nutzung des Dual-Energy-Verfahrens in C-Arm-Bogen-Systemen mittels kV-Switching[103] wurde demonstriert.

Für industrielle Anwendungen kommen zunehmend Mikro-CT-Systeme in Kegelstrahlgeometrie zum Einsatz[4]. Im Bereich der Werkstofftechnik, Metrologie oder auch in der begleitenden Qualitätssicherung sind durch die Verwendung von Mikrofokus-Röntgenröhren in Reflektions- bzw. Transmissionsgeometrie Ortsauflösungen von $< 1\ \mu\text{m}$ erzielbar. Die typische Scandauer beträgt nur wenige Minuten[5]. Gantry basierte Mikro-CT-Systeme erlauben bei Scandauern von 12 s sogar zeitabhängige Untersuchungen (4d-CT) bei $7\ \mu\text{m}$ [104].

Analog zur zweidimensionalen Radontransformation in Unterabschnitt 2.3.1 lässt sich die dreidimensionale Transformation für Parallelstrahlen formulieren. Dazu sei ein System aus Flächendetektor und Röntgenröhre drehbar um das Objektzentrum gelagert. Die Orientierung des Flächendetektors werde in Kugelkoordinaten mit Polarwinkel γ und Azimutalwinkel ϑ bezüglich der Detektornormalen beschrieben. Für gegebene planare Detektorkoordinaten (x', y') ist die zu-

gehörige Projektion durch

$$p_{\vartheta}(\gamma, x', y') = \int_{-\infty}^{\infty} f(-x' \sin(\gamma) - y' \cos(\gamma) \cos(\vartheta) + z' \cos(\gamma) \sin(\vartheta), \quad (2.39)$$

$$x' \cos(\gamma) - y' \sin(\gamma) \cos(\vartheta) + z' \sin(\gamma) \sin(\vartheta),$$

$$y' \sin(\vartheta) + z' \cos(\vartheta)) dz'$$

gegeben[94, Seite 275 ff.]. Wie auch bei der zweidimensionalen Computertomographie in Unterabschnitt 2.3.2 kann die Rekonstruktion des dreidimensionalen Bildes $f(x, y, z)$ durch eine gefilterte Rückprojektion, mithilfe des verallgemeinerten Fourier-Scheiben-Theorems oder durch einen algebraischen Ansatz erfolgen. Jedoch entsprechen die Projektionsdaten in einer Kegelstrahlgeometrie mit zirkularem Orbit - gegenteilig zur Fächerstrahlgeometrie im zweidimensionalen Fall - keinem vollständigen 3d-Radonsatz. Die Vollständigkeit des Datensatzes ist erst gegeben, wenn alle durch das Objekt gelegten Flächen die Bahn der Röntgenröhre wenigstens einmal schneiden[105].

Dennoch werden sowohl in industriellen als auch in medizinischen Anwendungen häufig CT-Systeme mit einer einfachen zirkularen Quelle-Detektor-Trajektorie verwendet. Die Rekonstruktion kann dann approximativ mithilfe des Feldkamp, Davis und Kress (FDK) Algorithmus[106] erfolgen. Wie bei der gefilterten Rückprojektion in Gleichung 2.30, wird beim FDK Algorithmus der dreidimensionale Datensatz[94, Seite 329 ff.]

$$f(x, y, z) = \int_0^{2\pi} \left(\frac{y'(x, y, z, \gamma)}{z} \right)^2 \cdot h_{\gamma}(x'(x, y, z, \gamma), y'(x, y, z, \gamma)) d\gamma \quad (2.40)$$

durch eine Rückverschmierung der gewichteten und gefilterten Projektionsbilder $h_{\gamma}(x', y')$ berechnet. Die Filterung geschieht durch Faltung

$$h_{\gamma}(x', y') = \frac{1}{2} p(\gamma, x', y') \cdot \frac{\text{FOD}}{\sqrt{\text{FOD}^2 + x'^2 + y'^2}} \otimes g(x') \quad (2.41)$$

der detektierten Projektionsbilder $p(\gamma, x', y')$ mit einem Rampenfilter $g(x')$, FOD beschreibt den Fokus-Objekt Abstand.

Artefakte des approximativen FDK Algorithmus treten aufgrund der Verletzung der Vollständigkeitsbedingung insbesondere an rekonstruierten Flächen auf, welche parallel zum zentralen Fächerstrahl verlaufen. Zur Vermeidung können exakte Rekonstruktionsalgorithmen, beispielsweise unter Verwendung einer Helix-Trajektorie[107], eingesetzt werden.

SIMULATION

In diesem Kapitel wird die Simulation von EDXRD-basierten XDI-System thematisiert. Es wird ein auf dem GATE-Toolkit basiertes Simulationsverfahren vorgestellt, welches neben der Simulation von Systemeigenschaften auch die schnelle Berechnung eines CSCT-Datensatzes ermöglicht. Zur Validierung werden die Simulationsergebnisse mit realen Messdaten verglichen. Anwendungen zur Anlagen- bzw. Kollimatoroptimierung und der Vergleich verschiedener XDI-Topologien im Hinblick auf Quantendurchsatz, Ortsauflösung und spektrale Auflösung, werden gezeigt.

3.1. Einführung

Für die Entwicklung neuer Strahltopologien und Aufnahmeverfahren zur Streubildgebung sind Programme zur XDI-Simulation von wesentlicher Bedeutung. Sowohl der schnelle Vergleich von Leistungsmerkmalen verschiedener Systeme als auch die systematische Optimierung von Anlagenparametern (z.B. komplexe Streukollimatorgeometrie) zur Erfüllung von Spezifikationen bei gegebenen Prüfaufgaben, können mithilfe von Simulationstools kosteneffizient ermöglicht werden. Neben diesen Anwendungen wird die Simulation im Rahmen dieser Arbeit insbesondere zur Entwicklung von neuen Rekonstruktionsalgorithmen eingesetzt. So lassen sich Einflüsse auf die Rekonstruktionsgüte aufgrund von Probeneigenschaften (Absorption, Textur, ...) und Anlagenparametern (Röhrenleistung, Detektoreigenschaften, ...) systematisch untersuchen.

3.1.1. Anforderungen

Zum realistischen Vergleich verschiedener XDI-Topologien ist die Systemsimulation unter Berücksichtigung sämtlicher relevanter physikalischer Effekte durchzuführen. Die Simulation der Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Systemkomponenten der Röntgenbeugungsanlage soll daher die physikalischen Effekte der photoelektrischen Absorption, der kohärenten und inkohärenten Streuung, sowie der Röntgenfluoreszenz berücksichtigen (vgl. Abschnitt 2.1).

Bei der Modellierung der Röntgenröhre ist es nötig, Parameter, wie das emittierte Spektrum, die Brennfleckgeometrie (Intensitätsverteilung, ggf. mehrere Foki), sowie die Abstrahlcharakteristik und Röhrenleistung zu verändern. Komplexe Kollimator-, Phantom- und Detektor-Geometrien sollen analytisch, voxelliert oder durch rechnergestütztes Konstruieren (CAD) implementiert werden und aus mehreren Materialien modellierbar sein. Die Orientierung bzw. Position innerhalb

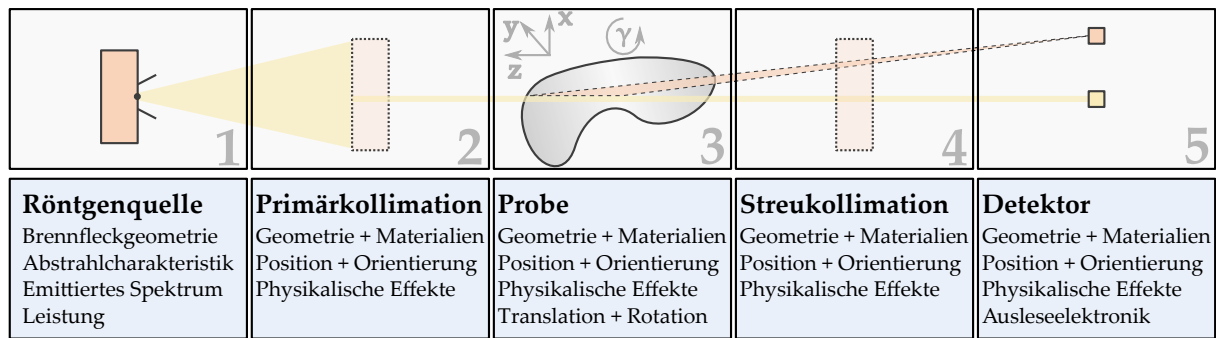


Abbildung 12: Schematische Übersicht der Anforderung an ein XDI-Simulationsprogramm, sowie des Ablaufs einer Streusimulation. Typischerweise werden die Schritte 1-5 sukzessive in der Simulationsroutine abgearbeitet.

des Simulationsvolumens muss frei wählbar sein, für die Simulation von verschiedenen Scan-Trajektorien ist außerdem eine Translation bzw. Rotation der Probe im Rahmen der Simulation erforderlich. Einflüsse der Ausleseelektronik-Kette sollen ebenso berücksichtigt werden. Zur Übersicht sind diese Anforderungen schematisch in Abbildung 12 zusammenfassend dargestellt.

Neben der Optimierung von Systemeigenschaften mittels „weißer Streuer“ sollen Beugungsspektren ebenfalls zu simulieren sein. Damit komplette Scan-Datensätze, wie z.B. ein Raster-Scan oder ein CSCT-Sinogramm, zur Bewertung und Erprobung von Rekonstruktionsroutinen verwendet werden können, muss deren Berechnung in kurzer Zeit (Ordnung Sekunden) auf einem gewöhnlichen PC möglich sein.

3.1.2. Gängige Simulationsverfahren

Bereits vor der Veröffentlichung erster Ergebnisse zur Röntgenstreubildgebung durch Harding et al. wurden grundlegende Untersuchungen, wie etwa die Bestimmung der anteiligen Verteilung kohärent-, inkohärent- und mehrfach-gestreuter Photonen bei der Detektion in einem potenziellen Röntgenbeugungssystem, mittels Simulationen durchgeführt. Mithilfe von Monte-Carlo Methoden konnte so das Streuverhalten einfacher Wasserphantome in Abhängigkeit der Probendicke unter Verwendung einer idealen Nadelstrahlgeometrie untersucht werden[108]. Die bis heute entwickelten Verfahren zur Simulation von Streubildgebungssystemen lassen sich basierend auf ihren Ansätzen in zwei Bereiche, Monte-Carlo basierte Verfahren und Methoden mit sequenzieller geometrischer Strahlverfolgung, unterteilen.

Bei der sequenziellen geometrischen Strahlverfolgung werden die möglichen Strahlpfade von der Quelle bis zum Detektor durch eine festgelegte Iteration bestimmt. Wechselwirkungen der Röntgenstrahlung mit Komponenten des Systems werden allerdings nicht berücksichtigt. Bei der Berücksichtigung der geometrischen Randbedingungen des Systems lassen sich physikalische Prozesse im Objekt modellieren. So existieren beispielsweise Programme wie X-Sim2001, welche die Schwächung der Röntgenstrahlung im Objekt berücksichtigen[109], jedoch keine komplizierteren Phantome mit mehreren Materialien unterstützen. Anwendungen finden derartige Tools bei der Optimierung von Systemen für spezielle Untersuchungsaufgaben, wie beispielsweise die Erkennung von Betäubungsmitteln[110]. Durch die analytische Berechnung der Intensität des gestreuten Photonenflusses lassen sich, unter Berücksichtigung der Wirkungsquerschnitte von Thomson-

und Comptonstreuung, realistische Spektren simulieren. Die Verwendung komplexer, beispielsweise voxelierter Phantome, welche aus mehreren Materialien bestehen können, ist unter anderem mit der Software SinFullscat[111] möglich. Ein wesentlicher Vorteil der geometrischen Verfahren liegt in der kurzen Berechnungsdauer eines simulierten Streuspektrums. So steht eine Simulation auf einem gewöhnlichen Desktop-PC typischerweise innerhalb weniger Sekunden zur Verfügung. Da außer der Absorption keine komplizierteren Wechselwirkungen mit den Systemkomponenten berücksichtigt werden, ist die Detailtreue der Spektren eingeschränkt. Mehrfachstreuung und Fluoreszenzstrahlung werden ebenfalls nicht simuliert.

Weitaus häufiger als die geometrische Strahlverfolgung finden Monte-Carlo basierte Verfahren Anwendung zur Simulation von Streubildgebungssystemen. Dabei kommen in der Regel Programme aus der Hochenergiephysik zur Simulation des Strahlungstransports in Materie zur Anwendung. Röntgenbeugung wird durch eine Modifizierung der materialabhängigen atomaren Formfaktoren implementiert. So können beispielsweise mit dem am CERN entwickelten "Geometry ANd Tracking" (GEANT4) Programm[112] komplizierte Coded-Aperture[113] und CSCT-Geometrien[75] simuliert werden. Praktische Anwendungen, wie die Optimierung von Detektoreigenschaften zur automatischen Erkennung von unbekanntem Substanzen, lassen sich mithilfe der modifizierten CT-Simulationssoftware CatSim[114] durchführen[115]. Medizinische Fragestellungen bei der Entwicklung von CSCT-basierten Mammographiesystemen[116] werden mit dem „PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons“ (PENELOPE) Modell[117] untersucht.

Durch die Simulation weiterer physikalischer Prozesse, wie z.B. Mehrfachstreuung, Röntgenfluoreszenz und Wechselwirkungen mit den Systemkomponenten, entstehen bei den Monte-Carlo basierten Methoden prinzipiell realistischere Spektren als bei der geometrischen Strahlverfolgung. Da der Akzeptanzwinkelbereich von Streukollimatoren in XDI-Systemen jedoch verhältnismäßig klein ist (der von der typischen Detektorfläche erfasste Raumwinkel liegt typischerweise bei $< 1\%$), führen nur wenige Photonenpfade zur Registrierung. Trotz der Verwendung von Varianz-Reduktionsmethoden resultieren hohe Simulationszeiten. So beträgt beispielsweise die Simulationsdauer eines kompletten CSCT-Scans mit dem „Electron Gamma Shower“ (EGS5) Programm[118] auf einem Quad-Core Xeon x5560 (2.8 GHz) einige Tage[119].

3.1.3. Simulationsansatz der Arbeit

Der Strahlungstransport innerhalb eines XDI-Systems lässt sich mithilfe der stationären Boltzmann Transportgleichung beschreiben[120]. Als zentrale Größe zur Beschreibung des Strahlungstransports wird die energieabhängige Photonenflussdichte \dot{n} verwendet. Sie beschreibt die Anzahl der pro Zeiteinheit und Energie aus einer Richtung $\vec{\Omega}$ einlaufenden Photonen am Ort \vec{r} innerhalb des Volumenelements $d\vec{r}$. Analog zu \dot{n} werden die Photonenquellen \dot{n}_Q innerhalb der Geometrie definiert. Unter Verwendung eines punktförmigen Detektors am Ort \vec{r}_D (vgl. Abbildung 13) kann der detektierte energieabhängige Photonenfluss in integraler Form durch[121, Seite 99 ff.]

$$\begin{aligned} \dot{n}(\vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) &= \int \dot{n}_Q(\vec{r}', \vec{\Omega}, E) \cdot T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) d\vec{r}' \\ &+ \iiint \dot{n}(\vec{r}', \vec{\Omega}', E') \cdot \sigma(\vec{r}', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) \cdot T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) d\vec{r}' d\vec{\Omega}' dE' \end{aligned} \quad (3.1)$$

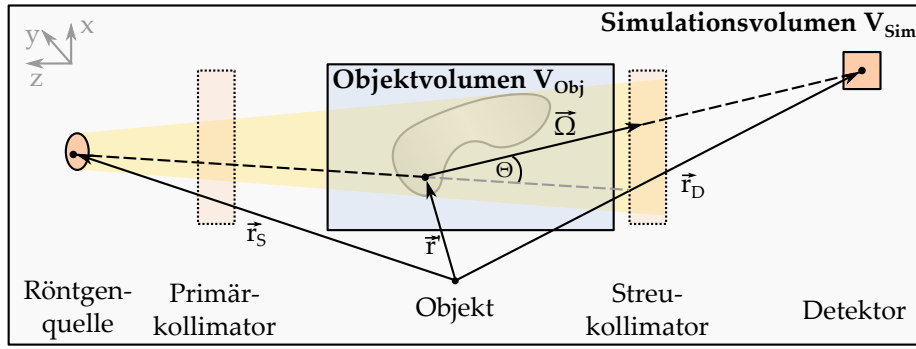


Abbildung 13: Schematischer Aufbau des Simulationsvolumens einer XDI-Simulation. Exemplarisch ist der Photonpfad eines Einfachstreuereignisses eingezeichnet.

modelliert werden. Dabei berücksichtigt $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D, \vec{\Omega}, E)$ neben der aufgrund von Schwächung (gemäß Lambert-Beer) entlang des Pfades $\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D$ auftretenden Verringerung der detektierten Quanten auch die Detektionswahrscheinlichkeit (Photoabsorption) im Volumenelement $d\vec{r}$ am Ort \vec{r}_D . Die Größe $\sigma(\vec{r}', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E)$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit für eine Wechselwirkung am Ort \vec{r}' , welche mit einer Richtungsänderung $\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}$ und einem Energieverlust $E' \rightarrow E$ einhergeht und umfasst alle betrachteten physikalischen Prozesse (vgl. Abschnitt 2.1). Das auftretende Volumenintegral wird über das komplette Simulationsvolumen V_{Sim} ausgeführt, das Energieintegral läuft über den von der Röntgenröhre abgestrahlten Energiebereich. Bei der Integration über $\vec{\Omega}'$ wird das Integral zwar über alle Orientierungen ausgewertet. Die Boltzmann Gleichung 3.1 setzt sich anschaulich aus einem direkt transmittierten und einem über Streuung / Fluoreszenz generierten Strahlungsanteil summativ zusammen. Ziel der, in Unterabschnitt 3.1.2 beschriebenen Monte-Carlo basierten Verfahren, ist es, eine Lösung der Boltzmann Gleichung 3.1 zu bestimmen.

Die geometrischen Verfahren beruhen hingegen auf einem approximativen Ansatz zur Lösung der Boltzmann Gleichung. Gemäß der Methode der sukzessiven Ordnung der Streuwechselwirkungen[122] lässt sich die Lösung additiv aus den Anteilen der einfach, zweifach, ..., i -fach gestreuten Quanten \dot{n}_i in einer Reihe darstellen:

$$\dot{n}(\vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) = \sum_{i=0}^{\infty} \dot{n}_i(\vec{r}_D, \vec{\Omega}, E). \quad (3.2)$$

Die ersten beiden Ordnungen sind dabei durch[121, Seite 103]

$$\dot{n}_0(\vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) = \int \dot{n}_Q(\vec{r}_S, \vec{\Omega}, E) \cdot T(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) d\vec{r}_S \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \dot{n}_1(\vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) = & \iiint \dot{n}_Q(\vec{r}_S, \vec{\Omega}', E') \cdot T(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}', \vec{\Omega}', E') \\ & \cdot \sigma(\vec{r}', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) \cdot T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) d\vec{r}_S d\vec{r}' d\vec{\Omega}' dE' \end{aligned} \quad (3.4)$$

gegeben. Während der Beitrag von \dot{n}_0 zum direkt transmittierten Strahl korrespondiert, lassen sich die Beiträge von \dot{n}_1 als Photonen interpretieren, welche nach einer einzelnen Wechselwirkung den Detektor erreichen. Dabei werden die Integrale über den selben Gebieten wie in Gleichung 3.1 ausgewertet; die Integration über \vec{r}_S ist nun speziell über das Volumen der Röntgenquelle und die

Integration über \vec{r}' über das Systemvolumen auszuführen. Führt man zusätzlich einen Detektor mit endlicher Fläche ein und berücksichtigt, dass im Fall von XDI-Systemen keine unmittelbar transmittierte Strahlung detektiert wird, ergibt sich

$$\begin{aligned} \dot{N}(E)/dE &= \iint \dot{n}_1(\vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) d\vec{r}_D d\vec{\Omega} + \dot{N}_M(E)/dE \\ &= \dot{N}_S(E)/dE + \dot{N}_F(E)/dE + \dot{N}_M(E)/dE \end{aligned} \quad (3.5)$$

für die Zahl der pro Zeiteinheit im gesamten Detektor erfassten Quanten mit der Energie E . Die in Gleichung 3.5 eingeführten Integrale werden über das gesamte Detektorvolumen bzw. alle Orientierungen ausgeführt. Die Notation folgt dabei dem in Abbildung 13 dargestellten Schema der Streugeometrie. Aufgrund der Linearität von σ wurden die Beiträge nach den zugehörigen physikalischen Prozessen gruppiert. $\dot{N}_S(E)$ entspricht dem Einzelstreubeitrag (kohärent und inkohärent), $\dot{N}_F(E)$ enthält die durch Fluoreszenz induzierten Beiträge und $\dot{N}_M(E)$ berücksichtigt die Streubeiträge höherer Ordnung. Die in Unterabschnitt 3.1.2 beschriebenen sequenziellen geometrischen Verfahren zeichnen sich dadurch aus, dass die Anteile von $\dot{N}_M(E)$ und $\dot{N}_F(E)$ nicht berücksichtigt werden, d.h. die Approximation bereits nach den Einfachstreubeiträgen abgebrochen wird. Geht man zusätzlich - wie beispielsweise bei X-Sim2001 - von einem konstanten Streuquerschnitt im Objekt (sog. „weißer Streuer“) aus und ersetzt die Lambert-Beersche Schwächung durch „geometrische Schwächung“, so lässt sich Gleichung 3.5 als reine Render-Gleichung[123] interpretieren.

Während die Simulationsvolumina, sowohl bei den Monte-Carlo basierten als auch bei den geometrischen Verfahren, üblicherweise das komplette Röntgenbeugungssystem umfassen, wird in dieser Arbeit der Ansatz verfolgt, die Simulation des Systems und der Probe getrennt auszuführen. Berücksichtigt man bei den Streubeiträgen der Einfachstreuung, dass der Energieverlust beim Compton-Effekt in typischen XDI-Systemen aufgrund der starken Vorwärtsstreugeometrie vernachlässigt werden kann (vgl. Abschnitt 2.1.1), lässt sich der Einzelstreubeitrag $\dot{N}_S(E)$ gemäß Gleichung 3.5 und Gleichung 3.4 über

$$\begin{aligned} \dot{N}(E)_S/dE &= \iiint \iiint \dot{n}_Q(\vec{r}_S, \vec{\Omega}', E) \cdot T(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}', \vec{\Omega}', E) \\ &\quad \cdot \sigma(\vec{r}', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E) \cdot T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D, \vec{\Omega}, E) d\vec{r}_S d\vec{r}' d\vec{r}_D d\vec{\Omega}' d\vec{\Omega} \end{aligned} \quad (3.6)$$

beschreiben. Zur Vereinfachung von Gleichung 3.6 wird für einen festen Streupfad ($\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D$) gemäß Abbildung 13 der zugehörige Streuwinkel Θ definiert. Die Wahrscheinlichkeit für eine Streuwechselwirkung $\vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}'$ am Ort \vec{r}' , lässt sich dann durch den entsprechenden differentiellen Streuquerschnitt $(d\sigma/d\Omega)(\vec{r}', \Theta, E)$ ausdrücken. Die einlaufende Intensität an diesem Ort korrespondiert mit der Integration von $\dot{n}_Q(\vec{r}_S, \vec{\Omega}', E) \cdot T(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}', \vec{\Omega}', E)$ über das gesamte Brennfleckvolumen. Diese Größe werde im Folgenden mit $\dot{N}_0(\vec{r}', E)$ bezeichnet; sie beschreibt, unter Berücksichtigung von Schwächung an Systemkomponenten (jedoch nicht am Objekt), die Anzahl der Photonen, welche pro Zeit- und Flächeneinheit mit der Energie E am Ort \vec{r}' einlaufen. Die Anzahl der nach der Streuwechselwirkung detektierten Photonen ist dann durch Integration über den vom Streuort \vec{r}' aus sichtbaren Raumwinkelbereich Ω_{Det} des Detektors gegeben. Dieses zweidimensionale Integral wird durch die Einführung einer normierten¹ Streuwinkelverteilungsfunktion $p_{SW}(\vec{r}', \Theta, E)$ und eines mittleren Raumwinkelelements $\delta\Omega(\vec{r}', E)$ in ein eindimensiona-

¹ $\int p_{SW}(\vec{r}', \Theta, E) d\Theta = 1.$

les Integral über den Streuwinkel Θ überführt. Damit ergibt sich insgesamt für die Detektionsrate $\dot{N}_S(E)$ der Streubeiträge eines „weißen Streuers“:

$$\dot{N}_S(E) = \iint \dot{N}_0(\vec{r}', E) \cdot A_{\text{Obj}}(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D, E) \cdot p_{\text{SW}}(\vec{r}', \Theta, E) \cdot n_a(\vec{r}') \left(\frac{d\sigma(\vec{r}', \Theta, E)}{d\Omega} \right)_{\text{Tot}} \delta\Omega(\vec{r}', E) d\vec{r}' d\Theta. \quad (3.7)$$

Die Größe $A_{\text{Obj}}(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}' \rightarrow \vec{r}_D, E)$ kennzeichnet dabei die Lambert-Beersche Schwächung der Strahlung innerhalb des Objektvolumens. Gleichung 3.7 kann mithilfe von Voxeln durch eine Summation über die einzelnen Voxelpositionen \vec{r}_i diskretisiert werden. Die Diskretisierung wird durch eine Indizierung der Variablen gekennzeichnet; dabei beschreibt der Index $i \in \{1, \dots, \#\text{Voxel}\}$ die Voxelposition, $j \in \{1, \dots, \#\text{Winkel}\}$ den Streuwinkel und der Index $k \in \{1, \dots, \#\text{Energiekanäle}\}$ die Photonenenergie. Unter Vernachlässigung von Schwächung entspricht

$$\dot{N}_S(E_k) = V_{\text{Vox}} \cdot \underbrace{\sum_{i=1}^{\#\text{Voxel}} \dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k) \cdot \delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)}_{\text{System}} \cdot \underbrace{\sum_{j=1}^{\#\text{Winkel}} p_{\text{SW}}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k) \cdot n_a(\vec{r}_i) \cdot \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Tot}}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)}_{\text{Objekt}} \quad (3.8)$$

einer diskreten Beschreibung von Gleichung 3.7, welche eine Trennung der Simulationsvolumina V_{Sys} und V_{Obj} ermöglicht - das Voxelvolumen V_{Vox} ist dabei als Simulationsparameter zu interpretieren. Die System beschreibenden Funktionen können damit durch eine Monte-Carlo Simulation unter Berücksichtigung der relevanten physikalischen Prozesse getrennt von den Objekt basierten Daten bestimmt werden. Hingegen wird durch die analytische Beschreibung der Objektdaten anschließend eine schnellere Simulation von Beugungsspektren bzw. kompletten Scans erlaubt. Röntgenschwächung kann durch die Kenntnis der Streupfade, wie in Unterabschnitt 3.2.6 beschrieben, ebenfalls post-prozessiv berücksichtigt werden. Neben den Einzelstreubeiträgen tragen auch die weiteren Anteile

$$\dot{N}_D(E_k) = \dot{N}_S(E_k) + \dot{N}_{\text{M,Obj}}(E_k) + \dot{N}_{\text{F,M,Sys}}(E_k) + (\dot{N}_{\text{F,Obj}}(E_k) + \dot{N}_{\text{F,M,Obj-Sys}}(E_k)) \quad (3.9)$$

zum gesamten Streuspektrum bei. Während die Einflüsse von Einfach- und Mehrfachstreuung sowie der Fluoreszenzstrahlung an Systemkomponenten $\dot{N}_{\text{F,M,Sys}}(E_k)$ durch die Monte-Carlo Simulation berücksichtigt werden, wird die in der Probe angeregte Fluoreszenzstrahlung $\dot{N}_{\text{F,Obj}}$ aufgrund der zugrundeliegenden Transmissionsgeometrie und des geringen Akzeptanzwinkels nicht berechnet. Der Anteil an Mehrfachstreuung $\dot{N}_{\text{M,Obj}}$ im Objekt fällt in typischen XDI-Systemen mit starker Streukollimation ebenfalls vergleichsweise gering aus ($< 1\%$) und ist daher häufig in guter Näherung vernachlässigbar[108][124]. Die Berücksichtigung von Streuung höherer Ordnung im Objekt lässt sich jedoch optional in die Simulation einbinden, während Streubeiträge $\dot{N}_{\text{F,M,Obj-Sys}}$ höherer Ordnung (≥ 3), welche sowohl Objekt- und Systemkomponenten umfassen, nicht berücksichtigt werden.

3.2. Simulationsroutine

Eine schematische Übersicht des Simulationsablaufs ist in Abbildung 14 dargestellt. Zur Bestimmung der Systemfunktionen $\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$, $\delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)$ bzw. $p_{SW}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)$ wird das Monte-Carlo Simulationstool GATE (Geant4 Application for Emission Tomography [125])² eingesetzt. Um die Streuung effektiv simulieren zu können, ist die Simulation in zwei Teile gestaffelt. Zunächst wird die Intensitätsverteilung des Primärstrahls, d.h. die Ausleuchtung des Objekts, simuliert und somit $\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$ bestimmt. Im zweiten Teil wird der Streuprozess mithilfe einer im Objektbereich platzierten, ausgedehnten weißen Strahlungsquelle imitiert. Ähnlich der forcierten Detektion bei Simulationsverfahren von Radiographie- bzw. CT-Systemen[126][127], kann durch eine gezielte Abstrahlung der virtuellen Quelle, die pro Zeiteinheit simulativ detektierten Quanten ausschlaggebend erhöht und die Raumwinkelfunktion $\delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)$ effizient approximiert werden. Aus beiden Teilen der GATE Simulation können im Weiteren die Systemfunktionen $p_{SW}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)$ und $\dot{N}_{F,M,Sys}(E_k)$ berechnet werden. Die Bestimmung der Streuspektren bzw. kompletten Streudatenätze geschieht unter Zuhilfenahme der objektbasierten Daten $n(\vec{r}_i)$ bzw. $(d\sigma/d\Omega)(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)$ mit der Softwareumgebung MATLAB³. Die post-prozessive Berechnung der Röntgenschwächung mittels Backtracking und die Berücksichtigung von Mehrfachstreuung im Objekt wird ebenfalls in MATLAB durchgeführt. Im Rahmen der Beschreibung der Simulationsroutine werden zur Verdeutlichung exemplarische Simulationsergebnisse dargestellt. Sofern nicht anders angegeben, beziehen sich die zugehörigen Simulationsparameter auf eine Nadelstrahl-Konfiguration, welche dem realisierten experimentellen Aufbau (vgl. Kapitel 5) entspricht.

²GATE, Version 7.2, international OpenGATE collaboration - <http://www.opengatecollaboration.org>

³MATLAB und Curve Fitting, Image Processing, Signal Processing bzw. Wavelet Toolbox R2013a, The MathWorks, Inc., Natick, MA, USA - <http://www.mathworks.com>

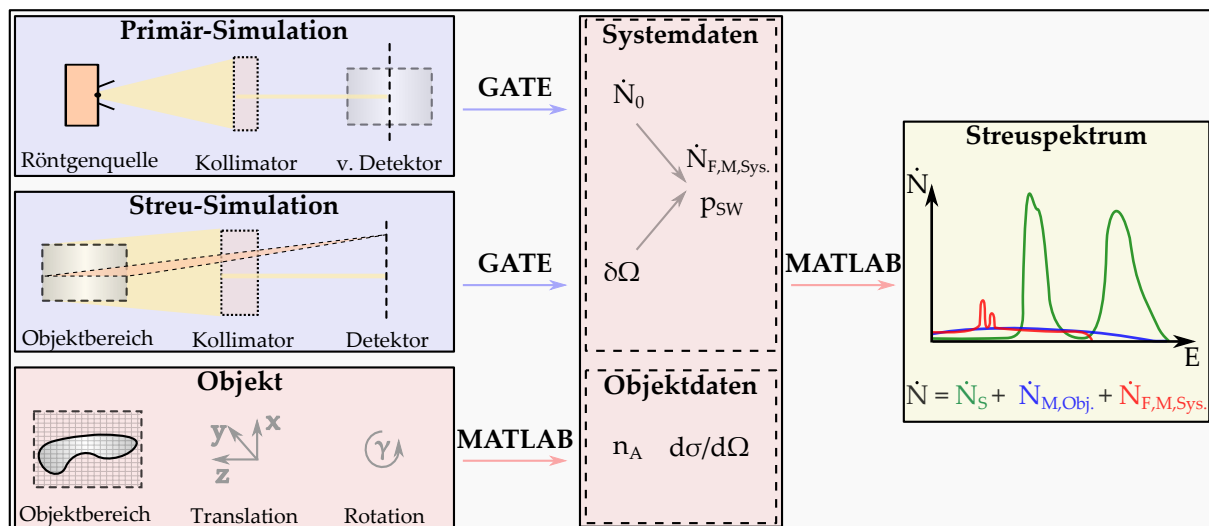


Abbildung 14: Schematische Darstellung der Simulationsroutine. Während die Systemdaten mit dem Monte-Carlo basierten Simulationstool GATE bestimmt werden, lassen sich die Streuspektren aus den Systemfunktionen unter Verwendung der Objektdaten mithilfe der Softwareumgebung MATLAB berechnen.

3.2.1. GATE

Das GATE Toolkit wurde speziell für die Simulation medizinischer Bildgebungssysteme und radiotherapeutische Anwendungen konzipiert. Es handelt sich um eine in C++ geschriebene Open Source Software, welche auf der untersten Softwarearchitektur-Ebene die offiziellen Geant4 Bibliotheken verwendet. Für den Benutzer stellt GATE jedoch eine eigene Makrosprache bereit, welche es ermöglicht, komplizierte Szenarien ohne C++ Programmierung zu modellieren. Der Aufbau und die Funktionen des Hauptmakros sollen kurz erläutert und einige im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Parameter angegeben werden. Das Hauptmakro setzt sich aus den folgenden Teilmakros zusammen:

- **Grundlegende Definitionen**
Die für die Simulation benötigten Materialien lassen sich anhand ihrer elementaren Zusammensetzung entweder stöchiometrisch oder über Massenanteile in einer Materialdatenbank definieren, vgl. Tabelle A.24. Für das Simulationsvolumen (sog. „Weltvolumen“) wird stets als Material „Luft“ verwendet.
- **Scanner Geometrie**
Für die Scanner Geometrieklasse wird der allgemeine Systemtyp „Scanner“ verwendet. Neben der Definition von Kollimatoren und weiteren Systemkomponenten (z.B. Abschirmungen) wird auch der Detektor innerhalb der Scanner-Geometrie festgelegt.
- **Strahlenquelle**
Als Strahlenquelle dient eine universelle Gamma-Strahlenquelle („general particle source“). Sowohl flache als auch räumlich emittierende Quellen können mit beliebigem Emissionsspektrum konfiguriert werden.
- **Physikalische Prozesse**
Während die Standardmodelle zur Simulation der physikalischen Prozesse weite Bereiche der Energieskala (1 keV – 100 TeV) abdecken müssen, ist das PENELOPE Modell (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons[117]) speziell für den niederenergetischen Bereich (250 eV – 100 GeV) konzipiert worden. Daher wird die Physikliste „empene-lope“ verwendet. Sie beinhaltet die Prozesse der photoelektrischen Absorption, Compton-Streuung, Rayleigh-Streuung, Ionisation, Bremsstrahlung, Fluoreszenz, Annihilation und Paarbildung.
- **Digitizer**
Der Digitizer dient der Simulation der Detektor-Ausleseelektronik. Hier werden lediglich die „Adder“ und „Readout“ Module benutzt. Die Energieunschärfe des Detektors wird anschließend durch eine Faltungsoption modelliert.
- **Output**
Das Outputskript definiert unter anderem den zu verwendenden Zufallszahlengenerator. Im Simulationsskript wird der „MersenneTwister“ Generator mit zufälliger Seedgeneration benutzt. Zudem werden Optionen und das Dateiformat der Ausgabe gewählt.
- **Akquisition**
Im Akquisitionsskript wird die Länge von Zeitschritten und die Dauer der gesamten Simulation eingestellt und die Datenakquisition gestartet.

Die einzelnen Teilmakros werden mittels MATLAB generiert und anschließend auf einen ausgelagerten Simulationsrechner transferiert. Via Secure Shell (SSH) kann die Simulation anschließend

durch MATLAB direkt ausgeführt und überwacht werden. Nach Beendigung der Simulation werden die Simulationsdaten eingelesen, analysiert und zur weitergehenden Simulation verwendet.

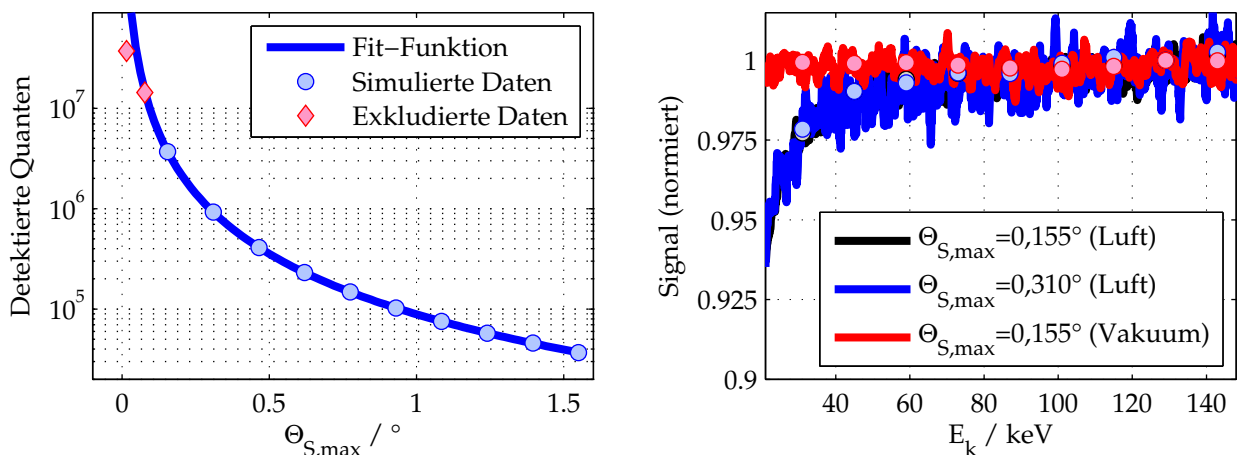
3.2.2. Primärstrahl

Zur Bestimmung der energieabhängigen Intensitätsverteilung $\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$ des Primärstrahls innerhalb des Objektvolumens muss in Gleichung 3.5 das Flächenintegral über den Brennfleckbereich ausgeführt werden. Die Anzahl der pro Energieeinheit detektierten Quanten innerhalb eines Voxels am Ort \vec{r}_i erhält man durch eine weitere Integration über den zugehörigen Raumwinkelbereich. Sie kann durch

$$\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k) = \iint \dot{a}_{A0}(\vec{r}_S, E_k) \cdot A_P(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i, E_k) d\Omega d\vec{r}_S \quad (3.10)$$

ausgedrückt werden, wobei die sogenannte Aktivität der Flächenquelle $\dot{a}_{A0}(\vec{r}_S, E_k)$ über die Anzahl der Photonen mit einer Energie E_k , welche pro Zeiteinheit t in ein Raumwinkelement $d\Omega$ emittiert werden, definiert ist. A_P beschreibt die Schwächung der Strahlung aufgrund von Systemkomponenten. Gleichung 3.10 ist im Allgemeinen nicht analytisch lösbar und wird daher über die Monte-Carlo Simulation numerisch gelöst.

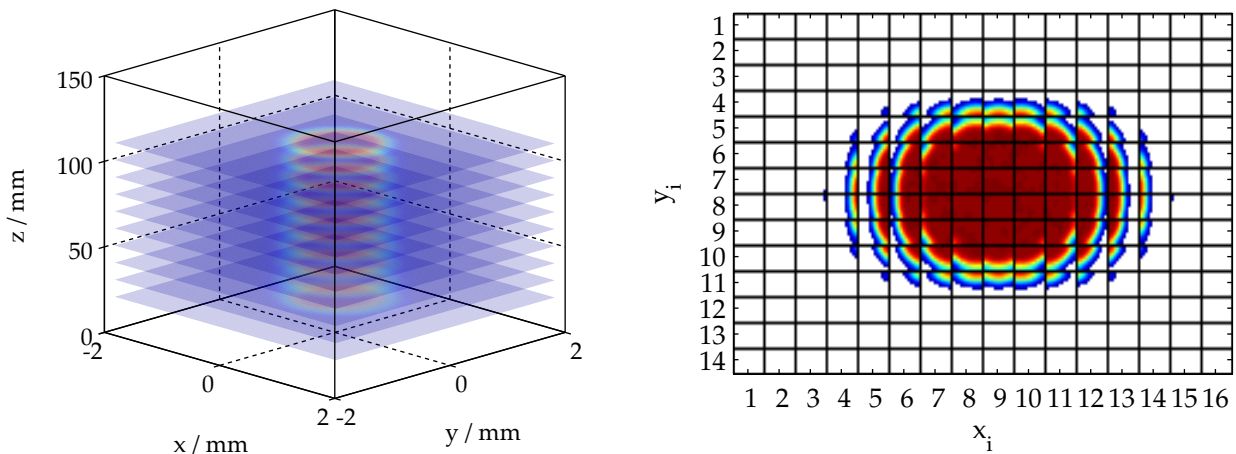
Innerhalb der GATE Simulation können die Strahlenquelle und die zugehörigen Systemkomponenten gewählt werden. Zur Beschreibung der Röntgenröhre wird eine ausgedehnte Gamma-Quelle vom Typ „general particle source“ mit rechteckigem Brennfleck ($\delta x_S \times \delta y_S$) und konstantem Emissionsspektrum (im Energiebereich $E_{\min} - E_{\max}$) verwendet. Die Abstrahlcharakteristik wird als isotrop ausgewählt und das polare Abstrahlwinkelintervall ($[\Theta_{S,\min}, \Theta_{S,\max}]$) auf den Ak-



(a) Darstellung der Anzahl der simulativ detektierten Quanten n (alle Energien) in Abhängigkeit des Abstrahlkegels $\Theta_{S,\max}$ der Röntgenröhre. Die Fehlerbalken der Datenpunkte sind kleiner als die Linienbreite der Fitfunktion $n(\Theta_{S,\max}) = A / (\cos(\Theta_{S,\min}) - \cos(\Theta_{S,\max}))$.

(b) Energiespektrum der primären Quanten in Luft und Vakuum, vergleichsweise mit 2048 und 10 Energiekanälen histogrammiert. Die Abnahme von bis zu 10 % bei kleineren Energien ist auf die Schwächung in Luft zurückzuführen.

Abbildung 15: Untersuchung zur Wahl des minimalen primären Abstrahlwinkels $\Theta_{S,\max}$ anhand der Zählrate a) und des Energiespektrums b). Für die Standardkonfiguration kann ein Abstrahlwinkel von $\Theta_{S,\max} = 0,155^\circ$ gewählt werden.



(a) Dreidimensionale örtliche Darstellung des über alle Energiekanäle summierten Intensitätsprofils des Primärstrahls $\dot{N}_0(\vec{r}_i) = \sum_k \dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$.

(b) Abbildung der ortsabhängigen Brennfleckaktivität $\dot{N}_{BF}(\vec{r}_{S,l}, \vec{r}_i) = \sum_k \dot{N}_{BF}(\vec{r}_{S,l}, \vec{r}_i, E_k)$ für Objektvoxel aus der zentralen Objektschicht. Kästchen mit schwarzer Umrandung kennzeichnen das entsprechende Objektvoxel (\vec{r}_i). Die Falschfarbendarstellung innerhalb der Kästchen entspricht der Aktivitätsverteilung im Brennfleck.

Abbildung 16: Simulation des primären Intensitätsprofils $\dot{N}_0(\vec{r}_i)$ a) und der daraus berechneten ortsabhängigen Abstrahlverteilung $\dot{N}_{BF}(\vec{r}_{S,l}, \vec{r}_i)$ der Röntgenquelle b). Beide Abbildungen verwenden eine Falschfarben-Darstellung mit JET-Farbkodierung.

zeptanzbereich des Primärkollimators angepasst. Dazu wird $\Theta_{S,\min} = 0^\circ$ gesetzt und $\Theta_{S,\max}$ bei konstanter Quellenaktivität sukzessive erhöht, bis die Zahl der detektierten Quanten eine umgekehrte Proportionalität zum Emissionsraumwinkel aufweist. Dieses Verfahren ist in Abbildung 15 a) illustriert, die Datenpunkte weichen in dieser Konfiguration $< 0,1\%$ von der Fitfunktion ab. Bei einer Veränderung des Winkelbereichs kann die Anzahl der emittierten Röntgenquanten entsprechend mit dem Raumwinkelkorrekturfaktor $2\pi \cdot (\cos(\Theta_{S,\min}) - \cos(\Theta_{S,\max}))$ gewichtet werden. Ein virtueller Detektor innerhalb des Objektvolumens registriert die kollimierten Röntgenphotonen. Es wird ein sogenannter „Phase Space Actor“ eingesetzt, der die Ereignisse im internationalen Phase-Space Format[128] der IAEA (International Atomic Energy Agency) aufzeichnet. Neben der Energie und Position der Photonen lässt sich so auch die Richtung speichern und damit das komplette Strahlungsfeld bestimmen: Eine dreidimensionale Histogrammierung liefert die energieabhängige Primärintensität innerhalb der virtuellen Detektorebene. Durch lineares Backtracking wird dann das Strahlungsfeld $\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$ entlang der z -Achse berechnet, vgl. Abbildung 16 a). Dies ist zulässig, da das Primärspektrum weder signifikante Beiträge von Compton-Streuung noch von Fluoreszenzstrahlung aufweist. Der Anteil direkter Strahlung im Fall der Standardkonfiguration liegt bei $> 99,99\%$. Wie in Abbildung 15 b) ersichtlich, ist der signifikante Beitrag zur Schwächung durch die Luft im Systemvolumen bedingt.

Zur Bestimmung der ortsabhängigen Abstrahlverteilung der Röntgenquelle wird eine Diskretisierung der Brennfleckfläche mit einer rechteckigen Parkettierung durchgeführt. Die zentralen Ortspositionen der diskreten Brennfleckflächenelemente wird durch die Vektoren $\vec{r}_{S,l}$ mit $l \in \{1, \dots, \#\text{Brennfleckpixel}\}$ beschrieben. Mithilfe des beschriebenen Backtrackings lässt sich für jedes Voxel mit Position \vec{r}_i im Objektbereich die energie- und ortsabhängige Aktivitätsverteilung $\dot{N}_{BF}(\vec{r}_{S,l}, \vec{r}_i, E_k)$ des Brennfleckelements mit Ortsvektor $\vec{r}_{S,l}$ bestimmen. Anschaulich beschreibt

die Größe $\dot{N}_{\text{BF}}(\vec{r}_{S,l}, \vec{r}_i, E_k)$ also die Anzahl der Photonen der Energie E_k , welche pro Zeiteinheit aus einem Brennfleckelement am Ort $\vec{r}_{S,l}$ emittiert werden und deren Trajektorie ein gegebenes Voxel im Objektbereich mit der Position \vec{r}_i ohne Schwächung am Objekt schneidet. Sie wird im Weiteren zur Berechnung der Röntgenschwächung und der Streuwinkelverteilung benötigt. Abbildung 16 b) zeigt die Intensitätsverteilung für Volumenelemente aus der zentralen Objektschicht.

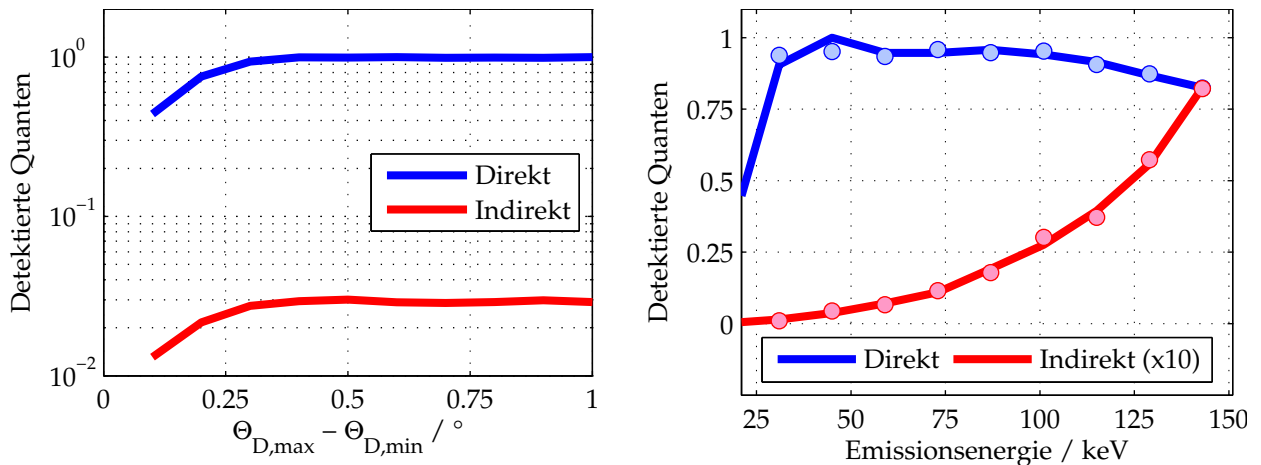
3.2.3. Streuung

Wie bei der Ermittlung der Primärintensitätsverteilung $\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$, muss für die Bestimmung der ortsabhängigen Raumwinkelfunktion $\delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)$ eine Integration über den kompletten Detektionsraumwinkel ausgeführt werden. Unter Verwendung einer isotrop abstrahlenden ausgedehnten (Volumen-)Quelle mit Aktivität $\dot{a}_{V0}(\vec{r}_i, E_k)$ lässt sich die Zählrate des Detektors über

$$\dot{N}(\vec{r}_i, E_k) = \dot{a}_{V0}(\vec{r}_i, E_k) \cdot V_{\text{Vox}} \cdot \underbrace{\int A_S(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_D, E_k) d\Omega}_{:=\delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)} \quad (3.11)$$

berechnen. Dabei beschreibt $A_S(\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_D, E_k)$ die Schwächung der Strahlung auf dem Pfad $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_D$ aufgrund von Systemkomponenten. Das Integral in Gleichung 3.11 ist im Allgemeinen nicht analytisch lösbar und wird daher mittels einer GATE-Simulation approximiert.

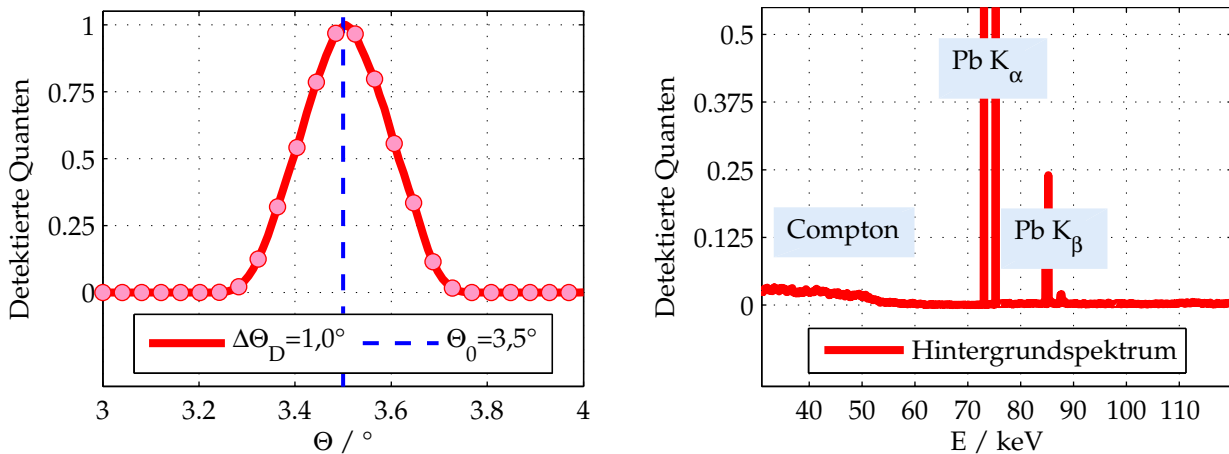
Innerhalb der GATE Simulation wird eine ausgedehnte Strahlenquelle mit isotroper Abstrahlcharakteristik im Objektbereich des Simulationsvolumens platziert. Dazu wird eine Volumenquelle vom Typ „general particle source“ (Gamma Emitter) mit diskretem Energiespektrum verwendet. Die Ausdehnung der Quelle sei durch $\delta x_V \times \delta y_V \times \delta z_V$ gegeben und der Abstrahlwinkelbereich durch $\Delta\Theta_D = \Theta_{D,\text{max}} - \Theta_{D,\text{min}}$ definiert. Von der Strahlenquelle emittierte Quanten können nach



(a) Intensität der direkten und indirekten Strahlung in Abhängigkeit des Abstrahlwinkels der Volumenquelle bei angepasster Simulationszeit. Alle Energien summiert.

(b) Anteil von direkter und indirekter detektierte Strahlung in Abhängigkeit der Emissionsenergie bei $\Delta\Theta_D = 0,5^\circ$

Abbildung 17: Anteil von direkter und indirekter Strahlung in Abhängigkeit des Quellenabstrahlwinkelbereichs $\Delta\Theta_D$ in a) und in Abhängigkeit der Emissionsenergie b).



(a) Simulierte Streuwinkel-Verteilungsfunktion des Systems $p_{SW}(\Theta_j) = \sum_i \sum_k p_{SW}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)$ bei einem Abstrahlintervall $\Delta\Theta_D = 1,0^\circ$ und einem Designwinkel von $\Theta_0 = 3,5^\circ$. Zur Visualisierung wurde p_{SW} auf sein Maximum normiert.

(b) Auf das Maximum normiertes Hintergrundspektrum bei Verwendung einer weißen Röntgenquelle.

Abbildung 18: Simulation der Systemfunktionen unter Verwendung der Standardkonfiguration: Winkelverteilung a) und Hintergrundspektrum b).

dem Durchlaufen möglicher Wechselwirkungsprozesse mit den Anlagenkomponenten (Streukollimator, Detektorabschirmung,...) durch einen „realen“ Detektor registriert werden. Die Detektorausgabe erfolgt im ASCII-Format und beinhaltet neben den Ortskoordinaten der Detektion und der Entstehung des einzelnen Quants auch dessen Energie und die Anzahl der vor der Detektion geschehenen Wechselwirkungen mit den Systemkomponenten. Auf diese Art lassen sich direkte (D), d.h. ohne Wechselwirkung mit dem System, und indirekte (BG) Ereignisse unterscheiden. In Abbildung 17 a) ist der Anteil von direkter und indirekter Strahlung für die Standardkonfiguration in Abhängigkeit des Abstrahlwinkelbereichs $\Delta\Theta_D$ gezeigt. Analog zu Unterabschnitt 3.2.2 ist die Simulationszeit mit dem Abstrahlraumwinkelelement gewichtet worden. Ab $\Delta\Theta_D \approx 0,3^\circ$ wird der Streukollimator komplett ausgeleuchtet und es tritt keine signifikante Veränderung der detektierten Intensität bei weiterer Vergrößerung von $\Delta\Theta_D$ auf. Eine energieaufgelöste Darstellung der Detektionsanteile für den Fall $\Delta\Theta_D = 0,5^\circ$ ist in Abbildung 17 b) zu finden. Die Abnahme der Intensität direkter Strahlung bei hohen Röntgenenergien ist durch Compton-Rückstreuung aus dem zylindrischen Detektorvolumen bedingt. Die daraus in den Systemkomponenten entstehende Fluoreszenzstrahlung sowie der erhöhte Compton-Wirkungsquerschnitt bei höheren Energien führen zur Zunahme der Intensität von indirekter Strahlung. Durch die Kenntnis der Entstehungsorte der auf direktem Wege detektierten Quants, lässt sich die Anzahl der aus einem Voxel am Ort \vec{r}_i im Objektbereich emittierten Quants energieabhängig mit Hilfe einer Histogrammierung bestimmen. Somit erhält man eine Approximation für $\delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)$ gemäß Gleichung 3.11.

Jedem auf direktem Weg detektierten Quant ist durch den festgelegten Entstehungsort \vec{r} ein Objektvoxel am Ort \vec{r}_i zugeordnet. Neben der Kenntnis des Entstehungs- und Detektionsortes (\vec{r}_D) ist durch die Primärstrahlsimulation ebenfalls die ortsabhängige Abstrahlverteilung der primären Röntgenquelle $N_{BF}(\vec{r}_{S,L}, \vec{r}_i, E_k)$ bekannt. Unter Verwendung dieser Verteilungsfunktion lassen sich für jedes Objektvoxel Startorte (\vec{r}_S) in der Fokusebene generieren. Aus den resultierenden Tripeln ($\vec{r}_S, \vec{r}, \vec{r}_D$) können die in dem Objektvoxel am Ort \vec{r}_i auftretenden Streuwinkel energieab-

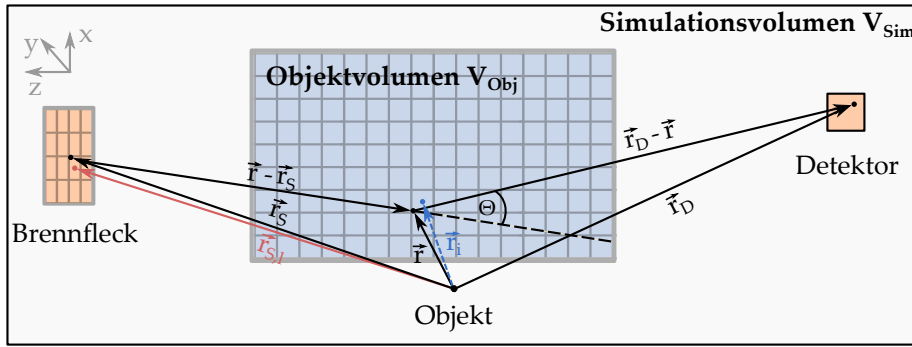


Abbildung 19: Visualisierung der Streupfadsimulation ($\vec{r}_S \rightarrow \vec{r} \rightarrow \vec{r}_D$) zur Bestimmung der Winkelverteilungsfunktion $p_{SW}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)$.

hängig über

$$\cos(\Theta) = \frac{(\vec{r} - \vec{r}_S) \cdot (\vec{r}_D - \vec{r})}{\|\vec{r} - \vec{r}_S\| \|\vec{r}_D - \vec{r}\|} \quad (3.12)$$

berechnet werden (vgl. Abbildung 19). Die anschließende Histogrammierung liefert die Winkelverteilungsfunktion des Systems $p_{SW}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)$. Im Fall der Standardkonfiguration mit einem Designwinkel von $\Theta = 3,5^\circ$ ist die Winkelverteilungsfunktion in Abbildung 18 a) dargestellt und zeigt eine Winkelunschärfe von $\Delta\Theta = 0,21^\circ$ (FWHM).

Während die Winkelverteilungsfunktion mit Daten der Primärstrahlsimulation berechnet wird, lassen sich die Systemkomponentenbeiträge $\dot{N}_{FM, Sys}(\vec{r}_i, E_k)$ aus den, auf indirektem Weg, d.h. nach zusätzlicher Wechselwirkung mit dem System, detektierten Quanten aufstellen. Dafür wird das energieabhängige Verhältnis

$$\alpha_{BG}(E_k) = \frac{\dot{N}_{BG}(E_{\hat{k}})}{\dot{N}_D(E_k)} \quad (3.13)$$

der indirekt (BG) detektierten Quanten $\dot{N}_{BG}(E_{\hat{k}})$ und der direkt (D) detektierten Quanten $\dot{N}_D(E_k)$ definiert. Dabei entspricht $E_{\hat{k}}$ der Energie zum Zeitpunkt der Emission des Quants von der Volumenquelle. Für eine isotrop abstrahlende Quelle mit konstantem Energiespektrum wird das resultierende Hintergrundspektrum in Abbildung 18 b) im Fall der Standardkonfiguration gezeigt. Neben Anteilen aus Compton-Streuung tragen insbesondere die Blei-Fluoreszenzen des Streukollimators und der Detektorabschirmung zum Untergrund bei.

Durch die Kenntnis der Systemfunktionen können wichtige Kenngrößen zum Vergleich unterschiedlicher Systeme bestimmt werden. Mit Hilfe der Winkelverteilungsfunktion $p_{SW}(\vec{r}_i, \Theta_j, E_k)$ lässt sich gemäß Gleichung 2.18 die spektrale Auflösung berechnen. Die Funktionen $\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$ und $\delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)$ erlauben neben der Bestimmung des maximalen Quantenflusses auch die Ermittlung der Ortsauflösung in lateraler ($\delta x, \delta y$) bzw. longitudinaler (δz) Richtung.

3.2.4. Preprocessing

Die Simulation von Streu- und Beugungsspektren setzt die Kenntnis der Materialverteilung innerhalb des Objektbereichs voraus. Zu deren Beschreibung wird innerhalb der MATLAB Umgebung eine Datenstruktur für das zu untersuchende Phantom generiert. Sie beinhaltet neben der Materialverteilung auch die Position und Orientierung relativ zu den Koordinaten aus der GATE

Simulation. Die Materialverteilung wird analog zur Beschreibung voxelierter Phantome in GATE über eine Matrix $M_P \in \mathbb{N}^{n_P \times n_P}$ mit Werten $M_{P,ij}$ definiert, wobei die Koordinaten ij die Position innerhalb des Phantoms bestimmen. Der Wert jedes Eintrags $M_{P,ij}$ korrespondiert mit dem dort vorliegenden Material. Die Materialien werden innerhalb einer Datenbank anhand ihrer chemischen Zusammensetzung, entweder durch eine stöchiometrische Beschreibung oder durch Angabe der Massenanteile der einzelnen Bestandteile und ihrer Massendichte definiert. Daraus lassen sich die Atomformfaktoren und inkohärenten Streufunktionen (entnommen aus [46]) sowie die Massenschwächungskoeffizienten (entnommen aus [45]) als gewichtete Summe der einzelnen Bestandteile gemäß

$$\frac{\mu(E, Z)}{\rho} = \sum_i w_i \frac{\mu_i(E, Z)}{\rho_i} \quad \|f(q, Z)\|^2 = \sum_i w_i \|f_i(q, Z)\|^2 \quad S(q, Z) = \sum_i w_i S_i(q, Z) \quad (3.14)$$

bestimmen. In diesem „idealen Gasmodell“ der Atome werden keine intramolekularen Interferenzen berücksichtigt. Zur Beschreibung dieser Effekte lassen sich μ , f und S optional für ein definiertes Material individuell angeben. Zur Beschreibung der Beugungseffekte werden Pulverdiffraktometrie Daten (PDF) des internationalen Zentrums für Beugungsdaten (ICDD) verwendet. Die eingesetzte sogenannte PDF-Datenbank[129] (Release 2000) beinhaltet die Positionen und relativen Intensitäten der Röntgenreflexe zahlreicher Materialien⁴.

Unter Vernachlässigung von Röntgenschwächung im Objekt, kann jetzt gemäß Gleichung 3.8 für jedes Objektvoxel am Ort \vec{r}_i mit Material m der energieabhängige Beitrag $\dot{N}_{S,C/R/D}(\vec{r}_i, E_k, m)$ für die Wechselwirkungsprozesse einzeln und materialabhängig berechnet werden. Dabei geben die Indizes C, R bzw. D an, ob es sich um Beiträge aus Compton- oder Rayleigh-Streuung bzw. Röntgenbeugung handelt. Die zugehörigen Wirkungsquerschnitte werden mit Hilfe der Gleichungen 2.3, 2.4 bzw. 2.15 ausgewertet. Da bei der Simulation von $\dot{N}_0(\vec{r}_i, E_k)$ und $\delta\Omega(\vec{r}_i, E_k)$ jeweils „weiße“ Röntgenspektren von den Strahlenquellen emittiert werden, gilt es das reale Emissionsspektrum der zu simulierenden Röntgenröhre zu berücksichtigen. Dazu wird die Primärstrahlverteilung $\dot{N}_0(\vec{r}, E_k)$ mit dem normierten Spektrum des verwendeten Röntgenstrahlers multipliziert. Es ist anzumerken, dass die Berechnung der individuellen Beiträge $\dot{N}_{S,C/R/D}(\vec{r}_i, E_k, m)$ bereits durchgeführt werden kann, bevor die Materialverteilung bzw. das Phantom bekannt ist.

3.2.5. Scans

Unter Kenntnis des Objekts (Phantomdefinition), d.h. der Materialverteilung $M_P(\vec{r}_i) := M_{P,ij}$, lässt sich das Gesamtspektrum als Linearkombination

$$\dot{N}(E_k) = \delta E_{\text{Det}}(E_k) \otimes \sum_{j \in \{C,R,D\}} \sum_{i=1}^{\#\text{Voxel}} \alpha_j \cdot \dot{N}_{S,j}(\vec{r}_i, E_k, M_P(\vec{r}_i)) \cdot (1 + \alpha_{\text{BG}} \cdot \dot{N}_{\text{EM, Sys}}(\vec{r}_i, E_k)) \quad (3.15)$$

der einzelnen Streuteile gefaltet mit der energieabhängigen Auflösungsfunktion $\delta E_{\text{Det}}(E_k)$ des Detektors auffassen. Die Berücksichtigung der Beiträge von mit der Röntgenanlage wechselwirkenden Photonen $\dot{N}_{\text{EM, Sys}}(\vec{r}_i, E_k)$ geschieht unter der Annahme, dass die aus einem Voxel stammende Hintergrundintensität proportional zu dessen Streuvermögen ist. Obwohl die absoluten Intensitäten durch die o.g. Gleichungen berechnet werden können, wurden in Gleichung 3.15

⁴Aktuell fasst die Datenbank mehr als 340.000 Einträge, <http://www.icdd.com>, abgerufen im Mai 2017.

Gewichtungsfaktoren α_j eingeführt. Hierdurch lassen sich zunächst unbekannte Eigenschaften realer Proben, wie beispielsweise der Grad der Kristallinität, modellieren. Die Bestimmung der Koeffizienten geschieht durch die Verwendung von Referenzmessungen $\dot{N}_{S,Ref}(E_k)$ verschiedener Materialien. Über eine Kleinste-Quadrate Minimierung mit Nichtnegativitätsbedingung (NNLS)

$$\vec{\alpha}_{Ref} = \arg \min_{\vec{\alpha}} \left\| \dot{N}_S(E_k, \vec{\alpha}) - \dot{N}_{S,Ref}(E_k) \right\|_2^2 \quad (3.16)$$

werden die Werte α_j angepasst. Dies geschieht unter der Verwendung eines konventionellen NNLS Algorithmus[130].

Durch die Anpassung der Intensitätskoeffizienten entspricht die Summe $\sum_k \dot{N}(E_k)$ der Gesamtzählrate \dot{N}_{Ges} . Für die Simulation eines Pulshöhenspektrums $N(E_k)$, welches über eine Dauer t_{mess} akquiriert werden soll, wird die erwartete Anzahl der detektierten Photonen N_{erw} durch die Ziehung einer Poisson verteilten Zufallszahl mit Erwartungswert $t_{mess} \cdot \dot{N}_{Ges}$ bestimmt. Anschließend wird $\dot{N}(E_k)$ selbst als Verteilungsfunktion interpretiert und N_{erw} Zufallszahlen entsprechend dieser Energieverteilung gezogen und zu dem Spektrum $N(E_k)$ histogrammiert.

Da nach der Simulation und Bestimmung aller System bezogenen Matrizen (wie in Unterabschnitt 3.2.4 beschrieben) zur Berechnung eines Beugungsspektrums unter Vernachlässigung von Schwächung, lediglich eine Summation gemäß Gleichung 3.15 mit anschließender diskreter Faltung auszuführen ist, lassen sich einzelne Spektren unter Verwendung einer typischen Konfiguration innerhalb weniger Millisekunden auf einem gewöhnlichen Desktop-PC⁵ berechnen. Der Scan eines Objekts, d.h. das Abtasten durch die Aneinanderreihung mehrerer Einzelmessungen, kann mittels Simulation vieler Einzelspektren realisiert werden. Durch die sukzessive Anpassung der Position und Orientierung des Phantoms relativ zum Simulationskoordinatensystem können auf diese Weise unter anderem zweidimensionale Raster-scans (xy -Ebene), Linienscans zur Bestimmung des Intensitätsprofils des VOI (z -Scan) oder CT-Scans ($x\gamma$ Sinogramm) imitiert werden.

3.2.6. Schwächung

Während die Spektrensimulation in Unterabschnitt 3.2.5 eine lineare Operation beschreibt, wird bei der Berücksichtigung der nicht linearen Schwächung der Berechnungsaufwand für die Simulation erhöht. Betrachtet man die auf direktem Weg detektierten Photonen, so sind, wie in Gleichung 3.11 beschrieben, die Streuvertices in Form von Tripeln $(\vec{r}_S, \vec{r}, \vec{r}_D)$ für jeden Photon bekannt. Für alle Photonen mit Streuvertex innerhalb eines Objektvoxels an der Stelle \vec{r}_i lassen sich die Voxelpositionen \vec{r}_{ijpjv} der Objektvoxel bestimmen, die durch den Streupfad des 'j_p-ten' Photons geschnitten werden. Unter Verwendung eines linearen Backtracking Verfahrens, werden die zugehörigen Pfadlängen l_{ijpjv} ebenfalls ermittelt. Für hinreichend kleine Voxelgrößen, kann die Annahme gemacht werden, dass die Pfadlängen der Photonen, welche durch das Objektvoxel an der Stelle \vec{r}_i laufen, ähnlich sind. Somit lässt sich für jedes Objektvoxel eine mittlere Pfadlänge durch jedes geschnittene Volumenelement berechnen. Diese Weglängen lassen sich unabhängig von der Materialzusammensetzung des Phantoms bereits vor der Spektrenberechnung bestimmen. Ist eine Voxel-Material-Zuordnung gegeben, so muss bei der Berechnung der Schwächung lediglich über die einzelnen Materialien iteriert werden.

⁵Desktop PC mit Core i3-3220 Prozessor @ 3,30 GHz, 32 GB RAM und OS Windows 10.

3.3. Ergebnisse

Im Folgenden werden Ergebnisse gezeigt, welche mit Hilfe des beschriebenen Simulationsverfahrens erzielt wurden. Es werden Untersuchungen zur Validierung des Verfahrens vorgestellt sowie Auswirkungen der Änderung von Anlagen- und Simulationsparametern dargelegt. Ebenfalls werden Studien zum Vergleich von Anlagegeometrien und zur Optimierung von Streukollimatoren dargelegt.

3.3.1. Validierung

Um das Simulationstool zuverlässig für die Optimierung einer Anlagegeometrie verwenden zu können, wurden einige Messungen zur Validierung bereits vor der experimentellen Realisierung der aktuellen Anlagegeometrie (vgl. Kapitel 5) durchgeführt. Die Beschreibung der alten Anlagegeometrie ist beispielsweise in [131] zu finden. Im Rahmen der Validierung werden Untersuchungen zur Primärstrahlsimulation, Streuintensität bei Variation der Sekundärstrahlkonfiguration, Intensitätsverteilung innerhalb des VOI und Spektrensimulation beschrieben.

Primärstrahl

Zur Bestimmung der Intensitätsverteilung des Primärstrahls wurde ein experimenteller Aufbau gemäß Abschnitt 5.1 mit Nadelstrahl-Primärkollimator realisiert. Mit Hilfe des Flatpanel-Detektors lassen sich so die Primärstrahlprofile für verschiedene Primärblenden-Konfigurationen aufnehmen. Eine schematische Darstellung des Aufbaus ist ebenfalls in Abbildung 21 gezeigt. Die verwendeten Blenden bestehen aus TRIAMET⁶ S18, einem Verbundmetall mit einem Wolframanteil von 95 %.

Bei der Durchführung wurden verschiedene Primärblenden-Konfigurationen gemäß Tabelle 1 realisiert. Zur Minimierung des Bildrauschens aufgrund von Schwankungen in der Primärintensität wurden pro Konfiguration 10 Aufnahmen mit dem Flatpanel Detektor bei einer Bildwiederholrate von 10 Hz gemacht und gemittelt. Als Strahlparameter wurde bei allen Messungen $U = 110 \text{ kV}$ und $I = 2 \text{ mA}$ gewählt. Somit konnte eine Genauigkeit (Standardabweichung) der detektierten Intensität von $< 3,0 \%$ sichergestellt werden.

Zum Vergleich der experimentellen Aufnahmen mit den simulierten Daten wurde das Strahlprofil aus den Bildern isoliert und die integrale Intensität, sowie die Halbwertsbreiten in x - und y -Richtung bestimmt. Die Anlagen spezifischen Parameter des experimentellen Aufbaus wurden in der Simulation übernommen. Da die simulative Detektion in der Primärstrahlsimulation mit einem idealen virtuellen Detektor durchgeführt wird, mussten die orts aufgelösten simulierten Bilder des Strahlprofils mit der Punktbildfunktion des Flatpaneldetektors gefaltet werden. Dazu wurde die Punktbildfunktion mittels Fouriertransformation der Modulationstransferfunktion (MTF) berechnet. Die MTF konnte hierfür aus den Herstellerangaben des Detektors entnommen werden.

In Abbildung 20 a) ist der Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Primärintensität in Abhängigkeit der Blendenkonfiguration dargestellt. Mit Ausnahme der Konfigurationen 13 – 16,

⁶<http://wolfram-industrie.de/werkstoffe/schwermetall-auf-wolframbasis-triamet/>, am 08.09.2017 aufgerufen.

liegen die Intensitäten der simulierten Daten im Toleranzbereich der experimentellen Daten und weichen im Mittel nicht mehr als 3 % ab. Es ist anzumerken, dass alle Blenden durch ein Drahterodierverfahren mit einer Genauigkeit von $\approx 0,01$ mm hergestellt wurden. Eine Ausnahme bilden die Blenden mit den Durchmessern 1,0 mm bzw. 1,0 mm, welche durch Drehen bzw. Bohren mit einer Toleranz $< 0,05$ mm gefertigt wurden. Abbildung 20 b) zeigt den Vergleich der Halbwertsbreiten des Strahlprofils in x- und y-Richtung. Die mittlere Abweichung liegt bei $< 5\%$, größere Abweichungen sind tendenziell bei größeren Blendendurchmessern zu beobachten.

Tabelle 1: Übersicht der Primärkollimator-Konfigurationen

Konfiguration	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
d_{S1} / mm	0,30	2,50	3,00	2,00	0,50	2,00	3,00	2,50	1,0	3,00
d_{S2} / mm	0,30	0,30	0,30	0,30	0,50	0,50	0,50	0,50	0,80	0,80
Konfiguration	11	12	13	14	15	16	17	18	19	
d_{S1} / mm	2,50	2,00	1,50	2,00	2,50	3,00	2,00	2,50	3,00	
d_{S2} / mm	0,80	0,80	1,0	1,0	1,0	1,0	1,50	1,50	1,50	

Variation des Streuwinkels

Zur Untersuchung der Änderung eines Beugungsspektrums bei Variation des Beugungswinkels ist der experimentelle Aufbau aus Anhang A verwendet worden. Dabei lässt sich der Abstand zwischen den Streublenden kontinuierlich verändern. Auf diese Weise kann der Streuwinkel in einem Winkelbereich von $2,8^\circ - 5,2^\circ$ variiert werden. Als Probe dient ein 1,0 mm dünnes Eisenblech. Der Nadelstrahl wird mit den Primärblenden $d_{S1} = 2,0$ mm und $d_{S2} = 0,8$ mm realisiert.

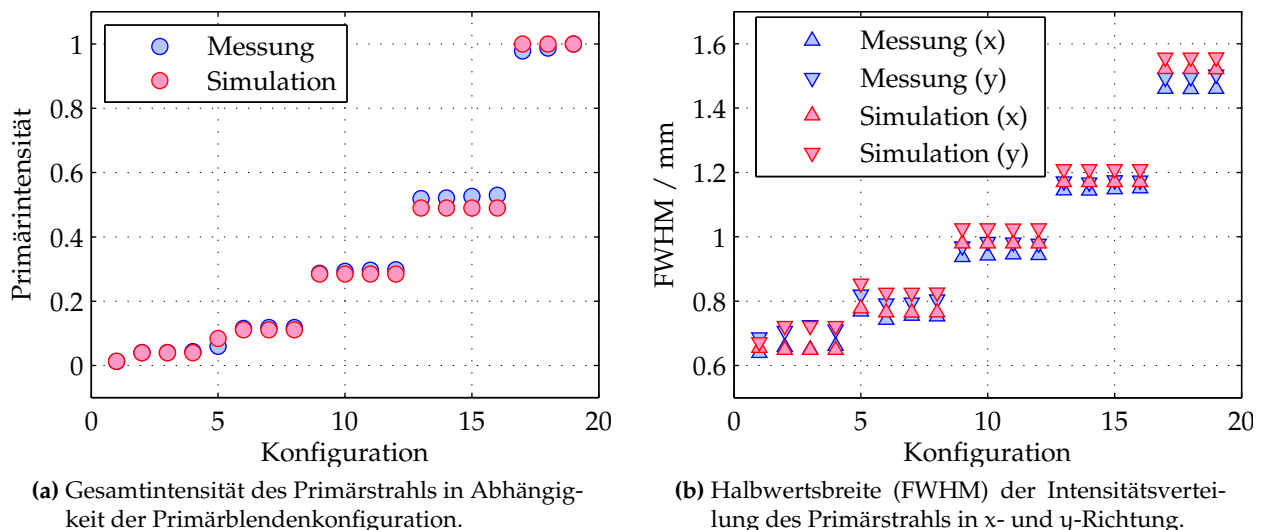


Abbildung 20: Validierung der Primärstrahlsimulation: Vergleich von Messung und Simulation anhand der Primärintensität a) und der Halbwertsbreite b).

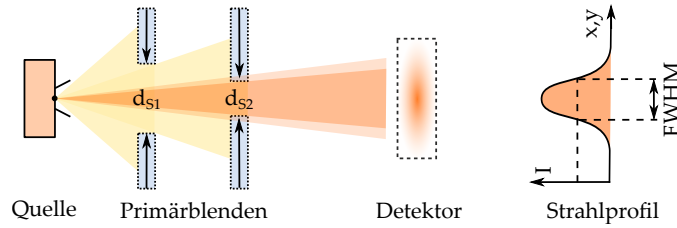
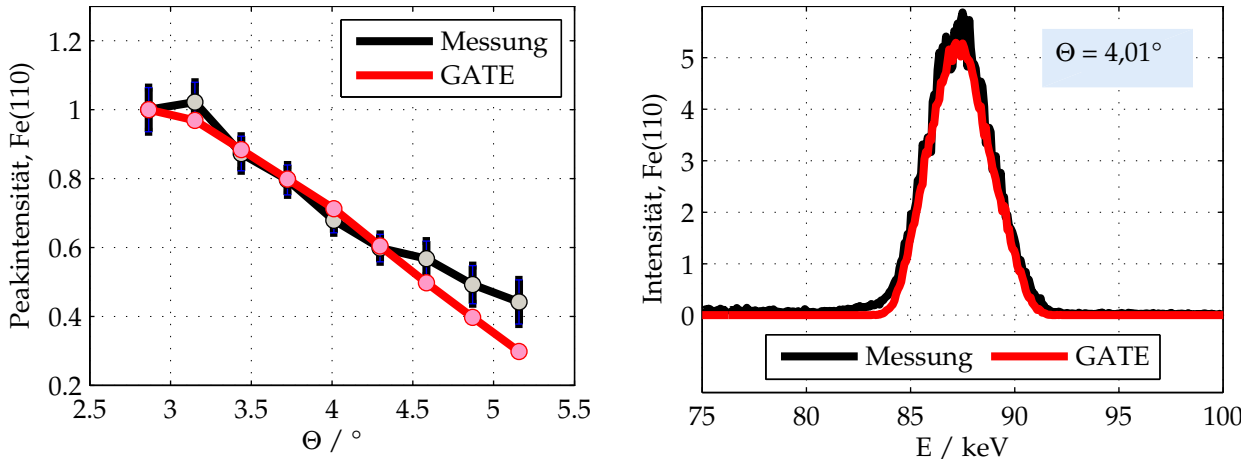


Abbildung 21: Schematische Darstellung des Aufbaus zur Validierung der Primärstrahl-Simulation.



(a) Integrale Intensität des Eisen (110) Reflexes in Abhängigkeit des Streuwinkels.

(b) Gemessenes und simuliertes Eisenspektrum bei $\Theta = 4,01^\circ$.

Abbildung 22: Validierung bei Variation des Streuwinkels: Vergleich von gemessenen und simulierten Daten in Bezug auf die integrale Peakintensität a) und die Peakform b).

Bei der Durchführung wird das Eisenblech in jeder Winkelkonfiguration mittig innerhalb des VOI platziert. Als Strahlparameter werden $U = 150 \text{ kV}$ und $I = 10 \text{ mA}$ gewählt und die Beugungsspektren über eine Dauer von $t_{\text{mess}} = 100 \text{ s}$ akquiriert. Bei den gemessenen Eisenspektren wird der (110) Hauptpeak mit Hilfe einer Gauß-Fitfunktion angepasst, um die signifikanten Peakparameter zu extrahieren.

Das experimentelle Prozedere wird auf die Simulationsparameter der GATE basierten Simulation übertragen. Die erste Messung ($\Theta = 2,87^\circ$) wird dabei als Referenz für die Normierung herangezogen. Ein Vergleich der Beugungsspektren im Hinblick auf die Peakform zeigt, dass insbesondere Halbwertsbreite und Peakposition hinreichend genau nachempfunden werden. Abbildung 22 b) demonstriert exemplarisch den Vergleich zwischen simuliertem und gemessenem Spektrum bei $\Theta = 4,01^\circ$. Die durch die GATE Simulation ermittelten Peakintensitäten liegen dabei nahezu innerhalb des Toleranzbereichs der Messdaten, vgl. Abbildung 22 a).

Intensitätsprofil des VOI

Das Intensitätsprofil des „Volume of Interest“ (VOI) ist eine wichtige Systemgröße, welche Information über das räumliche Auflösungsvermögen des XDI-Systems beinhaltet und häufig in Rekonstruktionsverfahren benötigt wird [70][69]. Wie auch bei der Untersuchung zur Variation des Streuwinkels wird auch bei dieser Untersuchung der experimentelle Aufbau aus Anhang A

mit den Nadelstrahlparametern $d_{S1} = 2,0 \text{ mm}$ und $d_{S2} = 0,8 \text{ mm}$ verwendet. Zur eindimensionalen Abtastung des VOI wird ein $1,0 \text{ mm}$ dünnes Eisenblech benutzt, welches schrittweise in longitudinaler Richtung durch den sensitiven Systembereich verfahren wird.

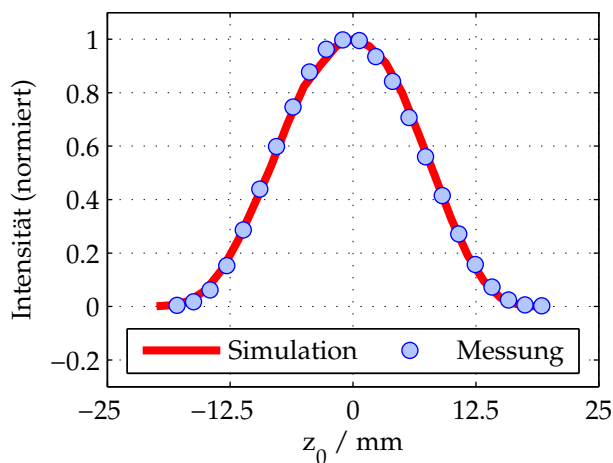
Zu Beginn wird das Eisenblech außerhalb des VOI platziert und anschließend sukzessive in Abständen von $\delta z = 1,0 \text{ mm}$ in positive z -Richtung verschoben. Bei jeder Position wird ein Beugungsspektrum mit $U = 150 \text{ kV}$ und $I = 10 \text{ mA}$ für $t_{\text{mess}} = 100 \text{ s}$ akquiriert. Aus den gemessenen Eisenspektren wird anschließend die integrale Peakintensität des (110) Reflexes mittels Gauß-Fit bestimmt.

Die Parameter des experimentellen Aufbaus werden zur Simulation eines z -Scans benutzt. Der Vergleich zwischen den experimentellen und simulierten Daten der Peakintensität des Fe-(110) Röntgenreflexes in Abhängigkeit der longitudinalen Position ist in Abbildung 23 a) dargestellt. Die Abweichung des simulierten Profils von der gemessenen Funktion beträgt weniger als 2%.

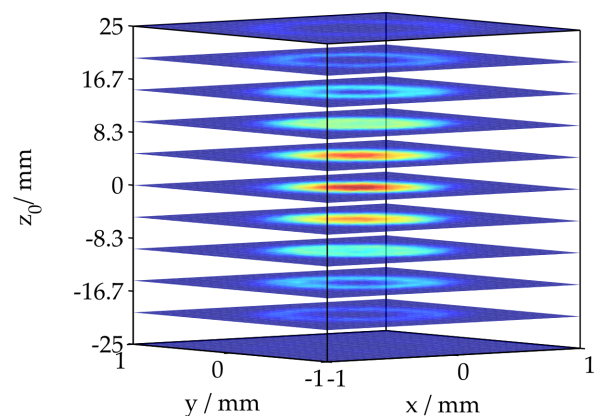
Unabhängig von der verwendeten Probe, lässt sich mit den simulierten Systemfunktionen der sensitive Systembereich charakterisieren. Abbildung 23 b) zeigt die entsprechende dreidimensionale Volumendarstellung des VOI.

Spektrenanpassung

Die Anpassung von simulierten Streuspektren an gemessene Diffraktogramme wird exemplarisch anhand von vier Materialien gezeigt, welche innerhalb dieser Arbeit am häufigsten in den Messphantomen eingesetzt werden (vgl. Abschnitt 6.1). Bei der Untersuchung wird der experimentelle Aufbau gemäß Abschnitt 5.1 benutzt. Um Textur bedingte Artefakte zu vermeiden, werden als Referenzen lediglich Pulverproben verwendet. Die Pulver werden in ein zylindrisches Glasrohr mit einem Boden aus Zellophanfolie (Stärke $< 0,02 \text{ mm}$) gefüllt und durch manuelle Kompression



(a) Eindimensionales Intensitätsprofil des VOI entlang der z -Achse. Vergleich simulierter und gemessener Daten.



(b) Dreidimensionale Darstellung des VOI mit Hilfe simulierter Systemfunktionen ($N_0, p_{SW}, \delta\Omega$), alle Energien summiert.

Abbildung 23: Validierung durch Untersuchung des sensitiven Volumens einer Röntgenbeugungsanlage. Vergleich zwischen Simulation und Messung für ein eindimensionales Profil entlang der longitudinalen z -Achse a) sowie simulierte dreidimensionale Volumendarstellung des VOI b).

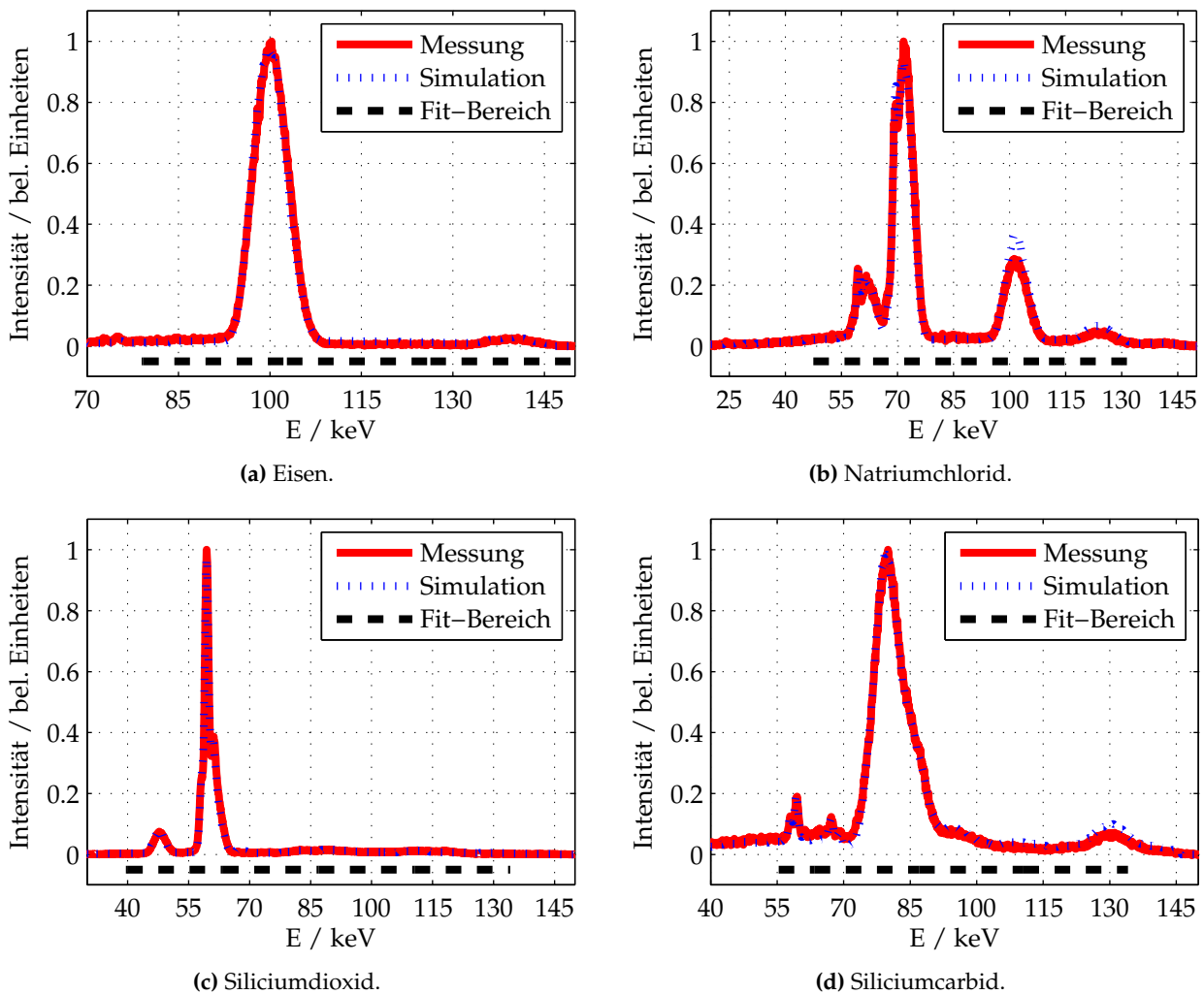


Abbildung 24: Validierung der Intensitätsanpassung der Streuspektren mit Hilfe von Referenzproben. Vergleich zwischen angepassten Streuspektren und gemessenen Daten. Die verwendeten Energiekanalbereiche für die Anpassung sind hervorgehoben.

mit einem Stempel in zylindrische Form gebracht. Aus dem Schüttvolumen (Innendurchmesser des Röhrchens $d_i = (8,00 \pm 0,05)$ mm) und dem Gewicht lassen sich die Schüttdichten ermitteln. Eine Übersicht der Materialien, sowie der zugehörigen Parameter ist in Tabelle 2 zu finden.

Nach der Präparation werden die Referenzproben mittig innerhalb der VOI positioniert und Beugungsspektren für $t_{\text{mess}} = 100$ s bei $U = 150$ kV und $I = 10$ mA aufgenommen. Für die Simulation werden die Anlagen- und Probenparameter aus der Messung verwendet und die Anpassung der Daten nach Gleichung 3.16 unter Berücksichtigung von Schwächung durchgeführt. In Abbildung 24 sind Vergleiche zwischen gemessenen und angepassten simulierten Spektren für die Materialien Eisen, Natriumchlorid, Siliciumdioxid und Siliciumcarbid dargestellt. Der bei der Anpassung verwendete Energiekanalbereich wurde manuell derart gewählt, dass alle signifikanten Beugungspeaks bei der Fitprozedur erfasst werden. Die Bereiche sind jeweils in den einzelnen Abbildungen angezeigt. Es ist anzumerken, dass die Siliciumcarbid Referenzprobe aus technischem Schleifmittelpulver besteht und daher in den hexagonalen Phasen 2H, 4H und 6H vorliegt[132]. Entsprechend wurden bei dieser Probe eine Linearkombination aus mehreren ICDD-PDF Daten

Tabelle 2: Übersicht der ermittelten Probeneigenschaften und verwendeten PDF-Datenbankeinträge

Material	Eisen	Natriumchlorid	Siliciumdioxid	Siliciumcarbid
Schüttdichte / g cm^{-3}	$1,80 \pm 0,05$	$0,70 \pm 0,05$	$0,74 \pm 0,05$	$0,68 \pm 0,05$
Schütthöhe / mm	$8,0 \pm 0,1$	$8,0 \pm 0,1$	$8,0 \pm 0,1$	$8,0 \pm 0,1$
ICDD-PDF Nummer	87-0722	72-1668	68-2237	29-1127/29/30/31

angefettet (2H mit 2 %, 4H mit 42 % und 6H mit 56 %).

3.3.2. Optimierung der Kollimatorgeometrie

In diesem Abschnitt werden Simulationsergebnisse zur Optimierung der Kollimator- und der Anlagengeometrie vorgestellt. Bei einer derartigen Optimierung eines EDXRD-basierten XDI-Systems müssen, abhängig vom zu untersuchenden Objekttyp, grundlegende Spezifikationen festgelegt werden. Hierzu zählen konkret:

- Der Streuwinkel Θ legt den Energiebereich fest, in dem die zu detektierenden Beugungspeaks auftreten; er ist folglich materialabhängig zu wählen.
Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Winkel von $\Theta = 3,5^\circ$ gewählt, um eine möglichst breite Klasse an kristallinen Materialien[18], biologische Proben[21] und Flüssigkeiten[59] abdecken zu können.
- Die Impulsübertragsauflösung $\delta q/q$ („Beugungspeakbreite“) wird durch den Detektor und den Akzeptanzwinkelbereich des Systems bestimmt. Diese Größe muss auf Basis der konkreten Messanforderungen spezifiziert werden. Hier wurde eine Auflösung von 6 % gewählt, um einen Kompromiss zwischen der resultierenden Zählrate und der Linienauflösung einzugehen[20].
- Die Ortsauflösung kann prinzipiell in alle drei Raumrichtungen unterschiedlich festgelegt werden. Hier soll sie im Milli- bzw. Submillimeter Bereich ($\approx 0,1 - 5 \text{ mm}$) veränderbar sein.
- Die maximale Größe der zu untersuchenden Objekte muss bei der Auslegung eines EDXRD-Systems bekannt sein. Im Falle von CSCT-Systemen ist der größte Objektdurchmesser zu spezifizieren. Im Rahmen der Entwicklung des Laborsystems soll die Untersuchung „handlicher“ Proben im Bereich weniger 100 mm sichergestellt sein.

Unter Zugrundelegung dieser Spezifikationen wurden die folgenden Untersuchungen zur Kollimatoroptimierung unter Verwendung eines „weißen“ Streuers durchgeführt. Bei der Durchführung der Studien wurde stets sichergestellt, dass das Abstrahlwinkelintervall $\Delta\Theta_D$ hinreichend groß gewählt ist. In Abbildung 25 ist diese Prozedur exemplarisch für die Simulation eines Streukollimators in einer Nadelstrahlanordnung dargestellt (vergleiche folgenden Abschnitt). Zur Motivation der simulationsbasierten Kollimatoroptimierung wurde in diesem Beispiel die Simulation sowohl mit realer als auch idealer, d.h. „geometrischer“, Schwächung innerhalb des Kollimatormaterials durchgeführt. Wie sich erkennen lässt, beträgt der Unterschied im Durchsatz bis zu 10 % und die effektive Blendenöffnung eines Streukanals vergrößert sich entsprechend, siehe Teilabbildung b).

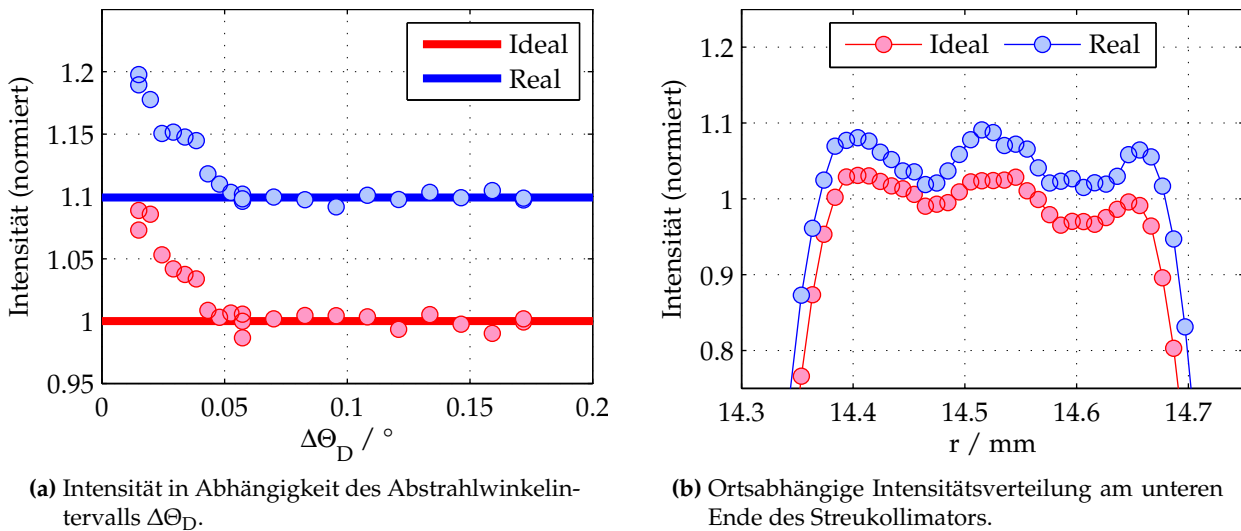


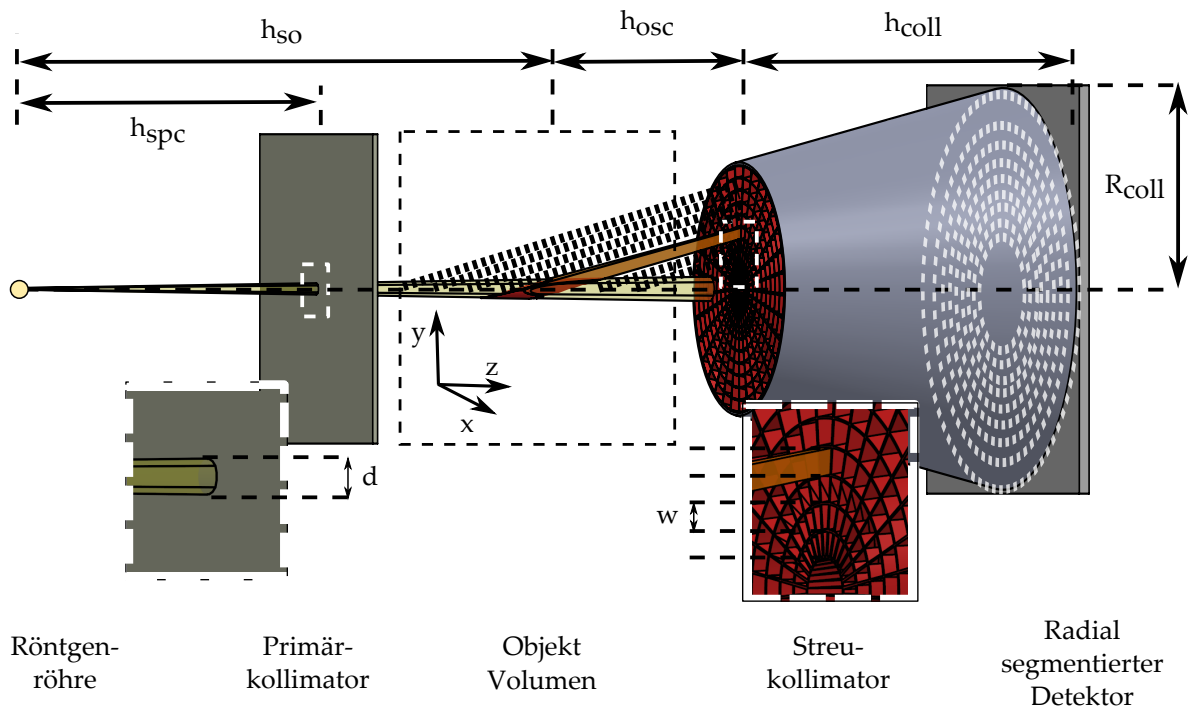
Abbildung 25: Vergleich zwischen realer und idealer Strahlungsschwächung innerhalb der Beugungsblenden. Der Unterschied in der Intensität a) beträgt bis zu 10%. Der ortsabhängige Quantenfluss am unteren Ende der Beugungsblende b) weist zusätzlich eine Verbreiterung auf.

Nadelstrahl vs. Fächerstrahl

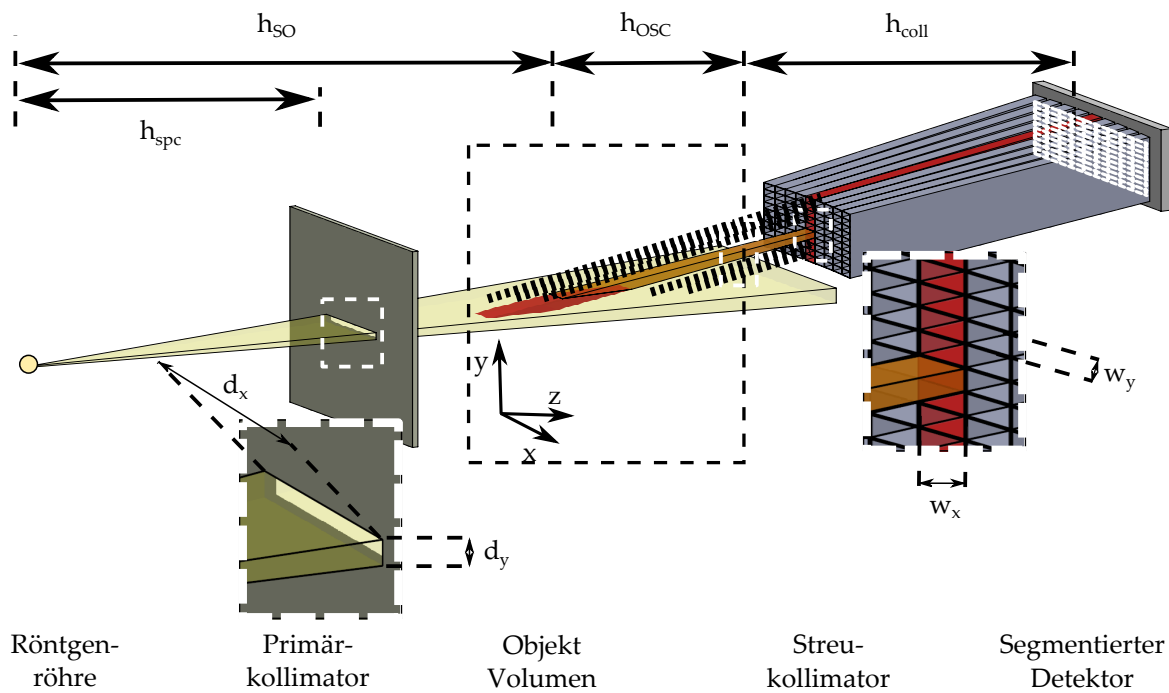
In diesem Abschnitt wird ein Vergleich zwischen direkten XDI-Systemen in Nadelstrahl- bzw. Fächerstrahlanordnung im Hinblick auf die o.g. Spezifikationen angestellt, um die Anlagengeometrie für das Laborsystem zu optimieren. Die für die Untersuchung benötigte geometrische Modellierung der Anlagenkomponenten ist sowohl für die Nadel- a) als auch für die Fächerstrahlanordnung b) in Abbildung 26 gezeigt. Als mittlere transversale, d.h. senkrecht zum Zentralstrahl, Ortsauflösung soll 1 mm bei einer Objektgröße von 300 mm erreicht werden. Bei der Modellierung wurden die Kollimatorwandung auf 0,2 mm, der Wandungsabstand auf 0,6 mm und die Kollimatorhöhe auf 175 mm festgelegt. Als Kollimatormaterial wurde Wolfram gewählt.

Um sowohl die Orts- als auch die spektrale Auflösung beider Systeme aneinander anpassen zu können, wurde der Parameter w_x des Fächerstrahlsystems simulativ variiert. Durch dessen Optimierung ist eine Übereinstimmung im Rahmen von 2% sowohl für die spektrale Auflösung als auch für die transversale Ortsauflösung beider Systeme erzielbar. Die resultierenden Ortsauflösungen sind in Abhängigkeit der longitudinalen Voxellzahl („z-Position“) in Abbildung 27 dargestellt. Es ist anzumerken, dass durch dieses Vorgehen unterschiedliche longitudinale Auflösungen erzielt werden. Aufgrund der Divergenz des Fächerstrahls in x-Richtung besitzt diese Anordnung verglichen mit der Nadelstrahltopologie eine intrinsisch geringere Auflösung in z-Richtung.

Um den Quantendurchsatz beider Systeme vergleichen zu können, muss die Packungsdichte der Kollimatoren entlang der x-Achse berücksichtigt werden. Vergleicht man die geometrische Ausdehnung beider Kollimatoren miteinander, lässt sich berechnen, dass in dem speziellen Fall etwa 140 Fächerstrahl-Streukollimatoreinheiten entlang der x-Achse innerhalb des Volumens einer Nadelstrahl-Streukollimatoreinheit platziert werden können. Entsprechend weist das Fächerstrahlsystem einen ca. 140-fach höheren Parallelisierungsgrad auf. Diesem Vorteil muss allerdings der Nachteil des geringeren Detektionsraumwinkels gegenübergestellt werden. Betrachtet man den erzielbaren Quantendurchsatz beider Systeme in Abhängigkeit der z-Position (vgl. Abbil-



(a) Nadelstrahlgeometrie.



(b) Fächerstrahlgeometrie.

Abbildung 26: CAD basierte Darstellung der Simulationsgeometrie für die Nadel- a) und Fächerstrahlanordnung b). Die Replikationseinheiten sind in rot hervorgehoben.

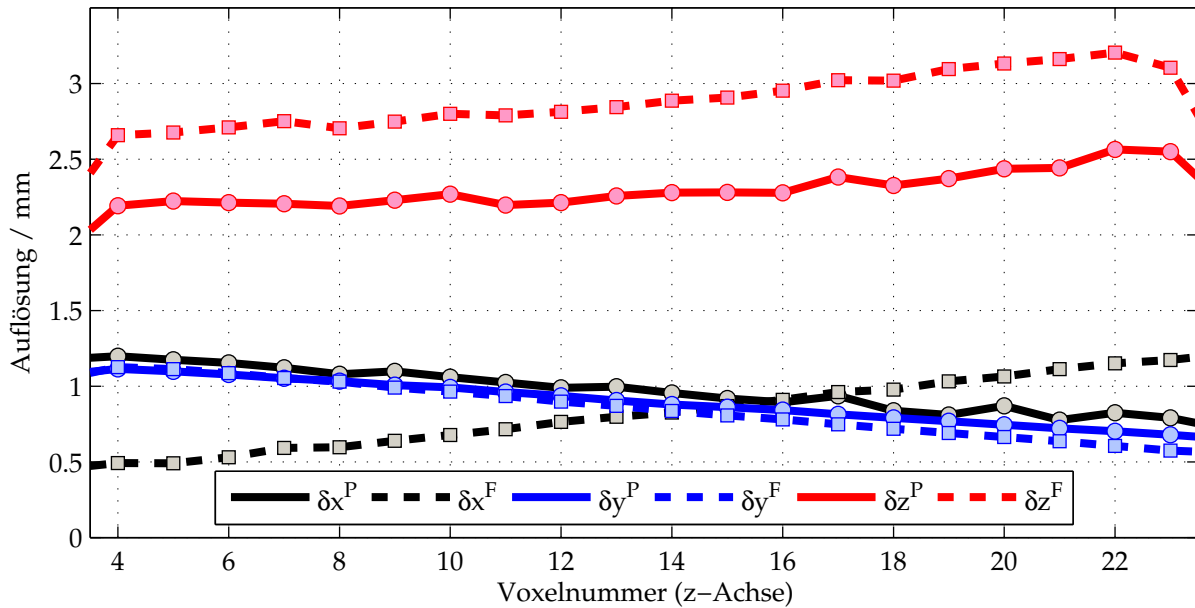


Abbildung 27: Vergleich der räumlichen Auflösung beider Systeme entlang der z-Achse. Die relative Winkelauflösung ist durch $\delta\Theta/\Theta = 6\%$ mit einer Genauigkeit von 2% restringiert. Die hochgestellten Indizes dienen zur Unterscheidung der Daten des Fächerstrahls (F) und des Nadelstrahls (P).

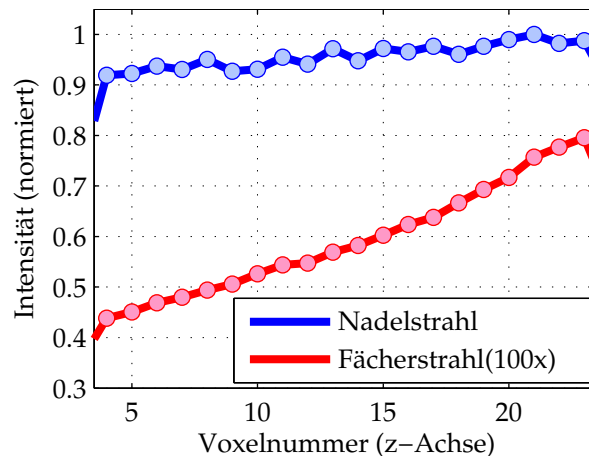


Abbildung 28: Vergleich der Zählrate pro Voxel in Abhängigkeit der longitudinalen Voxelposition. Die integrale Intensität in Nadelstrahlanordnung unterscheidet sich um einen Faktor 159 von dem Durchsatz des Fächerstrahlensystems.

dung 28), stellt man fest, dass die absolute integrale Zählrate im Fall des Nadelstrahlensystems - verglichen mit dem Fächerstrahlensystem - ca. 159-fach höher ausfällt. Unter Vernachlässigung der Positionierzeit, können bei den zugrundeliegenden Systemanforderungen folglich keine Messzeitvorteile durch die Fächerstrahlparallelisierung erzielt werden. Weitere Details zu dieser Studie sind in [133] zu finden.

Optimierung des Multi-Lamellen Kollimators

Die Prozedur zur Optimierung eines Streukollimators soll am Beispiel des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Multi-Lamellen Streukollimators gezeigt werden. Der zu optimierende Kollimator entspricht dem in Abbildung 26 b) gezeigten Modell, jedoch sind die radial verlaufenden Verstreuer in Anlehnung an die experimentelle Umsetzung durch einzelne Abstandhalter ersetzt worden. Die Optimierung wird für eine mittlere zu erreichende Ortsauflösung von 1,5 mm durchgeführt; die Wandstärke des Kollimators beträgt herstellungsbedingt 0,25 mm.

Bei gegebenem Streuwinkel und festgelegter Impulsübertragungsauflösung wird zunächst das benötigte Aspektverhältnis des Kollimators ermittelt. Dazu wird eine Simulation bei einer ausreichenden Mindesthöhe des Kollimators in Abhängigkeit der Kollimatoröffnung w durchgeführt. Ergebnisse dieser Simulation für unterschiedliche Streuwinkel sind in Form des Durchsatzes a) und der Winkelauflösung b) in Abbildung 29 dargestellt. Mit Hilfe von Teilabbildung b) kann das benötigte Aspektverhältnis des Kollimators ermittelt werden (für HPGe Detektoren kann in guter Näherung $\delta q/q \approx \delta\Theta/\Theta$ angewendet werden).

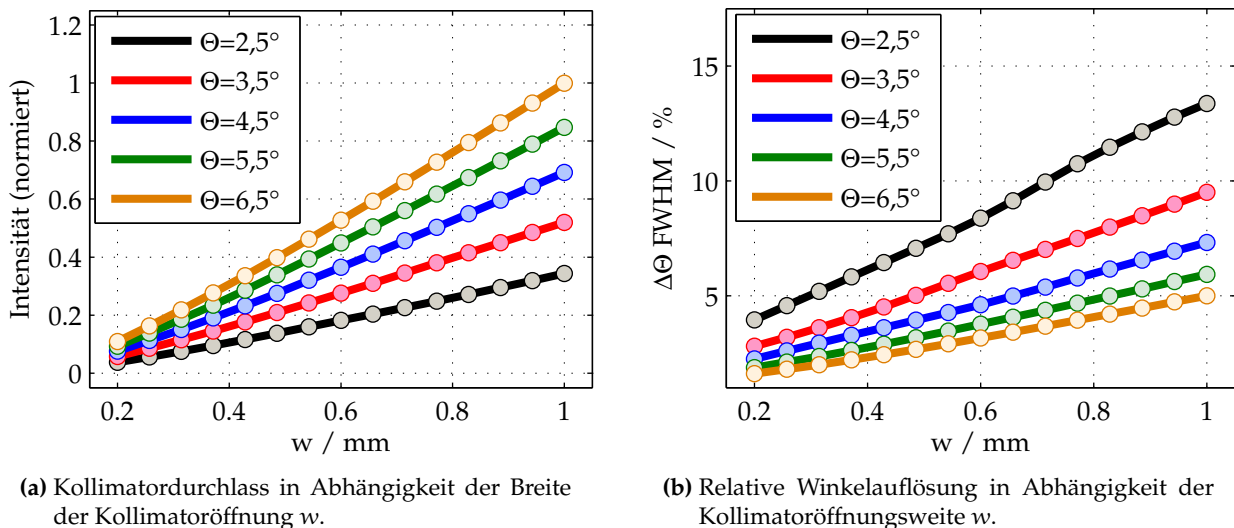
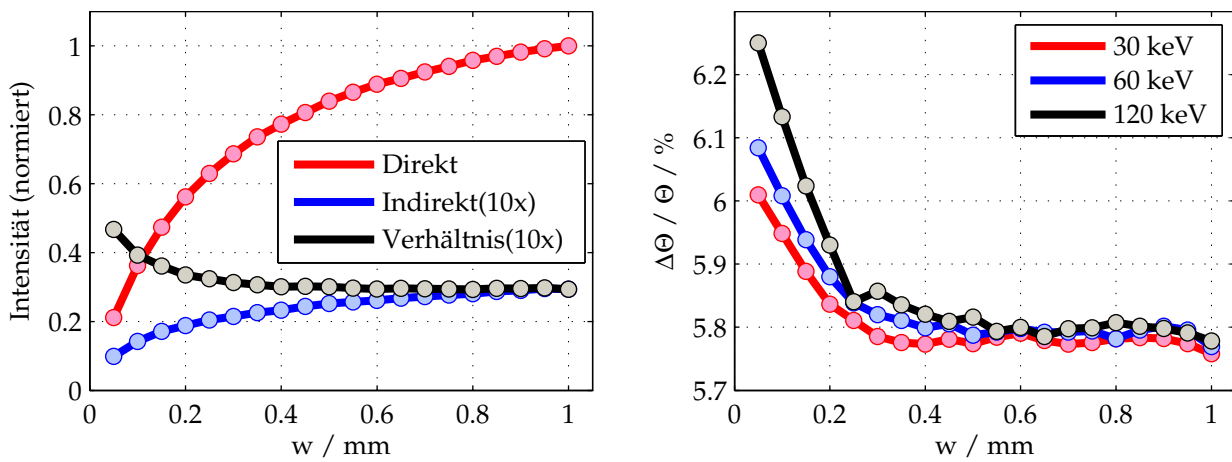


Abbildung 29: Vergleich der Intensität a) und relativen Winkelauflösung b) des Systems in Abhängigkeit der Kollimatoröffnungsweite w für verschiedene Streuwinkel bei einer festen Kollimatorhöhe von 175 mm.

Anschließend wird eine Simulation bei konstantem Aspektverhältnis mit unterschiedlichen Höhen bzw. Öffnungsweiten des Kollimators ausgeführt. Erwartungsgemäß nimmt der Quantendurchlass des Kollimators mit Vergrößerung der Kollimatoröffnung zu, da das Verhältnis von Wandstärke / Öffnungsweite abnimmt. In Abbildung 30 a) ist dieser Zählratengewinn deutlich zu erkennen. Zudem nimmt bei kleinen Bauhöhen des Kollimators die Anzahl der auf nicht direktem Wege den Detektor erreichenden Quanten aufgrund verstärkter Wechselwirkung mit dem Kollimatormaterial zu. Zusätzlich nimmt die Winkelauflösung bei kleinen Öffnungen des Kollimators aufgrund der endlichen Ausdehnung des Nadelstrahls ab, vgl. Teilabbildung b). Dem Gewinn an Quantendurchsatz bei Verwendung eines längeren Kollimators ist der Fertigungsmehraufwand des Kollimators entgegenzusetzen.

Aspektverhältnis



(a) Kollimatordurchlass in Abhängigkeit der Breite der Kollimatoröffnung w .

(b) Relative Winkelauflösung in Abhängigkeit der Kollimatoröffnungsweite w .

Abbildung 30: Vergleich der Intensität a) und der relativen Winkelauflösung des Systems b) in Abhängigkeit der Kollimatoröffnungsweite w bei konstantem Aspektverhältnis des Kollimators von 0,6/175.

Bei einer Kollimatorhöhe von 175 mm und einer Öffnungsweite von $w = 0,6$ mm wird im Weiteren noch die Verwendbarkeit anderer Kollimatormaterialien überprüft. Abbildung 31 zeigt die Streuwinkelverteilung für diverse Materialien. Aufgrund des geringen Streuwinkels von $3,5^\circ$ ist selbst Eisen zur Verwendung als Kollimatormaterial geeignet; die Streuwinkelverteilung ist mit der von Blei vergleichbar. Betrachtet man allerdings den Anteil der indirekt gestreuten Quanten, vgl. Teilabbildung b), so ist eine geringe Zunahme bei Energien oberhalb von 100 keV zu beobachten. Nichtsdestotrotz zeigt diese Untersuchung, dass die Verwendung von Kollimatoren aus Stahl prinzipiell denkbar ist. Die Ergebnisse der Untersuchung zur Wahl des Materials der Abstandhalter ist in Abbildung 32 gezeigt. Die Abstandhalter aus Kapton erlauben einen, im Vergleich zu stark schwächenden Materialien, wie Blei, erhöhten Quantendurchlass, bei gleichbleibender Winkelauflösung und gleichbleibendem Anteil α_{BG} .

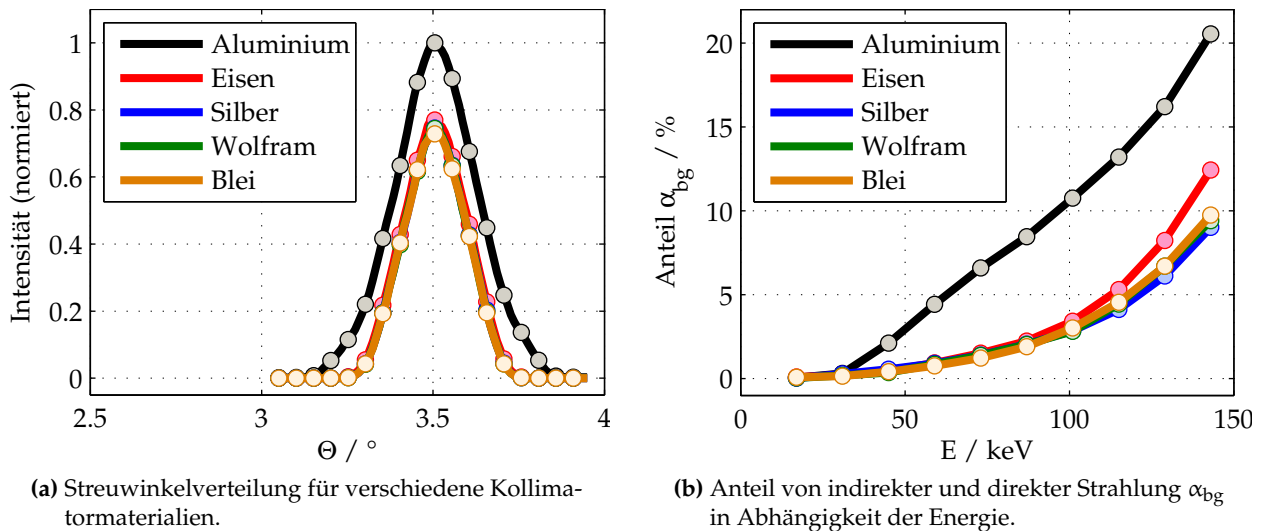


Abbildung 31: Vergleich des Quantendurchsatzes, sowie des Akzeptanzwinkelbereichs a) und des Anteils $\alpha_{bg}(E_k)$ in b) für verschiedene Kollimatormaterialien.

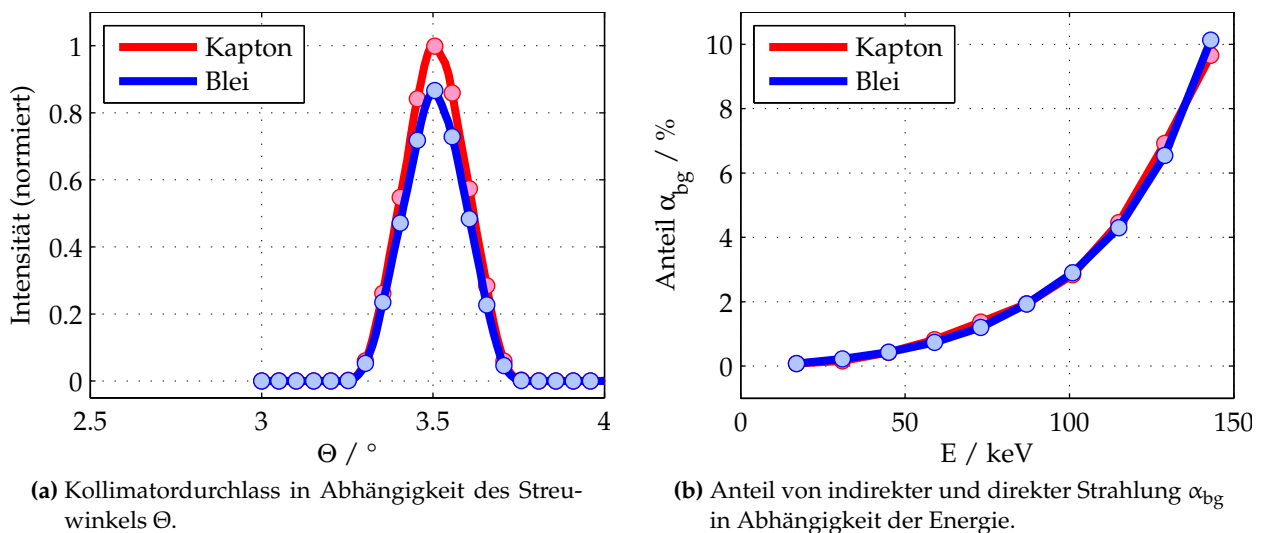


Abbildung 32: Vergleich des Quantendurchsatzes, sowie des Akzeptanzwinkelbereichs a) und des Anteils $\alpha_{bg}(E_k)$ in b) für verschiedene Abstandhaltermaterialien.

REKONSTRUKTION

In diesem Kapitel wird die Rekonstruktion von orts aufgelösten Streubildern in der kohärenten Streutomographie unter Verwendung von a-priori Wissen zur materialelektiven CT-Bildgebung thematisiert. Einleitend wird der Ansatz zur Kombination eines konventionellen Kegelstrahl-CT Systems mit einem kohärentem Streu-CT vorgestellt und auf die Modellierung der Datenakquisition beider Systeme eingegangen. Es werden Grundlagen der „Compressed-Sensing“ und „Dictionary-Learning“ Theorie aufgeführt, sowie aktueller wissenschaftlicher Forschung entsprechende Konzepte zur „Sparse-Reconstruction“ beschrieben und der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Rekonstruktionsalgorithmus präsentiert. Anschließend wird die Performance des Verfahrens anhand von simulierten Daten demonstriert. Es werden Untersuchungen zur Rekonstruktionsgüte in Abhängigkeit unterschiedlicher Scanparameter mit Hilfe virtueller Phantome durchgeführt und Vorteile gegenüber einer konventionellen Rekonstruktion aufgezeigt.

4.1. Einleitung

Wie in Kapitel 5 beschrieben, wird im Rahmen dieser Arbeit ein konventionelles Kegelstrahl-CT System mit einem CSCT in Nadelstrahlgeometrie kombiniert. Dabei wird, im Gegensatz zu existierenden CSCT-Systemen, die Akquisition der Schwächungs- und Streudatensätze sequenziell ausgeführt.

Verglichen mit dem CSCT-System erlaubt das Kegelstrahl-CT die schnelle Akquisition und Rekonstruktion von (räumlich) hoch aufgelösten Bildern des mittleren Schwächungskoeffizienten $I_{CBCT}(x, y, z) := \hat{\mu}(x, y, z)$. Dabei ist der mittlere Schwächungskoeffizient $\hat{\mu}$ gemäß Unterabschnitt 4.1.1 definiert. Mithilfe digitaler Bildverarbeitung lassen sich beispielsweise geometrische Größen (Abstände, Volumina, ...) aus dem Datensatz bestimmen, Segmentierungen vornehmen oder dreidimensionalen Visualisierungen (virtuelle Endoskopie) erzeugen. Das Volumenrendering ist exemplarisch in Abbildung 33 (links oben) gezeigt; es lassen sich beliebige Schichtbilder aus dem Datensatz extrahieren (links unten). Da $\hat{\mu}(x, y, z)$ insbesondere von der Dichte des Materials am Ort (x, y, z) abhängig ist, beinhaltet $I_{CBCT}(x, y, z)$ jedoch hauptsächlich morphologische Informationen über das zu untersuchende Objekt. Materialspezifische Informationen, alleine aufgrund der Grauwerte, sind im Allgemeinen nicht zugänglich.

Im Gegensatz zur Transmissionscomputertomographie, liefern energiedispersive Verfahren der Streubildgebung materialspezifische Informationen über die Struktur des zu untersuchenden Objekts auf atomarer Ebene. Die resultierenden Streubilder $I_{CSCT}(y, z, E) := n_a(d\sigma/d\Omega)$ können

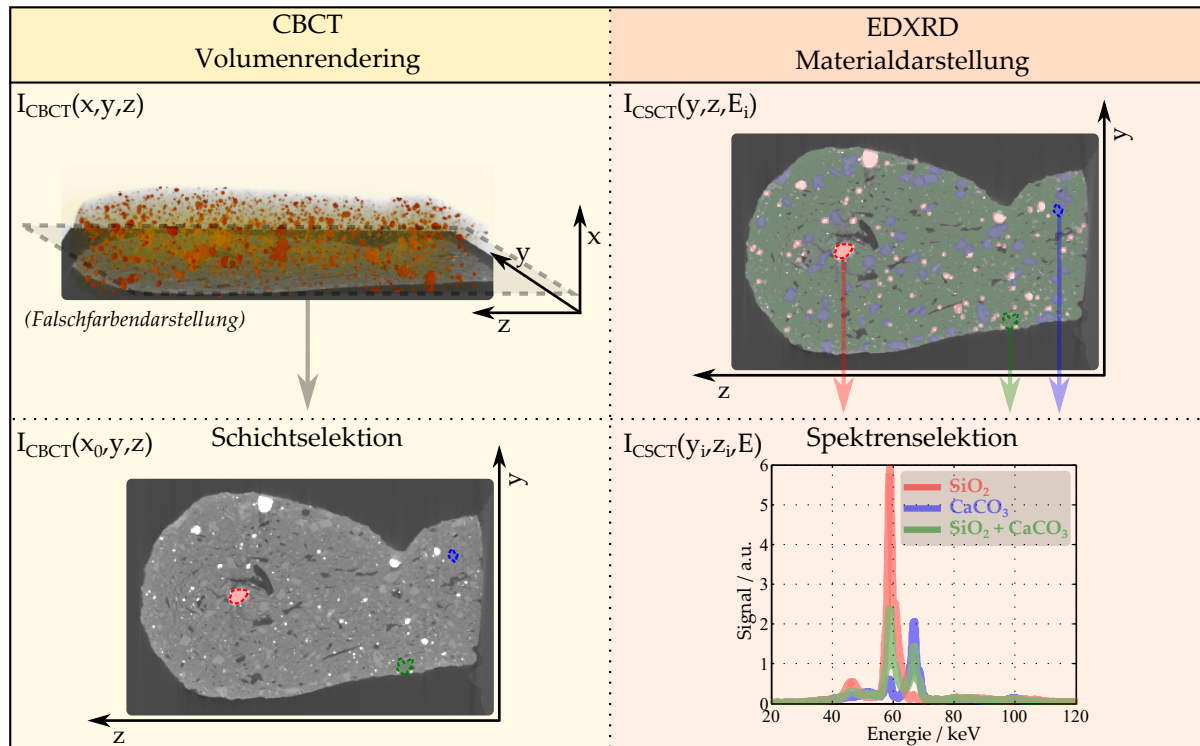


Abbildung 33: Vergleich der Bildinformation eines konventionellen Kegelstrahl-CTs mit der eines CSCT-Systems anhand einer Aufnahme von einer antiken Keramik[134]. Während die grobkörnigen Strukturen im CBCT-Bild (links) direkt den Hauptbestandteilen SiO_2 (rot) und CaCO_3 (blau) der Probe zugeordnet werden können, lässt sich die Materialzusammensetzung bei feinerer Körnung (grün) nicht bestimmen. Eine EDXRD-Messung (rechts) hingegen, erlaubt neben der Materialzuordnung ebenfalls eine orts aufgelöste Phasenanalyse. Das EDXRD-Bild ist als Überlagerung mit dem CBCT-Bild dargestellt.

entsprechend für Feinstrukturuntersuchungen herangezogen werden. Ein derartiges Streubild ist exemplarisch und schematisch als Überlagerung mit der CBCT-Rekonstruktion in Abbildung 33 (rechts oben) gezeigt und verdeutlicht den Informationsgewinn gegenüber einem reinen CBCT-Bild; jedem Pixel ist ein Streuspektrum (rechts unten) zugeordnet. Im Vergleich zum CBCT stellt die Datenakquisition (Scannen) beim CSCT jedoch trotz der geringeren Ortsauflösung einen langwierigen Prozess dar. Unter Verwendung der morphologischen a-priori Informationen aus dem CBCT-Bild $I_{\text{CBCT}}(x, y, z)$, kann die Rekonstruktion eines Streubildes $I_{\text{CSCT}}(y, z, E)$ allerdings aus einem signifikant reduzierten Datensatz erfolgen. So lassen sich beispielsweise aufgrund der Geometrie des Objekts triviale Randbedingungen (z.B. Außenform) für die Rekonstruktion formulieren. Der Zugang zu komplexeren morphologischen Informationen (z.B. Segmentierungen) kann ebenfalls auf diese Weise formuliert werden, ist jedoch auf Methoden der digitalen Bildverarbeitung begrenzt, welche automatisiert mit hoher Zuverlässigkeit arbeiten. Weitere Kenntnisse lassen sich aber aus I_{CBCT} unter Darstellung in einer anderen Basis bzw. nach einer Transformation gewinnen. Zur Formulierung eines Rekonstruktionsalgorithmus, der diese Informationen zur Rekonstruktion von I_{CSCT} nutzen kann, wird im Weiteren zunächst die mathematische Modellierung und Diskretisierung des verwendeten CBCT- bzw. CSCT-Systems durchgeführt und anschließend auf die wesentlichen Elemente der „Compressed Sensing“ Theorie eingegangen.

4.1.1. Kegelstrahl CT (CBCT)

Zur Modellierung des in dieser Arbeit verwendeten Kegelstrahl-CT Systems mit zirkularer Trajektorie (vgl. Unterabschnitt 2.3.3), wird im Folgenden angenommen, dass das aus Röntgenröhre und Detektor bestehende Röntgensystem um das Untersuchungsobjekt gemäß Abbildung 34a) rotiert. Wie der Abbildung zu entnehmen ist, wird die Röntgenröhre als eine Punktquelle am Ort \vec{r}_S beschrieben. In dem mitrotierenden gestrichenen Koordinatensystem des Flächendetektors (FPD) sei jedes individuelle Detektorpixel durch $\vec{r}_D = (x', y')$ indiziert. Entsprechend kann die Menge aller Projektionspfade von $\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_D$ über

$$\mathcal{P}(\gamma, x', y') = \{\vec{r} : \vec{r} = \vec{r}_S(\gamma) + \lambda \cdot (\vec{r}_D(\gamma, x', y') - \vec{r}_S(\gamma)), \lambda \in [0, 1]\} \quad (4.1)$$

definiert werden. Unter Annahme eines Röhrenspektrums $i_0(E)$ kann die Intensität an einem Detektorpixel (x', y') bei einem Rotationswinkel γ gemäß Lambert-Beer durch

$$I(\gamma, x', y') = \int i_0(E) \cdot \exp\left(-\int_{l \in \mathcal{P}} \mu(x, y, z, E) dl\right) dE \quad (4.2)$$

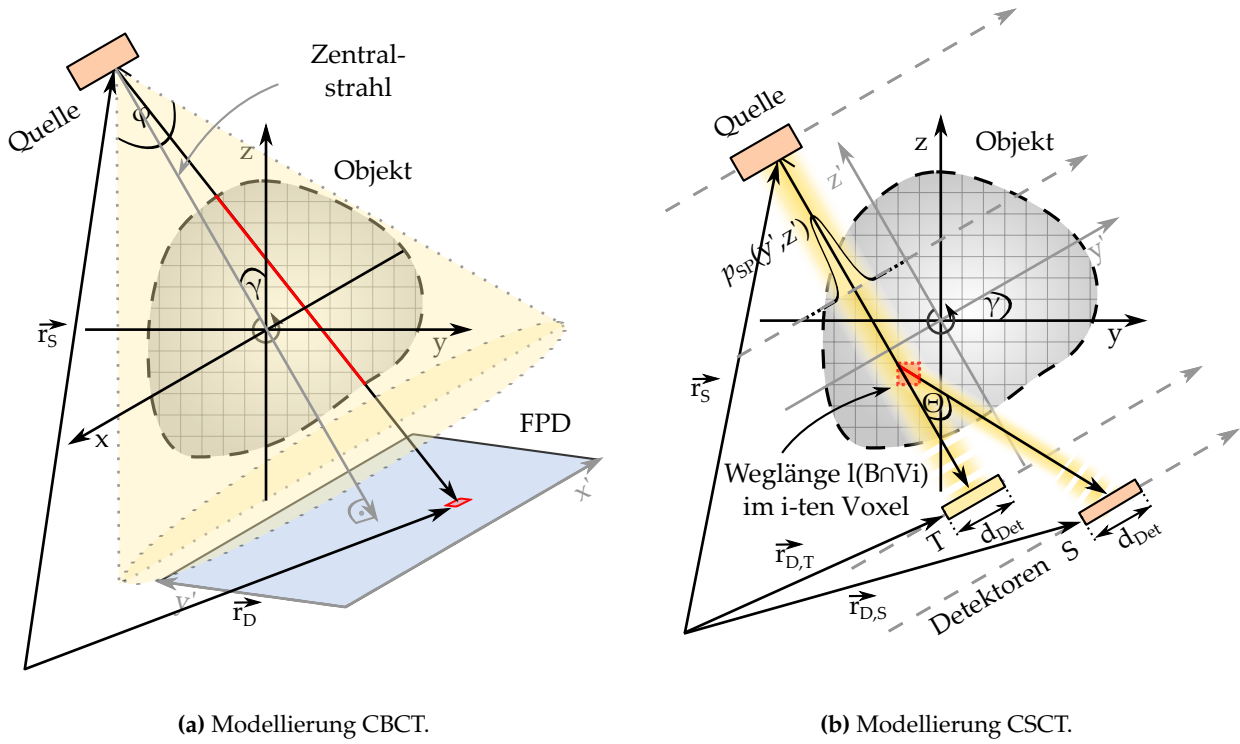
ausgedrückt werden. Bei hinreichend schmalbandiger Vorfilterung des Röhrenspektrums wird die Annahme gemacht, dass $\mu(x, y, z, E) \approx \text{const.}$ in Abhängigkeit von E ist, sodass μ durch eine mittlere Schwächung $\hat{\mu}(x, y, z)$ ersetzt werden kann. Entsprechend liefert die Integration über E ohne den Schwächungsterm die einlaufende Intensität I_0 . Die Projektionsdaten $p(\gamma, x', y')$ sind dann über

$$p(\gamma, x', y') := \log\left(\frac{I_0}{I(\gamma, x', y')}\right) = \int_{l \in \mathcal{P}} \hat{\mu}(x, y, z) dl \quad (4.3)$$

definiert. Das zugehörige CT-Bild $I_{\text{CBCT}}(x, y, z)$ kann aus dem so gewonnenen Projektionsdatensatz mit dem FDK-Algorithmus über Gleichung 2.40 approximiert werden. Auf die praktische Bestimmung von $p(\gamma, x', y')$ wird in Abschnitt 5.2 eingegangen; die Auswirkung von Artefakten wird in Unterabschnitt 4.4.4 thematisiert.

4.1.2. Kohärentes Streu-CT (CSCT)

Das zu modellierende CSCT-System ist schematisch in Abbildung 34b dargestellt. Zwecks Kompatibilität zu algebraischen Rekonstruktionsverfahren wird ein diskretisiertes Modell aufgestellt. Es wird, wie im vorangegangenen Abschnitt, von einer Röntgenquelle am Ort \vec{r}_S und einem „1-Pixel“ Detektor am Ort \vec{r}_D ausgegangen. Das Strahlprofil des einlaufenden Röntgenstrahls werde durch $p_{\text{SP}, j}$ mit $j \in \{1, \dots, N_{\text{SP}}\}$ beschrieben (vgl. Definition in Abschnitt 2.3.2). Jeder einzelne Teilstrahl habe innerhalb des Objektvolumens eine Querschnittsfläche δA_{SP} . Die Menge der Transmissionsstrahlpfade von $\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_{D, T}$ sei durch $\mathcal{B}(\gamma, y') = \{\vec{r} : \vec{r} = \vec{r}_S + \lambda \cdot (\vec{r}_{D, T} - \vec{r}_S), \lambda \in [0, 1]\}$ und die Menge der Vektoren innerhalb eines (zweidimensionalen) Rekonstruktionsvoxels durch $\mathcal{V}_i = \{\vec{r} : \vec{r} \text{ innerhalb Voxel } i\}$ gegeben. Die Menge der Indizes der Voxel, welche vom Primärstrahl geschnitten werden, ergibt sich dann zu $\mathcal{S}(\gamma, y') = \{i : \mathcal{B} \cap \mathcal{V}_i \neq \emptyset\}$. Die Zählrate der gestreuten



(a) Modellierung CBCT.

(b) Modellierung CSCT.

Abbildung 34: Modellierung des dreidimensionalen CBCT- a) und des zweidimensionalen CSCT-Systems b).

Strahlung, welche vom Streudetektor (S) registriert wird, kann durch

$$\dot{N}_S(\gamma, \gamma', E) = \sum_{j=1}^{N_{SP}} p_{SP,j} \sum_{i \in S} \dot{N}_0(E) \delta A_{SP} \cdot \mu_S(\vec{r}_i, E) \cdot l(B \cap V_i) \cdot A(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{D,S}, E) \quad (4.4)$$

mit $\mu_S(\vec{r}_i, E) = n_a(\vec{r}_i) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{tot}} \cdot \delta\Omega(\vec{r}_i, E)$ berechnet werden, wobei $l(B \cap V_i)$ die Pfadlänge des Strahls im i-ten Voxel und $A(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{D,S}, E)$ die Strahlschwächung entlang des gegebenen Pfades von $\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{D,S}$ beschreibt. Analog dazu lässt sich die Zählrate des Transmissionsdetektors (T) durch

$$\dot{N}_T(\gamma, \gamma', E) = \sum_{j=1}^{N_{SP}} p_{SP,j} \cdot \dot{N}_0(E) \delta A_{SP} \cdot A(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{D,T}, E) \quad (4.5)$$

ausdrücken. Eine explizite Summation über die einzelnen Voxel, wie in Gleichung 4.4, ist nicht notwendig, da die Pfadlängen durch die Strahlschwächung $A(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{D,T}, E)$ berücksichtigt werden. Unter der gängigen Annahme[71], dass $A(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{D,S}, E) \approx A(\vec{r}_S \rightarrow \vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_{D,T}, E)$ gilt, lässt sich sowohl der Einfluss der Schwächung als auch der des Röntgenröhren-Spektrums

auf die Streudaten korrigieren. Es resultiert ein sog. normierter Streudatensatz (Sinogramm)

$$\dot{N}_N(\gamma, y', E) = \frac{\dot{N}_S(\gamma, y', E)}{\dot{N}_T(\gamma, y', E)} \approx \sum_{j=1}^{N_{SP}} p_{SP,j} \cdot \sum_{i \in S} \mu_S(\vec{r}_i, E) \cdot l(\mathcal{B} \cap \mathcal{V}_i). \quad (4.6)$$

Um Gleichung 4.6 als Gleichungssystem in Matrix-Vektorschreibweise darzustellen, wird das normierte Streudatensinogramm $\dot{N}_N(\gamma, y', E)$ in den Projektionsvektor $\vec{b} \in \mathbb{R}^{n_m \times n_e}$ überführt. Dabei beschreibt $n_m = n_{\delta\gamma} \cdot n_{\delta y}$ die Gesamtzahl der Messungen, welche sich aus der Zahl der Rotations- $n_{\delta\gamma}$ und Translationsschritte $n_{\delta y}$ zusammensetzt; n_e gibt die Anzahl der Energiekanäle an. Ebenfalls werden die gesuchten Streukoeffizienten $n_a(\vec{r}_i) \cdot (d\sigma/d\Omega)_{tot}$ als Vektor $\vec{x} \in \mathbb{R}^{n_r \times n_e}$ dargestellt. Die Anzahl der Voxel n_r im rekonstruierten Bild entspricht dabei dem Quadrat n_y^2 der Anzahl der Voxel entlang der y-Achse. Damit kann die diskrete Modellierung der Datenakquisition des gegebenen CSCT-Systems als lineares Gleichungssystem

$$R \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad (4.7)$$

mit

$$(R)_{ij} = \sum_{k=1}^{N_{SP}} p_{SP,k} \cdot \delta\Omega(\vec{r}_i, E) \cdot l(\mathcal{B}_i \cap \mathcal{V}_j) \quad (4.8)$$

beschrieben werden. Die Matrix $R(E) \in \mathbb{R}^{n_m \times n_r}$ wird System- oder Radonmatrix genannt und weist aufgrund von $\delta\Omega(\vec{r}_i, E)$ eine Energieabhängigkeit auf. Im Folgenden wird die Systemmatrix der Übersichtlichkeit halber lediglich mit R bezeichnet.

4.2. Mathematische Grundlagen der Rekonstruktion

Gemäß der klassischen Theorie linearer Gleichungssysteme (LGS) muss zur Konsistenz des LGS 4.7 der Rang der Systemmatrix dem Rang der erweiterten Koeffizientenmatrix $\text{rg}(R) = \text{rg}([R, \vec{b}]) = r$ entsprechen. Ist dieser Wert r gleich der Anzahl der Unbekannten n_r , so besitzt das Gleichungssystem eine eindeutige Lösung. Im Folgenden sei stets ein konsistentes System - d.h. ein System mit einer existierenden Lösung - vorausgesetzt¹. Dann müssen zur eindeutigen Rekonstruktion eines Streubildes $I_{CSCT} \in \mathbb{R}^{n_y \times n_y \times n_e}$ mindestens $n_m = n_y^2$ Streuprojektionen, d.h. ein vollständiges Sinogramm, aufgenommen werden. Für den weiteren Verlauf werde jedoch der Fall betrachtet, dass weniger Messungen als Unbekannte existieren ($n_m < n_r$). In diesem Fall ist das LGS unterbestimmt und $n_r - r$ Unbekannte lassen sich frei wählen. Um eine eindeutige Lösung zu erhalten, können jedoch zusätzliche Bedingungen an den Lösungsvektor formuliert werden. Das LGS wird dazu, wie auch in Unterabschnitt 2.2.2 beschrieben, in ein Minimierungsproblem

$$\min_{\vec{x}} J(\vec{x}) \quad \text{s.d.} \quad R \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad (4.9)$$

mit Zielfunktion J überführt. Ist J streng konvex, so ist die Lösung \vec{x} eindeutig. Als Beispiel sei $J(\vec{x}) = \|\vec{x}\|_2^2$, d.h. die euklidische Norm, genannt. Die Lösung kann mithilfe der Pseudoinversen $\vec{x} = R^T \cdot (RR^T)^{-1} \cdot \vec{b}$ analytisch formuliert werden.

¹Durch die Wahl der Messpunkte in γ - und y -Richtung kann die Radonmatrix R entsprechend konstruiert werden.

4.2.1. Compressed-Sensing

Die Compressed-Sensing Theorie beruht auf einer speziellen Wahl der Zielfunktion J zur Lösung unterbestimmter linearer Gleichungssysteme. Mithilfe der sog. „0-Norm“, d.h. $J(\vec{x}) = \|\vec{x}\|_0$, welche die Anzahl der Vektorkomponenten $(\vec{x})_i$ angibt, für die $(\vec{x})_i \neq 0$ gilt, ist es unter gewissen Voraussetzungen sogar im Fall $n_m \ll n_r$ möglich, Gleichung 4.9 eindeutig zu lösen.

$$\min_{\vec{x}} \|\vec{x}\|_0 \quad \text{s.d.} \quad \mathbf{R} \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad (4.10)$$

Der Definition der Zielfunktion folgend, wird dabei die Dünnbesetztheit (Sparsity) des Lösungsvektors forciert. Ein Vektor \vec{x} werde k -fach dünn-besetzt, oder alternativ auch k -sparse genannt, wenn $\|\vec{x}\|_0 \leq k$ gilt, d.h. \vec{x} maximal k von Null verschiedene Komponenten besitzt. Entsprechend wird mit

$$\Sigma_k = \{\vec{x} : \|\vec{x}\|_0 \leq k\} \quad (4.11)$$

die Menge aller k -fach dünn-besetzten Vektoren bezeichnet. Zur Charakterisierung realer Signale, d.h. im vorliegenden Falle der CT-Bilder, ist die restriktive Forderung $\vec{x} \in \Sigma_k$ allerdings unbrauchbar. Stattdessen wird die sogenannte Komprimierbarkeit σ_k durch

$$\sigma_k(\vec{x}) = \min_{\vec{x}_k \in \Sigma_k} \|\vec{x} - \vec{x}_k\|_1, \quad (4.12)$$

d.h. den kleinsten Abstand eines Signals \vec{x} von einem k -fach dünn-besetzten Vektor \vec{x}_k quantifiziert.

Zur eindeutigen Lösung des unterbestimmten Gleichungssystems $\mathbf{R}\vec{x} = \vec{b}$ sind neben der Sparsity-Anforderung an den Lösungsvektor ebenfalls Bedingungen an die Matrix \mathbf{R} gestellt. Um insbesondere Aussagen über die Stabilität, also das Verhalten der Lösung unter Störungen der rechten Seite \vec{b} , machen zu können, wird die die sog. restringierte Isometrie Bedingung („restricted isometry property“, RIP) definiert[135, Seite 5]: Die Matrix \mathbf{R} erfüllt die RIP der Ordnung k , wenn ein $\delta_k \in (0, 1)$ existiert, s.d.

$$(1 - \delta_k) \|\vec{x}\|_2^2 \leq \|\mathbf{R} \cdot \vec{x}\|_2^2 \leq (1 + \delta_k) \|\vec{x}\|_2^2 \quad (4.13)$$

für alle $\vec{x} \in \Sigma_k$ gilt. Gleichung 4.13 beschreibt, dass für eine Matrix \mathbf{R} mit einer kleinen Konstante δ_k , der Abstand δx von zwei beliebigen Vektoren $\vec{x}_0, \vec{x}_1 \in \Sigma_{k/2}$ in etwa dem Abstand δb der Messungen entspricht, d.h. $\delta x = \|\vec{x}_1 - \vec{x}_0\|_2 \approx \|\mathbf{R}(\vec{x}_1 - \vec{x}_0)\|_2 = \delta b$ gilt und es sich damit nicht um ein schlecht gestelltes Problem handelt. Konkret lässt sich bestimmen, ab welcher Dimension einer Messmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{n_m \times n_r}$, d.h. nach wie vielen Messungen, die Matrix die RIP der Ordnung $2k$ mit $\delta \in (0, 1/2]$ erfüllen kann. Es gilt[136, Seite 42]

$$n_m \geq \frac{1}{2 \ln(\sqrt{24} + 1)} k \cdot \ln\left(\frac{n_r}{k}\right) \quad (4.14)$$

für die Anzahl der benötigten Messungen. Diese steigt lediglich logarithmisch mit der Zahl n_r der zu rekonstruierenden Pixel. Ein Bild mit 100×100 Pixeln ließe sich beispielsweise bei $k = 1000$ mit lediglich 645 Messungen im Fall rauschfreier Daten rekonstruieren. Dazu ist jedoch das kombinatorische Problem gemäß Gleichung 4.10 zu lösen. Des Weiteren ist das Verhalten bezüglich der Auswirkung von Rauschen in den Eingangsdaten zu klären: Es sei angenommen, dass die Messdaten $\vec{b} = \mathbf{R}\vec{x} + \vec{e}$ durch additives Rauschen \vec{e} mit Betrag $\|\vec{e}\|_2 \leq \epsilon$ kontaminiert sind. Das

wesentlich effizienter lösbares konvexe Minimierungsproblem

$$\min_{\vec{x}} \|\vec{x}\|_1 \quad \text{s.d.} \quad \left\| \mathbf{R} \cdot \vec{x} - \vec{b} \right\|_2 \leq \epsilon \quad (4.15)$$

werde betrachtet. Es lässt sich zeigen, dass Gleichung 4.15 ebenfalls stabile Lösung erzeugen kann[137]. Sei dazu \vec{x}' Lösung von Gleichung 4.15. Wenn \mathbf{R} das RIP mit der Ordnung $2k$ mit $\delta_{2k} < \sqrt{2} - 1$ erfüllt, dann gilt („worst case“ Grenze)

$$\|\vec{x}' - \vec{x}_0\|_2 \leq 2 \frac{1 - (1 - \sqrt{2}) \delta_{2k}}{1 - (1 + \sqrt{2}) \delta_{2k}} \cdot \frac{\sigma_k(\vec{x}_0)_1}{\sqrt{k}} + 4 \frac{\sqrt{1 + \delta_{2k}}}{1 - (1 + \sqrt{2}) \delta_{2k}} \cdot \epsilon, \quad (4.16)$$

wobei \vec{x}_0 der exakten Lösung von Gleichung 4.15 im rauschfreien Fall (sog. „ground truth“ Lösung) entspricht. Dieses wichtige Ergebnis der RIP-basierten Compressed-Sensing Theorie gibt an, dass sich auch komprimierbare Signale mithilfe der ℓ_1 -Minimierung stabil rekonstruieren lassen. Die Abweichungen hängen linear von der Komprimierbarkeit σ_k und dem Rauschlevel ϵ ab. Auf Algorithmen zur Lösung von Gleichung 4.16 wird in Unterabschnitt 4.2.4 eingegangen.

Problematisch ist, dass das RIP-Kriterium einen stark restriktiven Charakter hat. So lässt sich zeigen, dass die angegebenen Schranken signifikant unterschritten werden können[138]. Betrachtet man beispielsweise Gaußsche-Zufallsmatrizen, ergibt sich im Limes $n_r \rightarrow \infty$

$$n_m > 2 \ln \left(\frac{n_r}{n_m} \right) \cdot k \quad (4.17)$$

für die Anzahl der benötigten Messungen. Trägt man diese Grenze im Vergleich zu der in Gleichung 4.14 beschriebenen RIP-Grenze auf, so zeigt sich (siehe Abbildung 36b) dass eine Diskrepanz bis zu einem Faktor 10 vorliegt. Numerische Experimente bestätigen dieses Verhalten[139]. Für Radon-Matrizen, d.h. Systemmatrizen wie sie bei einer tomographischen Rekonstruktion vorkommen, ist das RIP-Kriterium nur sehr schwach erfüllt[140]. Für den Fall $n_m = 100 \times 100$ ist

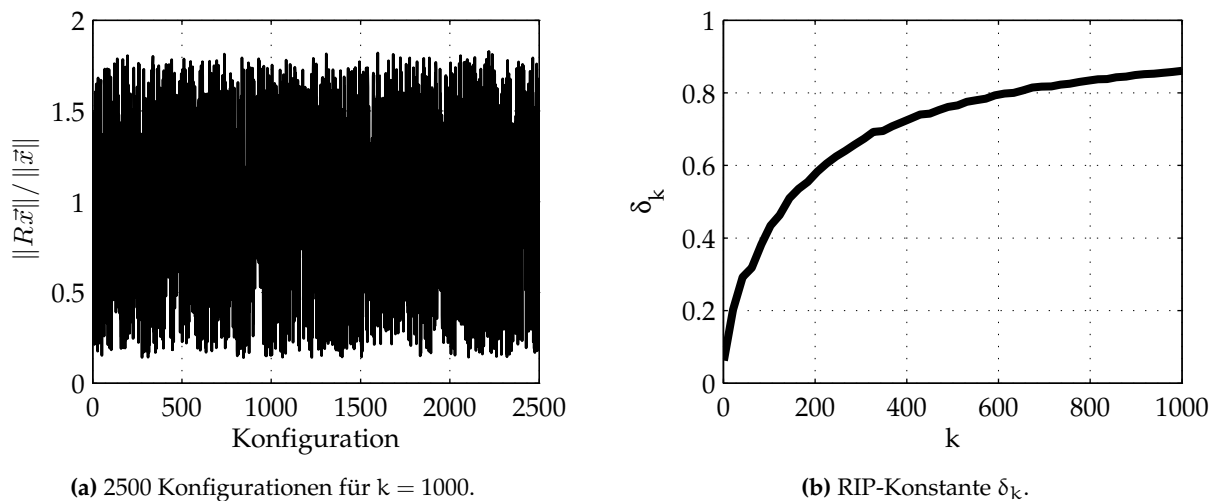


Abbildung 35: Abschätzung der RIP-Konstante einer Radonmatrix durch Erzeugung von Zufallskonfigurationen für $k = 1000$ a) und in Abhängigkeit von k b) im Fall $n_m = 100 \times 100$.

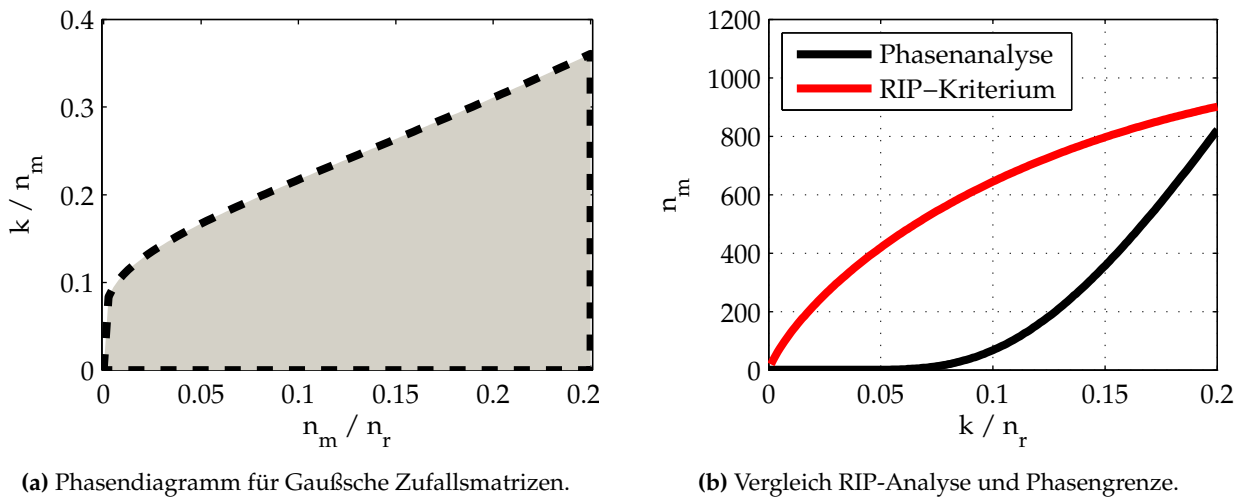


Abbildung 36: Phasen-Phänomen unter Verwendung Gaußscher Zufallssystemmatrizen. Das Phasendiagramm in a) zeigt, wann eine Rekonstruktion erfolgreich durchgeführt werden kann (grau unterlegter Bereich). Vergleicht man diese Grenze mit der RIP-Grenze aus Gleichung 4.14 für den Fall $n_r = 10000$, wird eine Diskrepanz deutlich b).

eine numerische Approximation von δ_k in Abbildung 35 gezeigt. Für einen vorgegebenen Wert von k sind unterschiedliche Konfigurationen von dünnbesetzten Vektoren $\vec{x} \in \Sigma_k$ zufällig generiert und gemäß Gleichung 4.13 ausgewertet worden, um das Verhältnis $\|\mathbb{R}\vec{x}\|/\|\vec{x}\|$ zu bestimmen. Dieses ist exemplarisch für Konfigurationen im Fall $k = 1000$ in Abbildung 35a dargestellt. Zur Generierung der Vektoren wurde die Position und Anzahl der nicht-Nulleinträge und der Wert der Einträge gleichverteilt gezogen. Durch Variation von k kann hiermit δ_k abgeschätzt werden, vgl. Abbildung 35b. Es folgt, dass in diesem speziellen Fall das geforderte $\delta_k < \sqrt{(2)} - 1$ zur Erfüllung von Gleichung 4.16 lediglich bis zu einem $k \lesssim 100$ erreicht wird.

Anwendungen von Compressed-Sensing basierten Rekonstruktionen in der Computertomographie zeigen allerdings, dass trotz der schwachen Erfüllung des RIP-Kriteriums, die Vorteile der ℓ_1 -Rekonstruktion ausgenutzt werden können[141]. Zur Charakterisierung der Performance werden sogenannte Phasendiagramme angefertigt, vgl. Abbildung 36a. Dafür werden die Größen $\rho = k/n_m \in (0,1)$ bzw. $\eta = n_m/n_r \in (0,1)$ definiert und schrittweise variiert. Für jedes Wertepaar (ρ, η) werden Rekonstruktionen entsprechend eines Testproblems durchgeführt und die Rekonstruktionsgüte eingetragen. Diese Art der Analyse hat sich bewährt, um auch für die CT Anwendung die Rekonstruktionsperformance vergleichbar zu machen. Die Theorie zur Stabilität der Lösungen im Fall Radon-basierter Matrizen ist Stand von aktueller Forschung.

Es ist weiter anzumerken, dass ebenso Anwendungen im Bereich der digitalen Bildverarbeitung Konzepte des Compressed-Sencings benutzen. So können Ansätze zu schlecht gestellten Problemen, wie z.B. Rauschentfernung[142], das „Inpainting Removal“ bzw. „Missing Pixel“ Probleme[143] state-of-the-art Ergebnisse erzielen.

4.2.2. Sparse-Coding

Die Ausführungen zu den zentralen Ergebnissen der Compressed-Sensing Theorie im vorangegangenen Abschnitt zeigen, dass für die erfolgreiche Rekonstruktion, beispielsweise eines Bildes,

die Lösung hinreichend komprimierbar bzw. dünn-besetzt sein muss. Diese Annahme ist für reale Signale im Allgemeinen jedoch nicht direkt erfüllt. Für die folgende Betrachtung sei ein Bild $I \in \mathbb{R}^{n_x \times n_y}$ gegeben, welches durch Aneinanderreihung aller Pixel in einen Vektor $\vec{x} \in \mathbb{R}^{n_r \times 1}$, mit $n_x \cdot n_y = n_r$, überführt werde. Dieser Vektor lässt sich als Linearkombination von Vektoren $\vec{d}_i \in \mathbb{R}^{n_r \times 1}$ gemäß

$$\vec{x} = \sum_{i=1}^{n_d} \beta_i \cdot \vec{d}_i = D\vec{\beta} \quad (4.18)$$

ausdrücken. Dabei entsprechen die Komponenten des Koeffizientenvektors $\vec{\beta} \in \mathbb{R}^{n_d \times 1}$ den Koeffizienten β_i . Die darstellende Matrix $D \in \mathbb{R}^{n_r \times n_d}$ wird typischerweise als Dictionary-Matrix, die zugehörigen Spaltenvektoren \vec{d}_i als Atome bezeichnet. Sind alle Spaltenvektoren linear unabhängig und ist weiter $n_d = n_r$, dann bilden sie eine Basis und die Darstellung von \vec{x} ist eindeutig.

Im Hinblick auf Compressed-Sensing Anwendungen stellt sich die Frage nach der geeigneten Wahl einer Dictionary Matrix, welche eine dünn-besetzte Repräsentation β eines Signales/Bildes \vec{x} ermöglicht. Orthogonale Transformationen, wie beispielsweise die Fourier-Transformation bilden ein prominentes Beispiel für eine Wahl von D : So findet die diskrete Cosinus Transformation (DCT) Anwendung bei der JPEG Komprimierung von Bildern[144]. Ungünstig ist diese Dictionary Wahl allerdings im Hinblick auf die fehlende Lokalität der einzelnen DCT-Atome. Es resultiert eine limitierte Kompressionseffizienz bei der Beschreibung von lokalen Effekten, wie beispielsweise scharfen Kanten, in einem Bild. Aus diesem Grund werden bei modernen Kompressionsverfahren Dictionaries verwendet, deren Atome Lokalitätseigenschaften besitzen, vgl. z.B. die sogenannten „Cohen-Daubechies-Feauveau 9/7“ (CDF9/7) Wavelets des JPEG-2000 Standards[145].

Es hat sich gezeigt, dass für die Erreichung höherer Grade an Dünnbesetztheit realer Signale (d.h. $\|\vec{\beta}\|_0$ soll möglichst klein sein), der Fall $n_d > n_r$ zu betrachten ist[146]. Anschaulich bedeutet dies, dass ein Signal gemäß Gleichung 4.18 als Linearkombination weniger, aus einem „großen Pool“ (dem Dictionary) stammender, Atome darstellbar ist. Diese Darstellung ist nicht eindeutig, jedoch

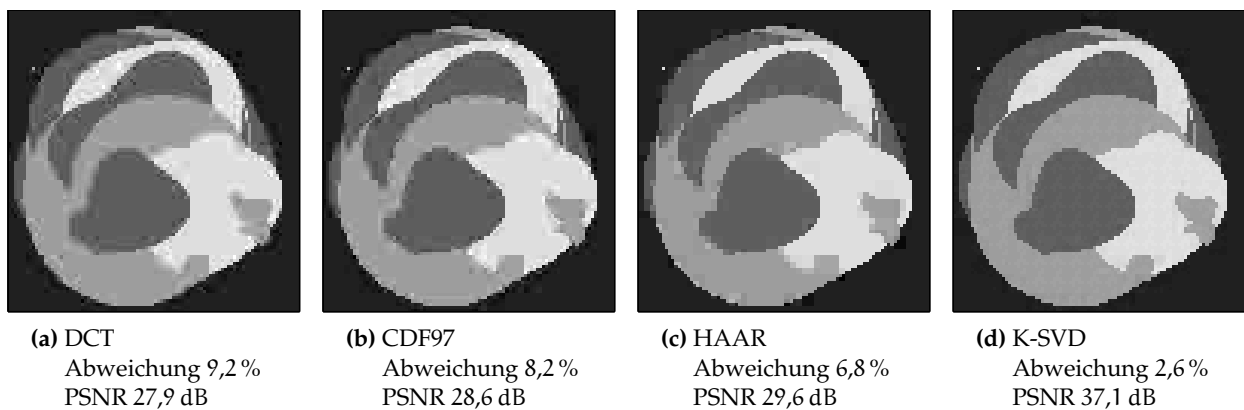


Abbildung 37: Vergleich der Komprimierungseigenschaften analytischer Transformationen a)-c) mit der eines K-SVD erlernten Dictionaries d). Gezeigt sind nach dem harten Thresholding Verfahren komprimierte Bilder $I \in \mathbb{R}^{96 \times 96}$ (sec:recon:performance:datagen) mit $\kappa = 0,9$. Zur Analyse wurde der FISTA Algorithmus nach Unterabschnitt 4.2.4 bei einer Patchgröße von 6×6 Pixeln verwendet. K-SVD Parameter: Redundanz: 4x; $n_k = 6$; Größe des Trainingsdatensatzes: 100x; Anzahl der Iterationen: 100.

lassen sich die Koeffizienten über sogenanntes „Sparse-Coding“ analog zu Gleichung 4.9 gemäß der Compressed-Sensing Theorie durch ein Minimierungsproblem

$$\vec{\beta} = \arg \min_{\vec{\beta}} \left\| \vec{\beta} \right\|_1 \quad \text{s.d.} \quad \vec{x} = D \cdot \vec{\beta} \quad (4.19)$$

bestimmen. Der Vorgang der Minimierung, wie in Gleichung 4.19 beschrieben, wird als Analyse bezeichnet. Die inverse Operation, d.h. die Berechnung von \vec{x} unter Kenntnis von $\vec{\beta}$ über die Matrix-Vektor Multiplikation $\vec{x} = D \cdot \vec{\beta}$, wird Synthese genannt.

Zum Zweck der (verlustbehafteten) Komprimierung eines Signals \vec{x} sei ohne Einschränkung der Allgemeinheit angenommen, dass der zugehörige Koeffizientenvektor nach den Beträgen $|\beta_i|$ seiner Komponenten absteigend sortiert ist. Bei dem sog. harten Thresholding-Verfahren wird das approximierte Signal \vec{x}' durch eine nach den ersten n_k Beiträgen abgeschnittene Linearkombination

$$\vec{x}' = \sum_{i=1}^{n_k} \beta_i \cdot \vec{d}_i = D \cdot \vec{\beta}_T \quad (4.20)$$

berechnet. Der Grad der Komprimierung $\kappa = 1 - n_k/n_r$ wird durch den Kompressionsfaktor $\kappa \in (0, 1)$ ausgedrückt. Der für die Formulierung über eine Matrix-Vektor Multiplikation eingeführte Threshold-Vektor ist per Definition k -Sparse, also $\beta_T \in \Sigma_k$.

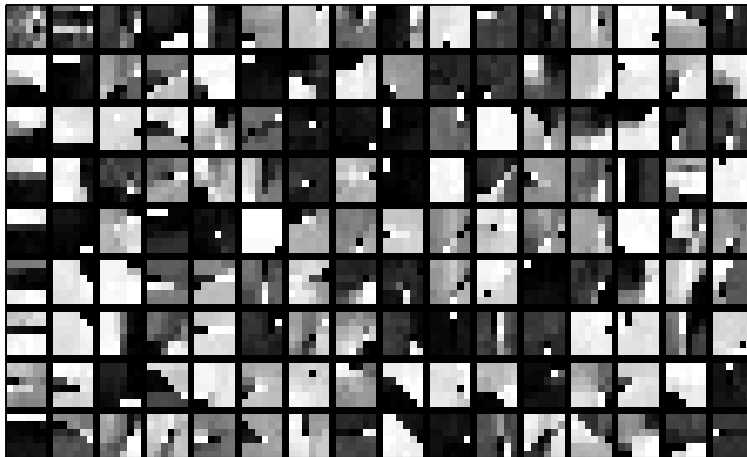
Das Design einer Dictionary-Matrix für ein Kompressionsverfahren ist durch die Minimierung von n_k bei gleichzeitiger Minimierung der verlustbedingten Abweichung $\|\vec{x}' - \vec{x}\|_2$ für eine große Vielzahl an Signalen \vec{x} gekennzeichnet. Es wird zwischen analytischen und lernbasierten Methoden zur Erzeugung von D unterschieden. Analytische Dictionaries werden im Hinblick auf gewünschte Eigenschaften konstruiert. So ist es beispielsweise mit der Curvelet-Transformation[147] möglich, stückweise konstante zweidimensionale Bilder optimal zu komprimieren. Es haben sich eine Reihe von analytischen Transformationen (Contourlets[148], Bandelets[149], Grouplets[150], ...) für die Signalrepräsentation etabliert.

Im Gegensatz zu den analytischen Transformationen, weisen anhand von Trainingsdaten erlernte Dictionaries Vorteile bei der Darstellung „natürlicher“ Bilder auf[151]. Direkte Anwendungen der Dictionary-Learning Methoden führen zu state-of-the-art Verfahren in der digitalen Bildverarbeitung, vgl. Unterabschnitt 4.2.1. Zur Demonstration ist in Abbildung 37 die Performance der Komprimierung eines künstlichen CT-Bildes (vgl. Unterabschnitt 4.4.1) mit $\kappa = 0,9$ unter Verwendung eines erlernten Dictionarys (K-SVD, siehe Unterabschnitt 4.2.3) und drei analytischen Transformationen gezeigt. Die nach ihrem Betrag sortierten Koeffizienten β_i aller Verfahren und die Atome des erlernten Dictionarys sind in Abbildung 38b bzw. 38a dargestellt.

Eine Vielzahl der Verfahren zum Dictionary-Learning, wie etwa die „Method of Optimal Directions“ (MOD)[152], basieren auf einem gemeinsamen Ansatz: Das Training der Matrix D wird mathematisch durch das Minimierungsproblem

$$\min_{D, B} \|X - D \cdot B\|_F^2 \quad \text{s.d.} \quad \left\| \vec{\beta}_i \right\|_0 \leq n_k \quad \forall i \quad (4.21)$$

ausgedrückt. F kennzeichnet dabei die Frobenius Norm. Der Trainingsdatensatz X besteht aus Spaltenvektoren, welche die einzelnen „Lernsignale“ enthalten. Die zugehörigen Koeffizientenvektoren $\vec{\beta}_i$ bilden spaltenweise analog die Koeffizienten-Matrix B . Mit dem Parameter n_k lässt sich der Grad der Sparsity der $\vec{\beta}_i$ festlegen. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete K-SVD



(a) Darstellung der erlernten Dictionary Atome.

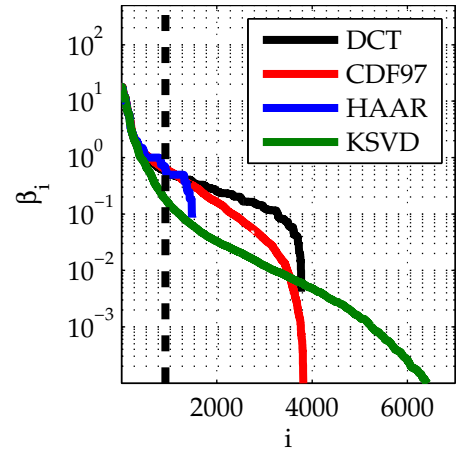

 (b) Koeffizienten β_i , absteigend sortiert nach Absolutbetrag.)

Abbildung 38: Darstellung der erlernten Dictionary Atome a) zur Erzeugung von Abbildung 37. Der Abfall der Koeffizienten β_i ist im Vergleich zu den analytischen Transformationen in b) gezeigt.

Verfahren basiert ebenfalls auf diesem Ansatz und wird im nächsten Abschnitt näher erläutert.

4.2.3. K-SVD Dictionary-Learning

Der K-SVD Algorithmus[153] ist eine auf der Singulärwertzerlegung (SVD) basierende Verallgemeinerung des k-Mean Cluster Verfahrens[154] zum Erlernen von Dictionaries mit dem Ziel, dünnbesetzte Repräsentationen zu bestimmen. Als Eingabe wird ein Trainingsdatensatz $X \in \mathbb{R}^{n_r \times n_t}$ bestehend aus Trainingssignalen $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^{n_r}$ benötigt.

Der prinzipielle Ablauf des K-SVD Algorithmus folgt einem sukzessiven Schema: Beginnend mit einem Start-Dictionary $D_0 \in \mathbb{R}^{n_r \times n_d}$ (beispielsweise aus Zufallszahlen) - hier wird das sog. „overcomplete DCT“ Dictionary[155] verwendet - wird abwechselnd ein Sparse-Coding Schritt und ein Schritt zum Update der Dictionary Matrix vorgenommen. Für den Sparse-Coding Schritt, beginnend mit dem Start-Dictionary D_0 , muss das Minimierungsproblem

$$\min_{\vec{\beta}_i} \left\| D_0 \vec{\beta}_i - \vec{x}_i \right\|_2^2 \quad \text{s.d.} \quad \left\| \vec{\beta}_i \right\|_0 \leq n_k \quad (4.22)$$

für alle $i \in \{1, \dots, n_t\}$ gelöst werden. Es resultieren die zu den Trainingsdaten zugehörigen, bezüglich D_0 dünn-besetzten Koeffizienten Vektoren $\vec{\beta}_i$.

Im Dictionary Update-Schritt werden für jede Spalte $\vec{d}_i \in \mathbb{R}^{n_r \times 1}$ der aktuellen Dictionary-Matrix D alle „aktiven“ Trainingsvektoren $\vec{x}_j \in \mathbb{R}^{n_r \times 1}$ mit $1 \leq j \leq n_d$, gesucht, welche zu Ihrer Darstellung bezüglich D das Atom \vec{d}_i benötigen. Anschließend wird für alle $i \in (1, \dots, n_d)$ die Residuums-Matrix

$$E_i = X - \sum_{j \neq i} \vec{d}_j \cdot \vec{\beta}_j^T \quad (4.23)$$

bestimmt und eine Matrix E_i^{red} generiert, welche lediglich alle aktiven Spalten enthält. Es wird

eine Singulärwertzerlegung $E_i^{ed} = U\Delta V^T$ durchgeführt und die erste Spalte von U als neuer Dictionary Vektor \vec{d}_i gesetzt. Der zugehörige Koeffizientenvektor β_i ergibt sich durch Multiplikation der Spalte von V mit $\Delta(1,1)$. Anschließend wird die Iteration mit Gleichung 4.22 fortgeführt. In Form von Pseudocode ist das Verfahren in Algorithmus 4.1 zusammengefasst.

Algorithmus 4.1: K-SVD Algorithmus, Pseudocode

```

1 % Eingaben
2 Trainingsdaten-Matrix X
3 Start-Dictionary D0
4 Ziel Sparsity nk
5 Anzahl Iterationen niter
6
7 % Code
8 for v = 0 : niter
9     %Schritt 1: Sparse-Coding
10    for i = 1 : nt
11         $\vec{\beta}_i = \arg \min(\|D_v \cdot \vec{\beta}_i - \vec{x}_i\|_2^2 \quad \text{s.d.} \quad \|\vec{\beta}_i\|_0 \leq n_k ;$ 
12    end
13    %Schritt 2: Dictionary Update
14    for i = 1 : nd
15         $\omega_i = \{j : 1 \leq j \leq n_d, \beta_i^T(j) \neq 0\};$ 
16         $E_i = X - \sum_{j \neq i} \vec{d}_j \cdot \beta_j^T ;$ 
17         $E_i^R = E_i(\omega_i);$ 
18         $[U, \Delta, V] = \text{svd}(E_i^R);$ 
19         $\vec{d}_i = U(:, 1);$ 
20         $\vec{\beta}_i = V(:, 1) \cdot \Delta(1, 1);$ 
21    end
22 end

```

4.2.4. Rekonstruktionsalgorithmen

Im Folgenden wird auf die Algorithmen zur Lösung der im Rahmen dieser Arbeit auftretenden Minimierungsprobleme eingegangen. Für die Analyse von Vektoren bezüglich eines Dictionarys D , sowie für das Ausführen des K-SVD Algorithmus wird ein Verfahren zur Lösung des klassischen Compressed-Sensing Problems

$$\min_{\vec{\beta}} \left\| D \cdot \vec{\beta} - \vec{x} \right\|_2^2 \quad \text{s.d.} \quad \left\| \vec{\beta} \right\|_0 \leq n_k \quad (4.24)$$

benötigt (vgl. ebenfalls Gleichung 4.10). Mithilfe des sog. „Matching Pursuit“ (MP) Algorithmus von Mallat und Zhang[156] lässt sich eine Lösung in n_k Schritten approximieren. Dieser Algorithmus ist insbesondere für klein- und mittelskalige Probleme geeignet (vgl. explizite Matrix Inversionen in Algorithmus 4.2, Zeile 12). Da hier die Berechnung bei der Analyse oder dem Dictionary-Learning patchweise geschieht (vgl. Abschnitt 4.3), stellt dies keine Einschränkung dar. Es wird jedoch eine erweiterte Variante, der sog. „Orthogonale Matching Pursuit“ (OMP) Algorithmus[157] zur Berechnung verwendet.

OMP

Zur Berechnung einer Lösung von Gleichung 4.24 wird zunächst das MP Verfahren erläutert und anschließend der OMP Algorithmus formuliert. Für die Bestimmung des dünn-besetzten Ausgabevektors $\vec{\beta} \in \mathbb{R}^{n_a \times 1}$ wird eingabeseitig eine Dictionary-Matrix $D \in \mathbb{R}^{n_r \times n_a}$, das zu komprimierende bzw. analysierende Signal $\vec{x} \in \mathbb{R}^{n_r \times 1}$ und der gewünschte Grad der Dünnbesetztheit n_k benötigt.

Das Prinzip des MP Verfahrens beruht auf der sukzessiven Analyse des Signals durch die Berechnung von Skalarprodukten zwischen allen Dictionary Atomen \vec{d}_i und dem Signalvektor. Das Atom, welches den größten Anteil am Signal besitzt wird ausgewählt und anteilig vom Signal subtrahiert. Der resultierende Residuumsvektor \vec{r} dient als neuer Signalvektor zur Analyse bezüglich der Atome des Dictionarys. Dieser Vorgang wird wiederholt bis ein geeignetes Abbruchkriterium erfüllt ist; beispielsweise bis die Norm des Residuumsvektors eine Schranke $\|\vec{r}\| < \epsilon$ unterschritten hat oder eine maximale Anzahl an Iteration n_k durchgeführt sind.

Im Unterschied zum MP Algorithmus wird bei dem OMP Verfahren das Signal in jedem Schritt auf den gesamten Unterraum aller bereits bestimmten Atome projiziert. Die im v -ten Schritt bereits bestimmten Vektoren $\vec{d}_1, \dots, \vec{d}_v$ werden dazu durch spaltenweises Aneinanderreihen in einer Matrix Φ zusammengefasst. Anschließend kann der orthogonale Projektor, welcher den Signalvektor auf Φ projiziert, durch $P = \Phi \cdot (\Phi^T \cdot \Phi)^{-1} \cdot \Phi^T$ berechnet werden. Das Residuum für die Analyse im $(v + 1)$ -ten Schritt ist entsprechend durch $\vec{r} = \vec{x} - P \cdot \vec{x}$ gegeben. Nach Erreichen des Abbruchkriteriums wird der dünn-besetzte Ausgabevektor $\vec{\beta}$ durch $(\Phi^T \cdot \Phi)^{-1} \cdot \Phi^T \cdot \vec{x}$ bestimmt. Formal ist der OMP Algorithmus mit Hilfe von Pseudocode in Algorithmus 4.2 dargestellt. Dabei ist das Abbruchkriterium durch eine maximale Anzahl an zu identifizierenden Atomen n_k vorgegeben.

Algorithmus 4.2: Orthogonaler Matching Pursuit (OMP) Algorithmus, Pseudocode

```

1  % Eingaben
2  Dictionary-Matrix D
3  Signalvektor  $\vec{x}$ 
4
5  % Initialisierung
6   $\vec{r}_1 = \vec{x}$ 
7
8  % Code
9  for  $v = 1 : n_k$ 
10      $\vec{d}^v = \arg \max_{\vec{d}_i} |\vec{d}_i \cdot \vec{r}_v|$ 
11      $\Phi^v = [\vec{d}^1, \dots, \vec{d}^v]$ 
12      $P = \Phi \cdot (\Phi^T \cdot \Phi)^{-1} \cdot \Phi^T$ 
13      $\vec{r}_{v+1} = \vec{x} - P \cdot \vec{x}$ 
14 end
15
16 %Ausgabe
17  $\vec{\beta} = (\Phi^T \cdot \Phi)^{-1} \cdot \Phi^T \cdot \vec{x}$ 

```

FISTA

Anstatt das Minimierungsproblem aus Gleichung 4.24 zu lösen, lässt sich zum Zweck des Sparse Codings nach Chen, Donoho und Saunders ebenfalls eine Lösung des relaxierten „Basis Pursuit“ (BP) Problems

$$\min_{\vec{\beta}} \left\| \vec{\beta} \right\|_1 \quad \text{s.d.} \quad D \cdot \vec{\beta} = \vec{x} \quad (4.25)$$

bestimmen[158]. Durch die Verwendung der konvexen Zielfunktion $\|\vec{\beta}\|_1$ lässt sich das Problem als lineares Programm formulieren und mittels konventioneller Methoden der linearen Optimierung, wie z.B. dem innere Punkte Verfahren, lösen.

Da es sich bei dem vorliegenden Tomographie-Problem um ein großskaliges Problem handelt ($n_r \gtrsim 1000$), wird das Rekonstruktionsproblem Gleichung 4.9 adressiert². Für den Fall verrauschter Daten kann das „Basis Pursuit Denoising“ (BPDN), wie es in Gleichung 4.15 mit Nebenbedingungen formuliert ist, verwendet werden. Eine äquivalente BPDN Formulierung ohne Nebenbedingungen wird durch

$$\min_{\vec{x}} \left\| R \cdot \vec{x} - \vec{b} \right\|_2^2 + \lambda \|\vec{x}\|_1 \quad (4.26)$$

beschrieben[159]. Dabei kann λ als Parameter zur Steuerung der Sparsity der Lösung und damit als Regularisierungsparameter interpretiert werden. Strategien zur Wahl von λ sind beispielsweise in [159] beschrieben; auf die getroffene Wahl im Rahmen dieser Arbeit wird am Ende des Unterabschnitts eingegangen.

Zur Lösung von Gleichung 4.26 ist eine Vielzahl an iterativen Verfahren bekannt[160]. Für großskalige Probleme zeichnet sich insbesondere die Klasse der sog. „Iterativen Shrinkage Thresholding Algorithmen“ (ISTA) Verfahren aus. Hier wird eine explizite Matrixinversion nicht benötigt. Speziell der „Fast Iterative Shrinkage Thresholding Algorithmus“ (FISTA)[161] zeigt gute Performance-Ergebnisse bei schlecht gestellten Problemen[162] und erlaubt es, durch seine vergleichsweise einfache Implementierung, zahlreiche Modifikationen vorzunehmen. Zur Formulierung von FISTA wird zunächst das BPDN Problem (Gleichung 4.26) durch

$$\min_{\vec{x}} J(\vec{x}) = f(\vec{x}) + g(\vec{x}) \quad (4.27)$$

verallgemeinert dargestellt. Dabei ist das Minimierungsfunktional $J(\vec{x})$ als Summe aus einer konvexen und stetig-differenzierbaren Funktion $f(\vec{x})$ mit Lipschitz-stetigem Gradienten (Lipschitzkonstante $L(f)$) und einer konvexen stetigen Funktion $g(\vec{x})$ geschrieben. Im Weiteren soll das Funktional durch eine quadratische Funktion $J_Q(\vec{x}, \vec{y})$ gemäß

$$J_Q(\vec{x}, \vec{y}) = f(\vec{y}) + (\vec{x} - \vec{y}) \cdot \vec{\nabla} f(\vec{y}) + \frac{L}{2} \|\vec{x} - \vec{y}\|_2^2 + g(\vec{x}) \quad (4.28)$$

im Punkt \vec{y} approximiert werden. Statt J soll J_Q minimiert werden. Eine Lösung $(\vec{\rho}_L)_i(\vec{y})$ lässt sich analytisch mit dem sog. „Shrinkage“-Operator $\text{shrink}_\alpha(x) := (|x| - \alpha)_+ \cdot \text{sgn}(x)$ formulieren:

$$(\vec{\rho}_L)_i(\vec{y}) = \text{shrink}_{\lambda/L} \left(y_i - 2/L \left(R^T (R\vec{y} - \vec{b}) \right)_i \right). \quad (4.29)$$

Mit diesem Ergebnis kann eine Iterationsvorschrift zur Lösung von Gleichung 4.27 formuliert

²Dazu sei angenommen, dass R eine Darstellung beinhaltet, bezüglich der \vec{x} bereits hinreichend komprimierbar ist

werden: Man bestimme im ν -ten Schritt das Minimum $\vec{x}_\nu = \vec{\rho}_L(\vec{x}_{\nu-1})$ von J_Q an der Entwicklungsstelle $\vec{x}_{\nu-1}$. Diese Vorschrift entspricht gerade dem ISTA Verfahren[163] mit einer konstanten Schrittweite $1/L$.

Zum Erreichen einer höheren Konvergenzrate wird beim FISTA Verfahren für die $(\nu + 1)$ -te Approximation $\vec{y}_{\nu+1}$ eine spezielle Linearkombination aus zwei zuvor bestimmten Approximationen \vec{x}_ν und $\vec{x}_{\nu-1}$ berechnet. Die explizite Vorschrift

$$\vec{y}_{k+1} = \vec{x}_k + \tau_k(\vec{x}_k - \vec{x}_{k-1})$$

lässt sich als Extrapolation der Lösung entlang einer Geraden deuten. Für den Faktor τ ergibt sich nach [161] $\tau_k = (t_k - 1)/t_{k+1}$, wobei $t_k = (1 + \sqrt{1 + 4t_k^2})/2$ ist, um Konvergenz gemäß Gleichung 4.30 zu gewährleisten.

Wie auch bei dem ISTA Verfahren, stellt sich zusätzlich die Frage nach der optimalen Schrittweite $1/L$ des Algorithmus, da die Lipschitz-Konstante L häufig nicht bekannt ist. Zur Lösung wird ein sog. „Backtracking“ durchgeführt: Gegeben sei ein Startwert $L_0 > 0$ und ein Backtracking Parameter $\eta_L > 1$. Dann wird in jedem Iterationsschritt der kleinste Index i_ν derart gesucht, sodass mit $\bar{L} = \eta_L^{i_\nu} L_{\nu-1}$ die Relation

$$J(\vec{\rho}_{\bar{L}}(\vec{y}_\nu)) \leq J_{Q,\bar{L}}(\vec{\rho}_{\bar{L}}(\vec{y}_\nu), \vec{y}_\nu)$$

erfüllt ist. Mit diesem L_ν kann die Minimierung durchgeführt werden. Das komplette FISTA Verfahren ist in Form von Pseudocode in Algorithmus 4.3 zusammengefasst.

Algorithmus 4.3: Fast Iterative Shrinkage Thresholding Algorithmus (FISTA) mit Backtracking

```

1 % Eingaben
2 Radon-Matrix R
3 Messvektor  $\vec{b}$ 
4 Sparsity-Parameter  $\lambda$ 
5 Lipschitz Startwert  $L_0$ 
6 Backtracking Parameter  $\eta_L$ 
7 Startwert  $\vec{x}_0$ 
8
9 % Initialisierung
10  $\vec{y}_1 = \vec{x}_0$ 
11  $t_1 = 1$ 
12
13 % Code
14 for  $\nu = 1 : n_k$ 
15     %Schritt 1: L-Backtracking
16     while  $J(\vec{\rho}_{\bar{L}}(\vec{y}_\nu)) > J_{Q,\bar{L}}(\vec{\rho}_{\bar{L}}(\vec{y}_\nu), \vec{y}_\nu)$ 
17          $\bar{L} = \eta_L^{i_\nu} \cdot L_{\nu-1}$ 
18     end
19     %Schritt 2: Minimierung
20      $\vec{x}_\nu = \vec{\rho}_{L_\nu}(\vec{y}_\nu)$ 
21      $t_{\nu+1} = (1 + \sqrt{1 + 4t_\nu^2})/2$ 
22      $\vec{y}_{\nu+1} = \vec{x}_\nu + (t_\nu - 1)/t_{\nu+1} \cdot (\vec{x}_\nu - \vec{x}_{\nu-1})$ 
23 end
24 %Ausgabe
25  $\vec{x} = \vec{y}_{\nu+1}$ 

```

Mit diesen Parameterwerten kann für das FISTA Verfahren mit Backtracking folgende Aussage über das Konvergenzverhalten gemacht werden: Seien $\{\vec{x}_k\}, \{\vec{y}_k\}$ eine mit Algorithmus 4.3 generierte Serie an Vektoren und sei \vec{x}^* eine Lösung des Minimierungsproblems aus Gleichung 4.27, dann gilt jedes $\nu \geq 1$:

$$J(\vec{x}_\nu) - J(\vec{x}^*) \leq \frac{2\eta_L L \|\vec{x}_0 - \vec{x}^*\|_2^2}{(\nu + 1)^2}, \quad (4.30)$$

d.h. die Funktionswerte nähern sich quadratisch in $1/\nu$ einem Minimum $J(\vec{x}^*)$ an.

Zuletzt bleibt die Frage nach der Wahl des Sparsity-Parameters λ . Wendet man die Optimalitätsbedingung statt auf J_Q direkt auf J an, so ist ein Vektor \vec{x}^* genau dann die Lösung des zugehörigen Minimierungsproblems, wenn

$$\begin{aligned} \left(2R^T (\vec{b} - R \cdot \vec{x}^*)\right)_i &= \lambda \operatorname{sgn}((\vec{x}^*)_i) & , \vec{x}_i^* \neq 0 \\ \left| \left(2R^T (\vec{b} - R \cdot \vec{x}^*)\right)_i \right| &\leq \lambda & , \vec{x}_i^* = 0 \end{aligned} \quad (4.31)$$

für alle Komponenten i erfüllt ist[164]. Aus der zweiten Bedingung folgt mit $\lambda \geq \|2(R^T \cdot \vec{b})_i\|_\infty =: \lambda_{\max}$, dass $\vec{x}^* = \vec{0}$ gilt. Im Grenzwert $\lambda \rightarrow 0$ geht das BPDN Problem hingegen in den Basis Pursuit (siehe Gleichung 4.25) über. Statt den Sparsity-Parameter fest aus dem Intervall $(0, \lambda_{\max})$ zu wählen, wird eine sog. Warmstart-Strategie mit Fixpunkt Fortsetzung verwendet[165]. Dabei wird λ in jedem FISTA Iterationsschritt gemäß $\lambda(\nu) = \eta_\lambda^\nu \cdot \lambda_{\max}$ mit einem $0 < \eta_\lambda < 1$ geometrisch verkleinert, bis in einem Iterationsschritt $\hat{\nu}$ eine definierte untere Grenze λ_{\min} erreicht ist. Für alle folgenden Schritte $\nu \geq \hat{\nu}$ wird dann $\lambda(\nu) = \lambda_{\min}$ gewählt.

4.3. CSCT-Rekonstruktionsalgorithmus

In diesem Abschnitt werden die Resultate aus Abschnitt 4.2 verwendet, um einen Compressed-Sensing basierten Rekonstruktionsalgorithmus für die CSCT-Rekonstruktion unter Verwendung von a priori Wissen zu formulieren. Unter Kenntnis des vektorisierten CBCT-Bildes \vec{x}_{CB} , wird dieses auf zwei Weisen genutzt: Zum einen werden mit Hilfe von Bildverarbeitungsmethoden geometrische Informationen aus dem Bild extrahiert und über eine Nebenbedingungsmatrix C mit Nebenbedingungsvektor \vec{b}_C direkt in das Minimierungsproblem integriert (vgl. Unterabschnitt 4.3.2). Zum anderen wird mittels des Bildes ein Dictionary D trainiert, bezüglich dessen \vec{x}_{CB} komprimierbar darstellbar ist, d.h. $\vec{x}_{CB} \approx D \cdot \vec{\beta}$ mit einem dünn-besetzten Koeffizientenvektor $\vec{\beta}$ gilt (vgl. Unterabschnitt 4.3.1). Unter der Annahme, dass das zu rekonstruierende CSCT-Bild ebenfalls unter dieser Darstellung komprimierbar ist, lässt sich das Minimierungsproblem zur Rekonstruktion von \vec{x} durch

$$\min_{\vec{\beta}} \left\| \begin{bmatrix} R \\ C \end{bmatrix} \cdot D \cdot \vec{\beta} - \begin{bmatrix} \vec{b} \\ \vec{b}_C \end{bmatrix} \right\|_2^2 + \lambda \|\vec{\beta}\|_1 \quad \text{s.d. } \vec{x} \geq \vec{0} \quad (4.32)$$

beschreiben. Dabei wird ebenfalls die Nicht-Negativität der Lösung im Ortsraum gefordert. Im Folgenden wird zunächst auf die Erzeugung der Matrizen C , D und R eingegangen und die Auswirkungen der Unterabtastung der Streuprojektionen abgeschätzt, um abschließend einen Rekonstruktionsalgorithmus zur Lösung von Gleichung 4.32 vorzustellen.

4.3.1. Dictionary Learning

Das für die CSCT-Rekonstruktion relevante CBCT-Schichtbild in der yz -Ebene werde im Folgenden durch $I_{\text{CBCT}}(i_y, i_z)$ - mit Indizes $i_y \in \{1, \dots, n_y\}$ bzw. $i_z \in \{1, \dots, n_z\}$ und einer Gesamtpixelanzahl $n_r = n_y \cdot n_z$ - bezeichnet. Die vektorisierte Form von I_{CBCT} sei weiterhin durch \vec{x}_{CB} definiert. Dabei ist vorausgesetzt, dass die Voxelgröße im CBC- Datensatz auf die Voxelgröße des CSCT-Bildes angepasst ist.

Wie bei konventionellen Komprimierungsverfahren üblich, wird das Bild zur Analyse bzw. Synthese bezüglich eines Dictionarys D in einzelne Segmente aufgeteilt. Diese Segmentierung wird mit Hilfe quadratischer Blöcke der Größe $w \times w$, den sog. „Patches“, realisiert. Die roten Gitterlinien in Abbildung 39 (oben links) veranschaulichen eine derartige Aufteilung des Bildes in quadratische Teilblöcke. Die Anzahl aller Patches ist durch $n_{\text{Patch}} = n_r/w^2$, die Anzahl der Patches einer Zeile, z.B. in y -Richtung, durch $n_{\text{Patch},y} = n_y/w$, gegeben. Für den Fall $(n_y \bmod w) \neq 0$, wird das Bild am Rand entsprechend durch Nullen ergänzt („zero-padding“).

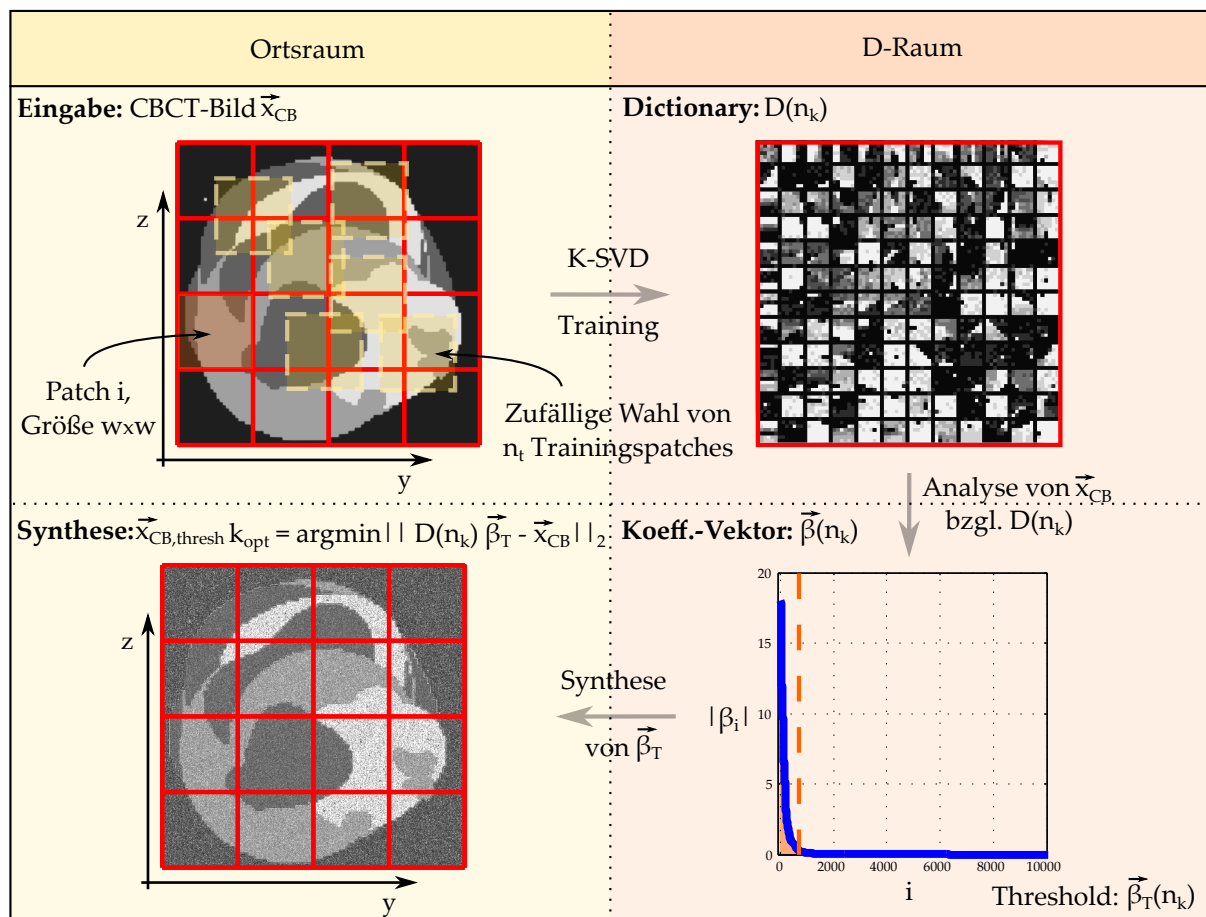


Abbildung 39: Schematische Darstellung des Dictionary Optimierungsprozesses: Aus dem CBCT-Bild $I_{\text{CBCT}}(i_y, i_z)$ werden zufällig gewählte Patches (gelb) zum Erlernen eines Dictionarys via K-SVD verwendet. In Abhängigkeit der Ziel-Sparsity n_k , wird das CBCT-Bild bezüglich des erlernten Dictionarys $D(n_k)$ analysiert und mit Hilfe des Hard-Thresholdings approximiert. Anschließend wird n_k derart gewählt, dass die Abweichung zwischen Approximation und Eingangsbild minimiert ist.

Das Teilbild im i -ten Patch werde mit $I_{CBCT}^{P_i}$, die zugehörige vektorisierte Form mit $\vec{x}_{CB}^{P_i}$ bezeichnet. Die vektorielle Darstellung des gesamten Bildes I_{CBCT} bezüglich der Patch-Segmentierung \vec{x}_{CB}^P ist durch die zeilenweise Aneinanderreihung der Vektoren $\vec{x}_{CB}^{P_i}$ für $i \in \{1, \dots, n_{Patch}\}$ definiert. Analog wird mit den Koeffizientenvektoren $\vec{\beta}^{P_i}$ zur Beschreibung von \vec{x}_{CB} bezüglich des Patch-Dictionaries D gemäß $\vec{x}_{CB}^{P_i} = D \cdot \vec{\beta}^{P_i}$ verfahren. Es lässt sich eine Synthese-Matrix $A \in \mathbb{R}^{n_r \times n_d \cdot n_{Patch}}$ bestimmen, s.d. über

$$A \cdot \vec{\beta}^P = \vec{x}_{CB} \quad (4.33)$$

die Berechnung des Bildes \vec{x}_{CB} im Ortsraum bezüglich der Standardeinheitsbasis erfolgen kann. Es ist anzumerken, dass in dieser Arbeit bei der Formulierung von Optimierungsproblemen zur Rekonstruktion, siehe beispielsweise Gleichung 4.32, der Übersichtlichkeit halber auf diese detaillierte Notation verzichtet wird³.

Für das Erlernen eines Dictionarys unter Verwendung des K-SVD Algorithmus werden n_t zufällige Trainingspatches $\vec{x}_i \in \mathbb{R}^{w^2 \times 1}$ der Größe $w \times w$ mit $i \in \{1, \dots, n_t\}$ aus dem CBCT-Bild extrahiert. Dabei wird zusätzlich gefordert, dass die Standardabweichung der Komponenten eines Trainingsvektors einen vorgegebenen Schwellwert $\text{std}(\vec{x}_i) > \text{eps}_{\text{std}}$ überschreiten muss. Dies verhindert, dass Bildareale mit konstanter Intensität zum Trainingsdatensatz beitragen; eps_{std} wird entsprechend an die Standardabweichung des Bildrauschens angepasst. Mit diesem Trainingsdatensatz kann für eine feste Anzahl von K-SVD Iterationen n_{iter} ein r_D -fach redundantes Dictionary $D(n_k)$ in Abhängigkeit der K-SVD Ziel-Sparsity n_k erlernt werden.

Algorithmus 4.4: Dictionary Training, Pseudocode

```

1 % Eingaben
2 K-SVD Parameter param = {w, r_D, n_t, n_iter}
3 CBCT-Bild  $\vec{x}_{CB}$ 
4 Kompressionsziel  $n_{k, \text{thresh}}$ 
5
6 % Code
7 for  $n_k = 1 : n_{k, \text{max}}$ 
8      $D(n_k) = \text{ksvd}(\vec{x}_{CB}, n_k, \text{param})$ 
9      $\vec{\beta}_{\text{thresh}}^P = \text{omp}(D, \vec{x}_{CB}, n_{k, \text{thresh}})$ 
10     $\vec{x}_{CB, \text{thresh}} = D \cdot \vec{\beta}_{\text{thresh}}^P$ 
11     $r(n_k) = \|\vec{x}_{CB, \text{thresh}} - \vec{x}_{CB}\|_2$ 
12 end
13  $n_{k, \text{opt}} = \arg \min(r(n_k))$ 
14
15 %Ausgabe
16  $D_{\text{opt}} = D(n_{k, \text{opt}})$ 

```

Das Verfahren zur Optimierung des Dictionarys im Hinblick auf dessen Komprimierungseigenschaften ist schematisch in Abbildung 39 dargestellt. $D(n_k)$ wird für eine Reihe von Werten $n_k \in \{1, \dots, n_{k, \text{max}}\}$ bestimmt, um anschließend \vec{x} bezüglich $D(n_k)$ mittels OMP patchweise zu analysieren. Der resultierende Koeffizientenvektor $\vec{\beta}^P(n_k)$ wird durch einen vorgegebenen Schwellwert in einen dünn-besetzten Vektor mit Sparsity $n_{k, \text{thresh}}$ überführt und die Bild-Approximation

³Dies ist ohne Einschränkung möglich, da $\vec{\beta}$ aus $\vec{\beta}^P$ durch eine lineare Transformation T_p hervorgeht. Damit lässt sich Gleichung 4.33 über $\vec{x}_{CB} = A \cdot \vec{\beta}^P = AT_p \cdot \vec{\beta} =: \tilde{D} \cdot \vec{\beta}$ unter Verwendung einer globalen Dictionary-Matrix \tilde{D} umformulieren.

$\vec{x}_{CB,thresh} = A \cdot \vec{\beta}^p(n_k)$ berechnet. Es wird der Parameter $n_{k,opt}$ gewählt, welcher das Residuum $\|\vec{x}_{CB,thresh} - \vec{x}_{CB}\|_2$ minimiert und das zugehörige Dictionary D_{opt} mit dem Koeffizientenvektor $\vec{\beta}_{opt}$ gespeichert. Das Verfahren ist in Form von Pseudocode in Algorithmus 4.4 dargestellt.

4.3.2. Präprozess

Der im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Dictionary-Training Prozess liefert ein „optimales“ Dictionary D_{opt} zur Komprimierung des CBCT-Bildes, sowie den zugehörigen Koeffizientenvektor $\vec{\beta}_{opt}$. Durch die patchweise Analyse lassen sich zu Bildbereichen, wie z.B. dem Hintergrund außerhalb der ROI oder iso-intensen großflächigen Arealen, korrespondierende Koeffizienten identifizieren, welche keinen relevanten Beitrag zum CBCT-Bild liefern. Unter der Annahme, dass diese Dictionary-Atome ebenfalls keinen signifikanten Anteil am CSCT-Bild haben, lassen sie sich durch ein Threshold-Verfahren entfernen: Es werden die vom Betrag kleinsten $n_{k,t,r}$ Koeffizienten vernachlässigt, bzw. die zugehörigen Spalten der Radonmatrix gestrichen. Dabei dürfen einerseits die Komprimierungsverluste $\|D_{opt} \cdot \vec{\beta}_{thresh} - \vec{x}_{CB}\|_2 / \|\vec{x}_{CB}\|_2$ einen vorgegeben Wert, z.B. 1 %, nicht überschreiten, andererseits muss ausreichend Redundanz des Dictionarys $r_D \gtrsim 1$ bestehen bleiben, damit der CSCT-Bildinhalt komprimierbar darstellbar bleibt. Zur Wahl von $n_{k,t,r}$ vgl. Unterabschnitt 4.4.3.

Die Kenntnis des CBCT-Bildes erlaubt es, neben der Optimierung der Darstellung durch das Dictionary ebenfalls mit Methoden der Bildverarbeitung a priori Informationen zu erschließen, welche direkt in Form von Gleichungsrestriktionen in den Datenterm des Rekonstruktionsproblems eingebracht werden können. Lassen sich unterschiedliche Pixel $(\vec{x}_{CB})_i$ und $(\vec{x}_{CB})_j$ im CBCT-Bild beispielsweise dem selben Material gleicher Dichte zuordnen, so gilt $(\vec{x}_{CB})_i - (\vec{x}_{CB})_j = 0$. Diese Information entspricht einer Zeile k der Nebenbedingungsmatrix C und kann über

$$(C)_{k,:} \cdot \vec{x} = 0 \Leftrightarrow [0 \dots 0 \quad 1 \quad 0 \dots 0 \quad -1 \quad 0 \dots 0] \cdot D \cdot \vec{\beta} = 0 \quad (4.34)$$

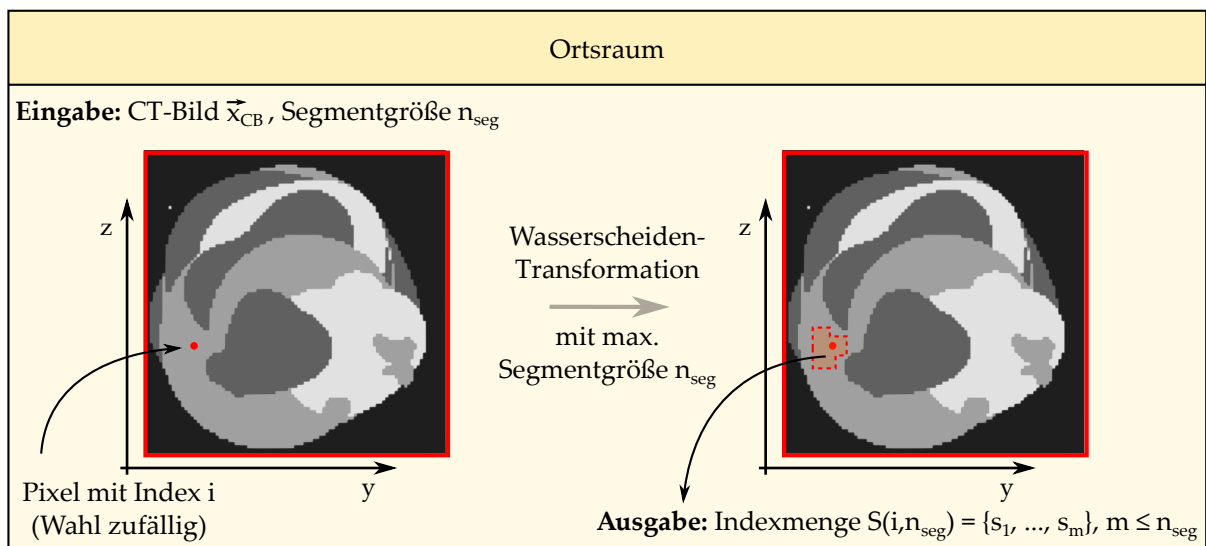


Abbildung 40: Demonstration der zufälligen Wasserscheiden-Segmentierung. Es wird eine hinreichend große Indexmenge generiert, indem das Verfahren mit einer vorgegebenen Anzahl an Startpixeln i und Segmentgrößen n_{seg} wiederholt wird.

implementiert werden, wobei für den Nebenbedingungsvektor (rechte Seite) $\vec{b}_C = \vec{0}$ gilt. Um den Einfluss der Stärke dieser Randbedingung auf die Lösung des zugehörigen Optimierungsproblems kontrollieren zu können, werden die Zeilen von C mit einem Wichtungsfaktor λ_{seg} multipliziert. In Abhängigkeit des Einflusses der Segmentierung λ_{seg} kann die lokale Glattheit der Lösung eingestellt werden. Hierdurch wird die Lösung stabilisiert, da durch die zusätzlichen Gleichungen der Grad der Unterbestimmtheit des Gleichungssystems reduziert wird. Dabei lässt sich λ_{seg} als sog. Tikhonov-Regularisierungsparameter und C als lokale Tikhonov-Matrix interpretieren[166].

Die Bestimmung von Pixeln, welchen das gleiche Material mit selber Dichte zugrunde liegt, entspricht einem Segmentierungsproblem. Im Allgemeinen stellt die Entwicklung von robusten Segmentierungsverfahren in automatisierten Prozessen eine Herausforderung dar. Im vorliegenden Fall ist es jedoch ausreichend, kleinere Areale eines Materialsegments zu bestimmen. Statt der Identifizierung eines komplett zusammenhängenden Materialgebiets, werden lediglich kleinere Teilgebiete mit einer vorher definierten Pixelanzahl n_{seg} im CBCT-Bild bestimmt. Dazu wird eine modifizierte Variante der sog. Wasserscheidentransformation[167] („watershed segmentation“) verwendet: Es wird dabei von einem zufällig gewählten Startpixel $(\vec{x}_{\text{CB}})_{i_1}$ im CBCT-Bild die angrenzende 4-er Nachbarschaft untersucht. Erfüllt ein Nachbarschaftspixel die Segmentierungsbedingung, wird sie in die Indexmenge des aktuellen Segments aufgenommen, siehe Abbildung 40. Dabei wird ein Pixel im v -ten Schritt akzeptiert, wenn

$$\left| \sum_{k=1}^{v-1} \frac{(\vec{x}_{\text{CB}})_{i_k}}{v-1} - (\vec{x}_{\text{CB}})_{i_v} \right| \leq \epsilon_{\text{seg}} \quad (4.35)$$

erfüllt ist. Die Größe ϵ_{seg} beschreibt die maximal zulässige Abweichung des neuen Pixelwertes verglichen mit dem Mittelwert der bisher akzeptierten Werte. ϵ_{seg} wird typischerweise entsprechend des zu erwartenden Bildrauschens gewählt. Neue Pixel werden solange in die aktuelle Segmentierungsindexmenge aufgenommen, bis die maximale Segmentgröße n_{seg} erreicht ist. Dieses Vorgehen wird für weitere Startpositionen innerhalb des CBCT-Bildes wiederholt, bis über alle möglichen Startpixel-Positionen iteriert wurde. Bereits segmentierte Bildbereiche werden bei der Startpixelwahl nicht mehr berücksichtigt (keine Überlappung). Um ebenfalls größere Areale zu detektieren, wird nach einer derartigen Iteration die maximale Segmentgröße gemäß $n_{\text{seg}}(v_{\text{seg}}) = n_{\text{seg},0} + m_{\text{seg}} \cdot v_{\text{seg}}$ linear erhöht und der gesamte Segmentierungsvorgang wiederholt. Dabei beschreibt $n_{\text{seg},0}$ die Start-Segmentgröße und m_{seg} gibt die Steigung an, mit der die Patchgröße bis zu einer maximalen Segmentgröße bei $v_{\text{seg},\text{max}}$ erhöht wird. Das komplette Verfahren ist in Form von Pseudocode in Algorithmus 4.5 skizziert. Nach Durchlaufen des Algorithmus ist eine Indexmenge $\mathcal{J}_{\text{seg}}(i_0, n_{\text{seg}}) = \{i_0, \dots, i_{n_{\text{seg}}-1}\}$ für jeden möglichen Startwert i_0 bei einer gegebenen Segmentgröße n_{seg} vorhanden. Für jeden Startwert lassen sich $n_{\text{seg}} - 1$ Nebenbedingungen gemäß Gleichung 4.34 generieren.

Algorithmus 4.5: Segmentierungsprozess, Pseudocode

```

1 % Eingaben
2 Segmentierungsparameter  $n_{\text{seg},0}, m_{\text{seg}}, \epsilon_{\text{seg}}$ 
3 Anzahl Iterationen  $v_{\text{max}}$ 
4 CBCT-Bild  $\vec{x}_{\text{CB}}$ 
5
6 % Code
7 for  $v = 1 : v_{\text{max}}$ 
8      $n_{\text{seg}} = n_{\text{seg},0} + m_{\text{seg}} \cdot v$ 
9     for  $i = 1 : \text{length}(\vec{x}_{\text{CB}})$ 
10          $J(v, i) = \text{watershed}(\vec{x}_{\text{CB}}, i, n_{\text{seg}})$ 
11     end
12 end
13
14 % Ausgabe
15 Indexmenge  $J(v, i)$ 

```

4.3.3. Generierung der Radonmatrix

Für die Rekonstruktion realer und simulierter CT-Sinogramme werden unterschiedliche Ansätze zur Generierung der Radonmatrix⁴ gewählt. Es ist bekannt, dass bei Untersuchungen zur Performance eines Rekonstruktionsalgorithmus mittels synthetischer Daten die Rekonstruktionsgüte im Vergleich zu realen Daten überschätzt wird, wenn dasselbe Modell sowohl für die Datengenerierung (Vorwärtsmodell) als auch für das inverse Problem (Rekonstruktion) verwendet wird [168] (sog. „inverse crime“). Daher wird für die Analyse des entwickelten Rekonstruktionsalgorithmus in Abschnitt 4.4 eine „synthetisch“ generierte Radonmatrix verwendet, wohingegen bei der Rekonstruktion realer Messdaten (Kapitel 6) eine per Simulation erzeugte Systemmatrix benutzt wird.

Synthetische Erzeugung

Zur Bestimmung der Systemmatrix wird die Linearität der Radon-Transformation ausgenutzt. Die k -te Spalte $(R)_{(:,k)}$ der Radonmatrix lässt sich aus den Koeffizienten der Radon-Transformierten des k -ten Einheitsvektors ermitteln. Für Einheitsvektoren (bzw. -Bilder) bezüglich der Standardbasis ergeben sich entsprechend einzelne sinusförmigen Kurven für die Spalten der Matrix. Eine Linearkombination dieser Vektoren liefert durch Überlagerung der Sinuskurven das Sinogramm.

Anstatt die Radon-Matrix R bezüglich der Standardeinheitsbasis zu bestimmen, wird sie direkt in Form von $R \cdot D$, d.h. bezüglich des Dictionarys, für eine patchweise Repräsentation $\vec{\beta}^p$ des Koeffizientenvektors ermittelt. Dazu werden alle Atome von D einzeln in jedem Patchsegment Radon-transformiert, vgl. Abbildung 41 oben. Die einzelnen „Radon-Atome“ bestehen so aus einer gewichteten Überlagerung mehrerer Sinuskurven - auch negative Einträge sind möglich. Für die Generierung der Radon Daten wird die MATLAB eigene Funktion („radon.m“), welche ein Subpixel Verfahren [169, Seite 505 ff.] zur Berechnung anwendet, benutzt.

⁴In Teilen dieses Kapitels werden die Begriffe „Radonmatrix“ und „Systemmatrix“ synonym verwendet.

Um bei einem CSCT-System das zweidimensionale Intensitätsprofil des VOI $I_{\text{VOI}}(y, z)$, vgl. Unterabschnitt 3.3.1, berücksichtigen zu können, müssen die Einträge der Radon-Atome in Abhängigkeit des Drehwinkels γ korrigiert werden. Der Zusammenhang zwischen rotiertem und ortsfestem Bezugssystem $z' = z'(x, z, \gamma)$ ist gemäß Unterabschnitt 2.3.1 bekannt, sodass die Korrektur für einen festen Winkel γ durch eine eindimensionale Faltung von $I_{\text{VOI}}(y', z'(x, z, \gamma))$ mit der zum Rotationswinkel γ korrespondierenden Bildzeile in y' -Richtung durchgeführt werden kann. Diese korrigierten Radon Atome bauen spaltenweise die globale Systemmatrix R auf. Gleichzeitig kann die Analyse Matrix A durch eine gleichartige Einsortierung der Dictionary Atome im Ortsraum konstruiert werden, so dass sich das Bild \vec{x} aus den Koeffizienten der Radon-Atome über $\vec{x} = A \cdot \vec{\beta}$ berechnen lässt.

Erzeugung mittels Simulation

Die simulative Bestimmung der Systemmatrix geschieht analog zum zuvor beschriebenen Verfahren zur „synthetischen Erzeugung“ der Radonmatrix. Der wesentliche Unterschied besteht in

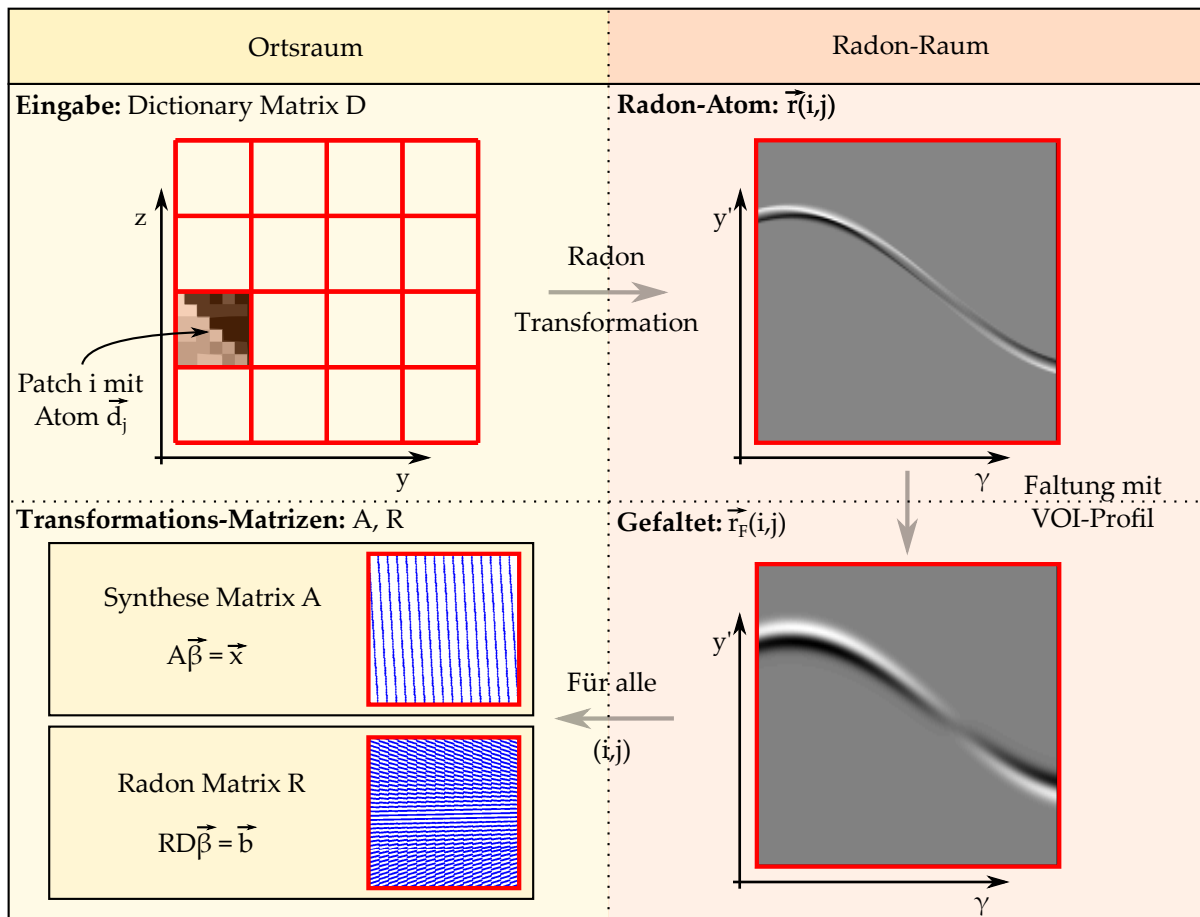


Abbildung 41: Schematische Darstellung der „synthetischen“ Radon Matrix Erzeugung. Die einzelnen Atome der Dictionary Matrix D werden patchweise in den Radon-Raum transformiert und mit dem ortsabhängigen VOI-Profil entlang der y -Achse gefaltet. Die gefalteten Radon-Atome bilden die Spalten der globalen Radon-Matrix R .

der Berechnung der Radon-Transformation. Diese wird hier mit Hilfe der in Unterabschnitt 3.2.5 beschriebenen Simulationsroutine zur Erzeugung von CSCT-Sinogrammen durchgeführt. Dazu wird die Phantom Matrix jeweils für alle Dictionary Atome der Matrix D und für alle Bildsegmente einzeln durch weiße Punktstreuer beschrieben. Die CSCT-Simulation liefert die zu den Dictionary Atomen gehörenden Sinogramme bzw. Radon-Atome, welche anschließend spaltenweise in die Matrix R einsortiert werden können. Analog wird ebenfalls die Synthesematrix A bestimmt. Durch die komplette Systemsimulation beinhaltet R automatisch alle Systemeigenschaften, sodass zusätzliche Korrekturen, wie zum Beispiel aufgrund der Intensitätsverteilung der VOI, nicht gesondert berücksichtigt werden müssen.

Die der Systemmatrix-Erzeugung zugrundeliegende Sichtweise erlaubt eine alternative Interpretation des Rekonstruktionsproblems aus Gleichung 4.32: Anstatt eine Lösung im Ortsraum durch ein bezüglich D komprimierbares Bild \vec{x} zu bestimmen, wird äquivalent eine Darstellung des beobachteten Sinogramms mit einer geringen Anzahl von Radon-Atomen gesucht. Es ist anzumerken, dass durch die speziellen Radon-Atome die Sinogramme durch dünn-besetzte Koeffizientenvektoren $\vec{\beta}$ dargestellt werden können, die Radon-Matrix selbst dafür jedoch nicht mehr gleichermaßen dünn-besetzt ist.

4.3.4. EDXRD-Scan („CBCT-Schätzer“)

Unter Kenntnis des CBCT-Bildes und des daraus bestimmten Dictionary D , Radon-Matrix R und Synthesematrix A , gilt es das a priori Wissen zu nutzen, um eine Abschätzung der Rekonstruktionsgüte des CSCT-Bildes in Abhängigkeit des Grades der Unterabtastung κ zu erlangen. Bei der Wahl des Akquisitionsschemas eines CSCT-Systems in Nadelstrahlanordnung wird, in Anlehnung an typische Compressed-Sensing Aufnahmeverfahren (vgl. beispielsweise das Ein-Pixel Kameraprinzip[170]), eine zufällige Abtastung des Sinogramms Ortsraum gewählt: Entlang der Energieskala wird angenommen, dass alle Energiekanäle parallel Daten akquirieren. Bei der Messung des Sinogramms im Ortsraum werden äquidistante Winkelschritte $\gamma_i \in \{0^\circ, \dots, 180^\circ\}$ mit $i \in \{1, \dots, n_{\delta\gamma}\}$ verwendet und die Messpunkte entlang der y -Achse entsprechend κ zufällig verteilt. Die Anzahl aller Translationsschritte in y -Richtung, d.h. bei einer kompletten Aufnahme, werde mit $n_{\delta y}$ bezeichnet, die Anzahl der gesammelten Datenpunkte im Sinogramm ($\kappa = 0$) entspricht also $n_m = n_{\delta\gamma} \cdot n_{\delta y}$. Bei einem komprimierten Scan werden entsprechend lediglich $(1 - \kappa) \cdot n_m$ Datenpunkte gemessen.

Um Aussagen über die Anzahl der benötigten Messungen in Abhängigkeit eines gegebenen Qualitätskriteriums treffen zu können, wird der CBCT-Datensatz zu dessen Abschätzung benutzt. Durch die Vorwärtsprojektion des CT-Bildes \vec{x}_{CB} wird ein kompletter Transmissionsscan über die Beziehung $\vec{b}_{CB} = R \cdot \vec{x}_{CB} + \vec{e}$ imitiert. Dabei entspricht \vec{e} wieder einem Rausch-Vektor, vgl. Abschnitt 4.2. Da die akquirierten Daten Poisson verteilt sind, ist es sinnvoll, das Rauschlevel des CSCT-Sinogramms $N(\gamma, y, E)$ durch dessen höchsten Eintrag $N_{\max} = \max[N(\gamma, y, E)]$ zu charakterisieren und entsprechend $N_\epsilon = N_{\max}$ zu wählen. Der imitierte Messvektor kann entsprechend der Parameter N_ϵ und κ durch

$$N_{CB,\epsilon}(\kappa) = \text{poisson} \left(\frac{N_{CB}(\kappa)}{\max(N_{CB}(\kappa))} \cdot N_\epsilon \right) \rightarrow \vec{b}_{CB,\epsilon}(\kappa) \quad (4.36)$$

beschrieben werden. Dabei ist mit $\vec{b}_{CB,\epsilon}(\kappa)$ der Messvektor gemeint, bei dem zufällig $\kappa \cdot n_m$ Einträge entfernt wurden, um die Unterabtastung des Sinogramms zu beschreiben. Formal ge-

schiebt dies durch Verwendung einer sog. „Maskierungs-Matrix“ M_κ , mit der der dünn-besetzte Messvektor via $M_\kappa \cdot \vec{b}_{CB,\epsilon}$ und die beschreibende Systemmatrix durch $M_\kappa \cdot R$ berechnet werden kann. Die durch den Datenterm $\|M_\kappa \cdot R \cdot \vec{\beta}_{CB} - M_\kappa \cdot \vec{b}_{CB,\epsilon}\|_2^2$ des resultierenden Minimierungsproblems entstehende Beschreibung lässt sich aus Sicht der digitalen Bildverarbeitung als Sinogramm-Inpainting Problem bzw. als Impulsrauschreduzierung im Sinogramm-Raum interpretieren.

Durch die Inversion des Problems unter Verwendung des modifizierten FISTA Rekonstruktionsalgorithmus (vgl. Unterabschnitt 4.3.5) bezüglich des erlernten Dictionarys D lassen sich Approximationen $\vec{x}'_{CB}(\kappa, N_\epsilon)$ bestimmen. Damit kann die Rekonstruktionsgüte durch $\zeta_{CB}(\kappa, N_\epsilon) = \|\vec{x}_{CB} - \vec{x}'_{CB}(\kappa, N_\epsilon)\|_2 / \|\vec{x}_{CB}\|$ in Abhängigkeit des Rauschlevels ϵ und dem Grad der Komprimierung κ ermittelt werden. Dieser Ablauf ist schematisch in Abbildung 42 dargestellt. Auf diese Weise lässt sich das für den CBCT-Scan benötigte κ in Abhängigkeit des gegebenen Rauschlevels für eine maximal zu tolerierende Abweichung ζ abschätzen. Untersuchungen zu dieser Heuristik sind in Unterabschnitt 4.4.3 beschrieben.

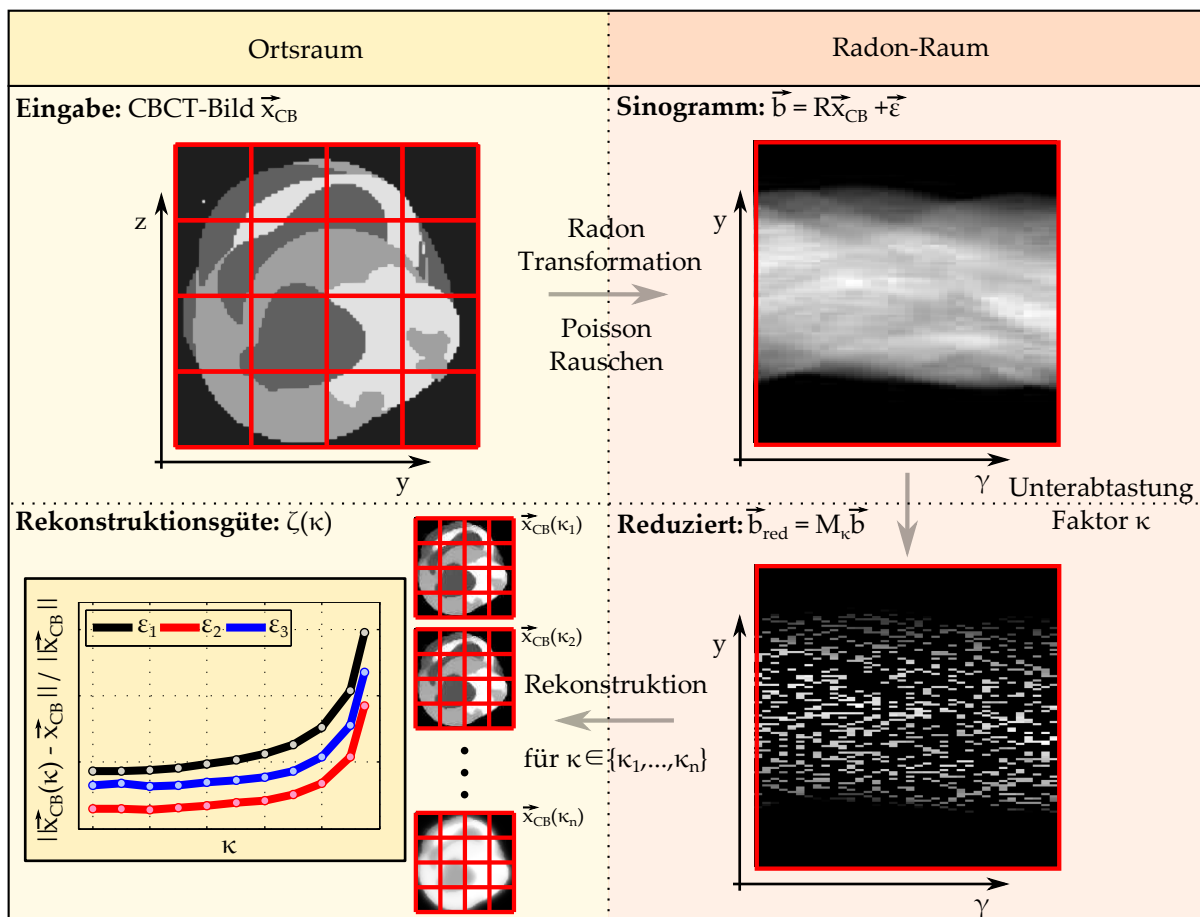


Abbildung 42: Schematische Darstellung zur Abschätzung der benötigten Anzahl an Messungen bei gegebenem Rauschlevel.

4.3.5. CSCT-Rekonstruktionsprozedur

Der beschriebene Rekonstruktionsalgorithmus basiert auf der expliziten Kenntnis des Abtastmusters des CSCT-Sinogramms, d.h. der Maskierungs-Matrix M_k . Ist das zum zweidimensionalen CSCT-Schnitt korrespondierende CBCT-Schichtbild gegeben, kann zunächst gemäß Unterabschnitt 4.3.1 ein Dictionary D erlernt werden. Mit diesen Informationen lässt sich entsprechend der gewählten Patch-Segmentierung die Radon-Matrix R bzw. Synthese-Matrix A für die Rekonstruktion berechnen. Optional kann die angepasste Wasserscheiden-Segmentierung (vgl. Unterabschnitt 4.3.2) auf \vec{x}_{CB} angewendet werden, sodass eine erweiterte Systemmatrix mit neuem Messvektor $\vec{b}_{CS}(E)$ gegeben ist. Es sei explizit darauf hingewiesen, dass es sich bei den CSCT-Messdaten um einen dreidimensionalen Datensatz handelt, d.h. $\vec{b}_{CS}(E) \in \mathbb{R}^{n_m \times n_e}$. Alle bisher beschriebenen Matrix-Vektor Operationen werden damit in Matrix-Matrix Multiplikationen umgewandelt. Dies entspricht zunächst einer entlang der Energieachse „kanalweisen“ Betrachtung des Problems. Zur Berücksichtigung der Korrelationen zwischen Orts- und Impulsübertragskoordinaten sowie zur verstärkten Forcierung der dünn-Besetztheit der Lösung wird eine modifizierte Variante des FISTA Algorithmus verwendet. Dabei wird der FISTA Algorithmus (vgl. Algorithmus 4.3) zur Lösung von Gleichung 4.32 derart modifiziert, dass zwischen zwei Iterationsschritten weitere Operationen auf die Lösung angewendet werden. Diese Vorgehensweise ist vereinfacht mittels Pseudocode in Algorithmus 4.6 skizziert.

Algorithmus 4.6: CSCT-Rekonstruktion, Pseudocode

```

1 % Eingaben
2 CBCT-Bild  $\vec{x}_{CB}$ 
3 CSCT-Sinogramm  $\vec{b}_{CS}(E)$ 
4 Anzahl Iterationen  $\nu_{max}$ 
5 Patchweise Ziel-Sparsity  $n_k^p$ 
6
7 % Initialisierung
8  $\vec{\beta}_{CS}^0(E) = \vec{0}$ 
9
10 % Code
11
12  $D_{opt} = ksvd(\vec{x}_{CB})$ 
13  $[A, R] = generateRadon(D_{opt})$ 
14  $[R, \vec{b}_{CS}(E)] = imSegmentation(\vec{x}_{CB})$ 
15 for  $\nu = 1 : \nu_{max}$ 
16      $\vec{\beta}_{CS}^\nu(E) = FISTAstep(A, R, \vec{b}_{CS}(E), \vec{\beta}_{CS}^{\nu-1}(E))$ 
17      $\vec{x}_{CS}^\nu(E) = A \cdot \vec{\beta}_{CS}^\nu(E)$ 
18      $\vec{x}_{CS}^\nu(E) = imProcessing3d(\vec{x}_{CS}^\nu(E))$ 
19      $\vec{x}_{CS}^\nu(E) = thresh(\vec{x}_{CS}^\nu(E))$ 
20      $\vec{\beta}_{CS}^\nu(E) = omp(\vec{x}_{CS}^\nu(E), n_k^p)$ 
21 end
22
23 % Ausgabe
24 Rekonstruiertes CSCT-Bild  $\vec{x}'_{CS}(E) = A \cdot \vec{\beta}_{CS}^{\nu_{max}}(E)$ 

```

Nach der Initialisierung der Variablen wird zu Beginn zunächst ein gewöhnlicher FISTA-Schritt (*FISTAstep*) im Dictionary Raum durchgeführt. Dieser liefert einen dünn-besetzten Koeffizientenvektor $\vec{\beta}_{CS}^1$, welcher anschließend mit der Synthese-Matrix in den Orts-/Energieraum überführt

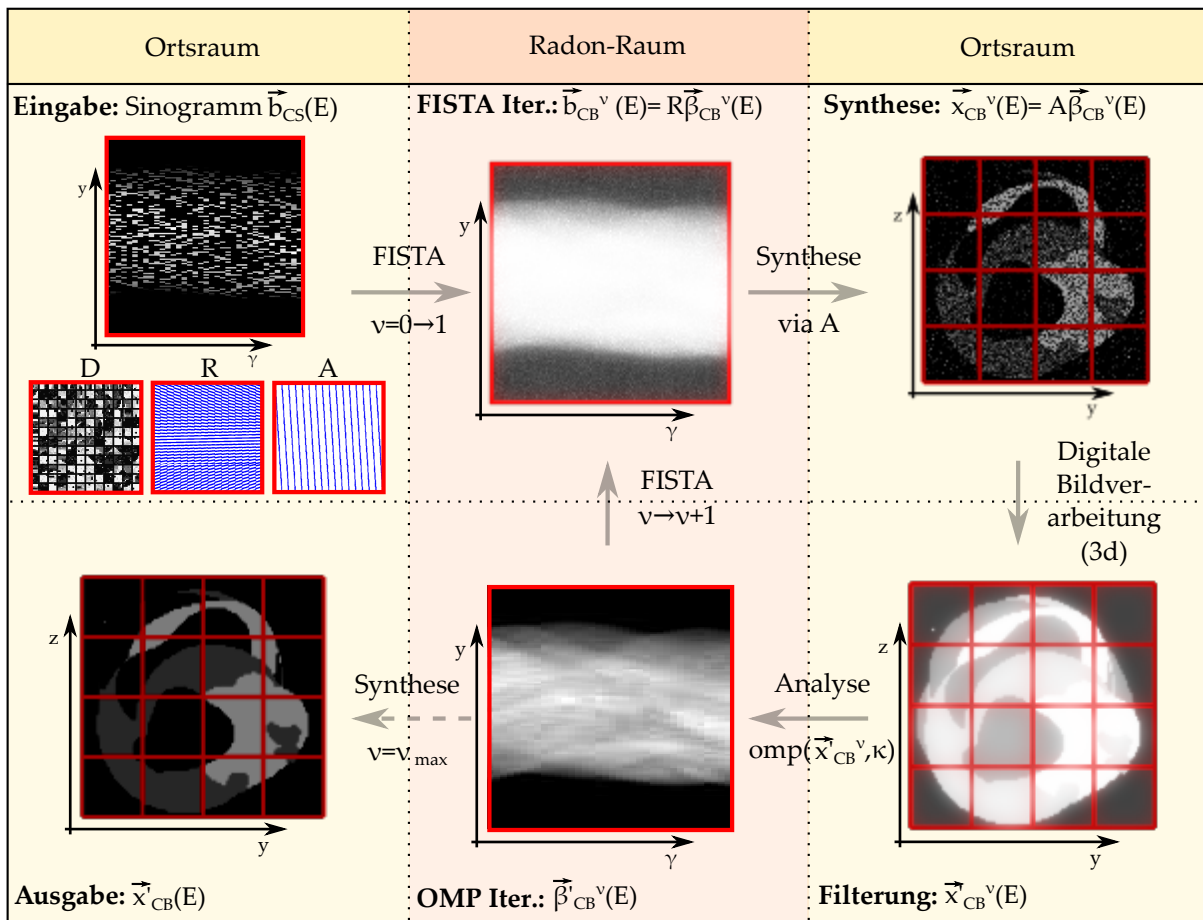


Abbildung 43: Vereinfachte Darstellung der iterativen Rekonstruktionsroutine: Das dünn-besetzte Eingabesinogramm \vec{b}_{CS} wird bezüglich eines erlernten Dictionarys D mit Hilfe des FISTA-Algorithmus rekonstruiert. In jeder Iteration wird der aktuelle Koeffizientenvektor $\vec{\beta}^v$ via Synthesematrix A in den Ortsraum überführt. Dort werden Bildverarbeitungsschritte ausgeführt und das Bild anschließend über den OMP Algorithmus dünn-besetzt zurücktransformiert.

wird. Das resultierende approximierte Lösungsbild \vec{x}_{CS}^1 lässt sich mit Methoden der digitalen Bildverarbeitung manipulieren. Abhängig von weiterem Vorwissen über das Objekt können spezielle Filter oder Detektionsalgorithmen zum Einsatz kommen. Typischerweise werden Filter zur Stabilisierung der Lösung eingesetzt. So wird standardmäßig ein dreidimensionaler Gaußscher Tiefpassfilter mit vergleichsweise geringer Standardabweichung ($\sigma < 0.3$ Voxel) in Kombination mit einem 3d-Medianfilter mit 3er Nachbarschaftsrelation verwendet. Durch die starke Lokalisierung der Filter (geringe Kernelbreite) soll eine signifikante Verschlechterung der Energie- / Ortsauflösung verhindert werden. Jedoch ist aufgrund der Kollimator bedingten Winkelunschärfe bei einem CSCT-System (hier ca. 6 %, vgl. Unterabschnitt 3.3.2) die Linienunschärfe in der spektralen Dimension bestimmt. Im Vergleich zu möglichen hohen Kontrasten im Ortsraum (scharfe Kanten) müssen die Spektren ein hohes Maß an Glattheit aufweisen. Daher wird zusätzlich für jedes Pixel im Ortsraum eine eindimensionale Savitzky-Golay Filterung[171] entlang der spektralen Achse durchgeführt. Abhängig von der verwendeten Energiekanalanzahl kann diese Filterung mit entsprechend breiterem Filterkern (z.B. ≈ 10 Kanäle) durchgeführt werden. Die gesamte Bildverar-

beitungsprozedur ist im Pseudocode des Rekonstruktionsalgorithmus als *imProcessing3d* Schritt zusammengefasst.

Nach dem Filter-Prozess wird im *thresh* Schritt für jedes Voxel die zulässige Wertemenge geprüft und angepasst: Alle Werte kleiner einer definierten Untergrenze N_{\min} (z.B. $N_{\min} = 0$ als Nicht-negativitätsbedingung) und größer einer gegebenen Obergrenze N_{\max} werden auf diese definierten Grenzwerte zurückgesetzt. Das resultierende Bild der aktuellen Iteration muss für die nächste FISTA Iteration in den Dictionary Raum überführt werden. Zur Forcierung einer dünn-besetzten Repräsentation von $\vec{\beta}_{\text{CS}}^1$ wird aus \vec{x}_{CS}^1 unter Verwendung des OMP Algorithmus patchweise ein Koeffizientenvektor mit minimaler Sparsity n_k^p analysiert (*omp* Schritt). Durch das Training des Dictionarys D ist die zu erwartende Approximationsgüte in Abhängigkeit der Ziel-Sparsity bekannt und n_k^p kann entsprechend gewählt werden. Dieser komplette Vorgang wird für eine festgelegte Anzahl an Iterationen v_{\max} durchgeführt. Um die Prozedur zu veranschaulichen, ist in Abbildung 43 eine vereinfachte Übersicht des Rekonstruktionsprozesses gezeigt.

Wie bei Patch-basierten Verfahren zur Kompression oder Rekonstruktion treten auch hier bei einem hohen Grad an Sparsity aufgrund der quadratischen Parkettierung sog. Block-Artefakte auf, sodass die Übergänge zwischen benachbarten Blöcken sichtbar werden. Gängige Verfahren zur Verringerung dieses Effekts basieren auf der mehrfachen Durchführung einer Rekonstruktion unter Verwendung verschobener Patch Gitter[172]. Prinzipiell lassen sich w^2 unterschiedliche Varianten für das Patch-Gitter wählen, wobei an den Rändern mit periodischen Randbedingungen gearbeitet werden kann, um die Anzahl aller Patches konstant zu halten. Diese unterschiedlichen Realisierungen des Patch Gitters führen zu unterschiedlichen Rekonstruktionsproblemen, welche unabhängig voneinander gelöst werden können. Anschließend werden die so gewonnenen Rekonstruktionen durch Mittelwertbildung verrechnet. Dabei entsteht eine kantenfreie Rekonstruktion, deren Güte signifikant höher als die einer Einzelgitter-Rekonstruktion ist, vgl. Unterabschnitt 4.4.3.

4.3.6. Overlay

Dieser Abschnitt dient der Erklärung der Visualisierung von Rekonstruktionsergebnissen. Nach der Rekonstruktion des CSCT-Datensatzes stehen mit I_{CBCT} und I_{CSCT} zwei dreidimensionale Bilder zur Verfügung. Der Übersichtlichkeit halber wird bei der CBCT-Rekonstruktion nur das zur CSCT-Rekonstruktion korrespondierende Schichtbild betrachtet, der Datensatz der Streurekonstruktion bleibt durch die spektrale Komponente bedingt dreidimensional. Während die CBCT-Bildschicht lediglich in Graustufen darstellbar ist, lässt sich die Energieskala des CSCT-Bildes in eine (echte) Farbskala überführen. So kann beispielsweise für eine selektierte Energie (oder eine Linearkombination mehrerer Energien), welche in charakteristischer Art zu einem Material korrespondiert, eine Farbe definiert werden.

Zur Überlagerung der beiden Bilder wird das CBCT in voller Auflösung verwendet und das CSCT-Bild entsprechend über eine kubische Interpolation auf diese Dimension hochskaliert. Die Kombinierung beider Bilder geschieht durch eine transparente Überlagerung des CBCT-Graustufenbildes mit dem CSCT-Vollfarbenbild bezüglich eines JET-Farbschemas. Diese Art der Darstellung ist exemplarisch in Abbildung 44 visualisiert. Es wird die hohe Ortsauflösung des konventionellen CT Bildes mit der materialspezifischen Farbdarstellung der Streudaten kombiniert. Es ist anzumerken, dass je nach Anwendung die Farbkodierung des Streudatenbildes auch Information über Bragg-Peak Verschiebungen aufgrund von Phasenumwandlungen, Textur, thermischer

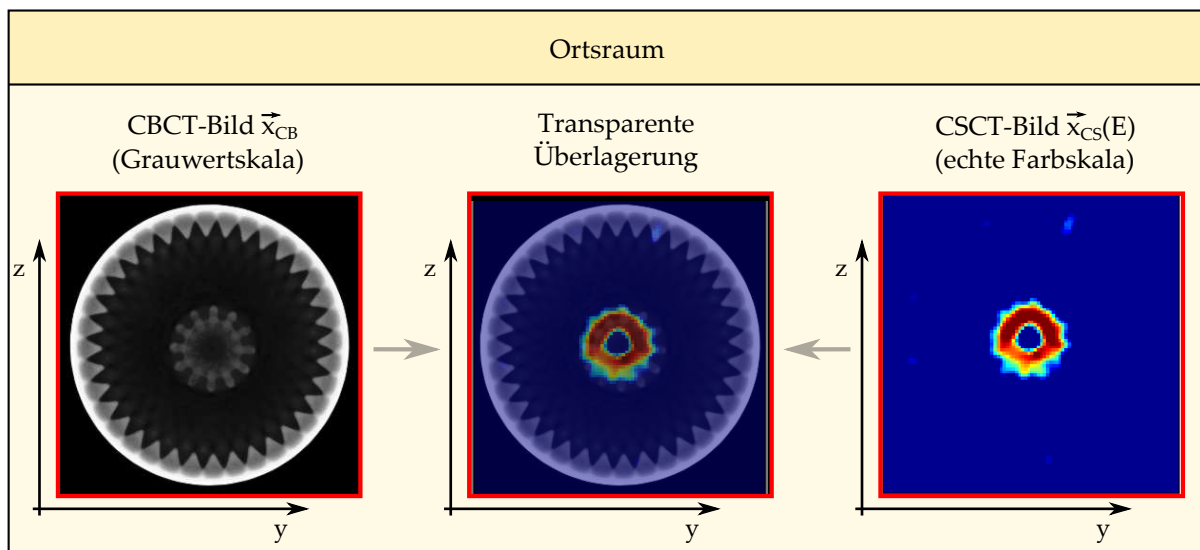


Abbildung 44: Kombinierte CBCT-CSCT-Darstellung durch transparente Überlagerung beider Bilder. Während der CBCT-Datensatz ein Grauwertbild liefert (links), entspricht das CSCT-Bild einem echten Farbbild. Die Farben korrespondieren dabei zu unterschiedlichen Energiekanälen bzw. Materialien. Eine transparente Überlagerung (mittig) ermöglicht die kombinierte Darstellung des hochauflösenden CBCT-Bildes mit der materialelektiven CSCT-Darstellung.

Probenausdehnung, etc. enthalten kann.

4.4. Untersuchung zur Rekonstruktionsperformance

Zur Untersuchung der Performance des Rekonstruktionsalgorithmus bezüglich der Rekonstruktionsparameter, der maximal erzielbaren Komprimierung sowie der Auswirkung von Schwächung und Probentextur wurden Studien mit simulierten Daten durchgeführt. Dazu wurden Phantome zufällig, in Abhängigkeit verschiedener Komplexitätsgrade, generiert und ein zugehöriges Transmissions- bzw. Streudatensinogramm simuliert. Diese Vorgehensweise erlaubt es, mittlere Rekonstruktionsgüten für eine komplette Klasse von Phantomen zu bestimmen und die Rekonstruktionsperformance im Hinblick auf reale Daten realistisch abzuschätzen.

4.4.1. Generierung künstlicher Daten

Die für die Performance-Studien benötigten Daten zur Rekonstruktion wurden in zwei Schritten generiert. Zunächst wurde für die Definition der Materialmatrix des Phantoms eine parameterabhängige Verteilung erstellt (Phantom Erzeugung). Diese Materialverteilung wird anschließend genutzt, um mit der Simulationsroutine aus Unterabschnitt 3.2.5 die benötigten Transmissions- und Streusinogramme zu erstellen.

Tabelle 3: Übersicht der zur Phantom Generierung verwendeten Materialdatenbank. Dichten können Festkörperdichten oder Schüttdichten darstellen, die Materialbezeichnungen sind im Akronymverzeichnis hinterlegt.

Material	Aluminium	Glas	Graphit	Luft	NaCl	PA6	PE	PEEK
Dichte / g cm^{-3}	2,70	2,20	2,26	0,00	2,17	1,14	0,95	1,32
Kristallin?	ja	nein	ja	nein	ja	ja	ja	nein
Material	PETG	PMMA	POM	PP	PTFE	PVC	SiC	SiO ₂
Dichte / g cm^{-3}	1,38	1,19	1,41	0,91	2,20	1,39	0,68	2,65
Kristallin?	ja	ja	nein	ja	ja	ja	ja	ja

Zufällige Phantom Erzeugung

Die zufällig generierten Matrizen $M_P(y, z)$ zur Phantombeschreibung setzen sich durch Überlagerung einer vorgegebenen Anzahl n_{obj} unterschiedlicher, nach ihrer Größe absteigend sortierten Phantom-Formen mit homogener Materialverteilung $M_{PF,i}(y, z)$ mit $i \in \{1, \dots, n_{\text{obj}}\}$ zusammen. Dabei ist jeder Form $M_{PF,i}(y, z)$ ein Material zugeordnet: Abhängig von der Anzahl der zu verwendenden Materialien n_{mat} werden die Materialzuordnungen zufällig bestimmt. Die $M_{PF,i}(y, z)$ werden aus sog. Basisformen $M_{PF0,i}(y, z)$ erzeugt, indem die Basisformen auf eine vorgegebene Größe $n'_y \times n'_z$ skaliert und zufällig in der leeren i -ten Phantom-Form Matrix $M_{PF,i}(y, z)$ platziert werden.

Die Basisformen werden durch geschlossene Polygone beschrieben, deren n_{pkt} Ecken nach folgendem Schema generiert werden: Für $j \in \{1, \dots, n_{\text{pkt}}\}$ seien Polarkoordinaten gemäß

$$r_j = r_0 + \sum_{i=1}^{n_{\text{grd}}} \text{rand}[0, 1] \cdot \sin(i \cdot \varphi_j) \quad (4.37)$$

$$\varphi_j = \frac{2\pi}{n_{\text{pkt}} - 1} \cdot (j - 1) \quad (4.38)$$

gegeben. Diese Koordinaten werden normiert ($r_j / \max(r_j), \varphi_j$) und in ein kartesisches System überführt, sodass $M_{PF0,i}(y, z)$ durch das resultierende ausgefüllte Polygon definiert ist. Dabei wird durch n_{grd} der Abweichungsgrad der Form von einem Kreis mit Radius r_0 angegeben. Für höhere Ordnungen wird dieser Kreis in eine Form mit „größerer Welligkeit“ überführt. Das Verhältnis n_{grd}/r_0 charakterisiert die Form der auftretenden „Spitzen“ und hat damit Einfluss auf die im Bild vorkommenden Ortsfrequenzen.

Für die zufällige Phantomerzeugung dienen die Parameter n_{obj} und n_{mat} zur Steuerung der Komplexität. Für die in dieser Arbeit verwendete Bild-Auflösung von $n_y = n_z = 96$ wird $n_{\text{pkt}} = 100$ und $r_0 = \text{rand}(1, \dots, 10)$ festgesetzt. Um über n_{obj} einen Einfluss auf die im Bild auftretenden Ortsfrequenzen zu erlangen, wird $n_{\text{grd}} = \text{rand}(1, \dots, n_{\text{obj}})$ gewählt⁵. Die komplette Materialdatenbank besteht aus 16 Materialien geringer Dichte(vgl. Tabelle 3) und beinhaltet Kunststoffe und Pulver in kristalliner sowie amorpher Phase. Diese Materialien werden üblicherweise in Phantomen für CSCT-Systeme eingesetzt[20][173][174]. Eine beispielhafte Darstellung von generierten Materialverteilungen in Abhängigkeit von n_{obj} und n_{mat} ist in Abbildung 45 gezeigt.

⁵Mit $\text{rand}(1, \dots, n)$ werden gleichverteilte ganze Zufallszahlen aus dem Bereich $1, \dots, n$ bezeichnet.

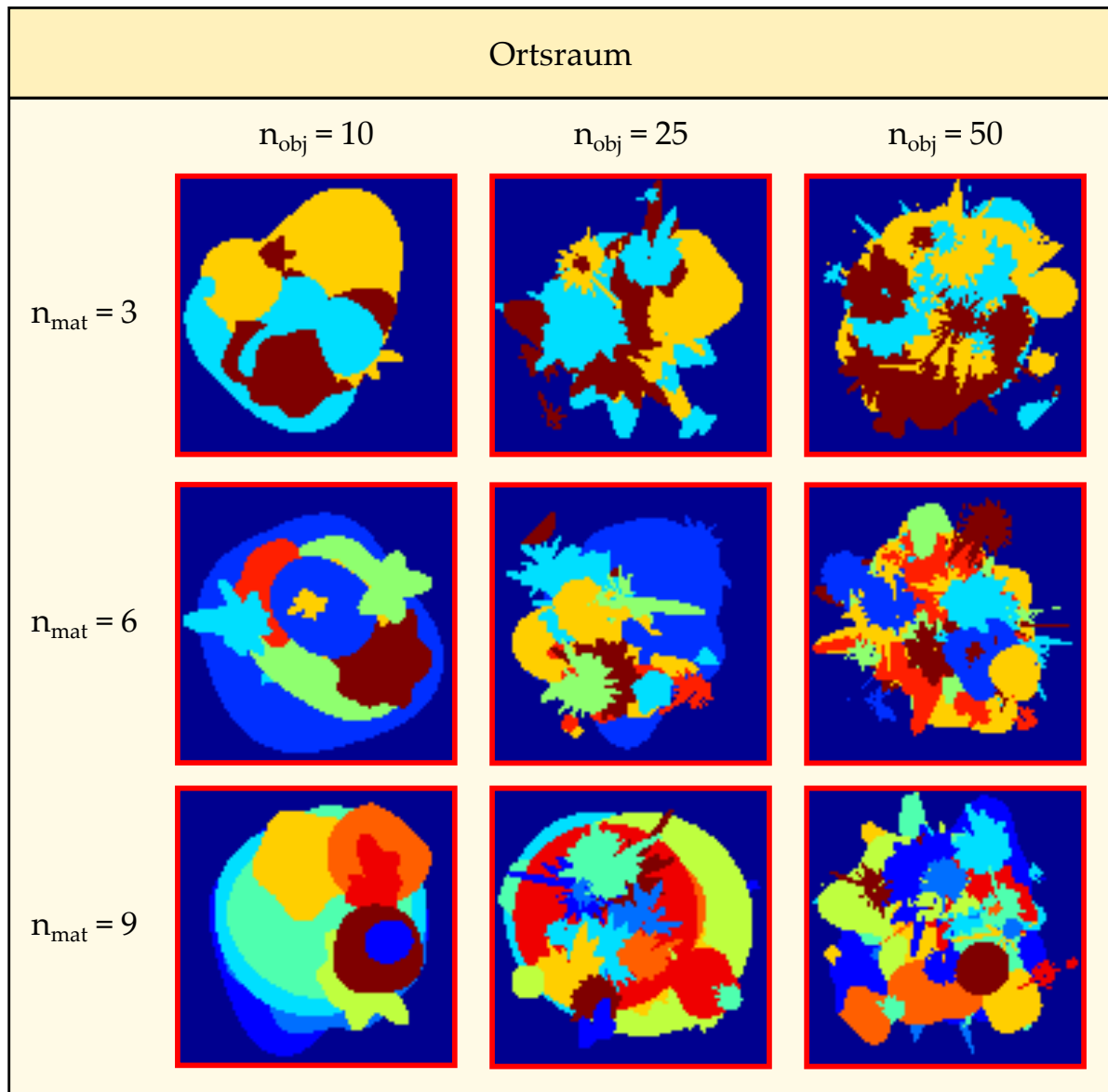


Abbildung 45: Darstellung von zufällig generierten Materialverteilungen zur Phantom Simulation in Abhängigkeit der Objekt- n_{obj} und Materialanzahl n_{mat} . Die Farben kennzeichnen die unterschiedlichen Materialien.

Sinogramm Simulation

Im ersten Schritt wird ein Phantom mit $n_y \cdot n_z = 96^2$ Pixeln bei gegebenen Parametern n_{obj} bzw. n_{mat} gemäß des oben beschriebenen Verfahrens generiert. Abhängig von den gewählten Parametern werden die Phantome einer sog. Phantomklasse zugeordnet. Phantomklasse 1 ist durch $n_{\text{obj}} = 10$ bzw. $n_{\text{mat}} = 3$, Phantomklasse 2 durch $n_{\text{obj}} = 20$ bzw. $n_{\text{mat}} = 5$ und Phantomklasse 3 durch $n_{\text{obj}} = 30$ bzw. $n_{\text{mat}} = 7$ definiert. Die Materialien des Phantoms werden zufällig entsprechend Tabelle 3 ausgewählt. Anschließend werden vier verschiedene Sinogramm-Simulationen mit jeweils $n_{\delta y} = 139$ Translationsschritten durchgeführt: Zunächst wird ein Transmissionssinogramm $\vec{b}_{\text{CB,HQ}}(E)$ und ein normiertes Streusinogramm $\vec{b}_{\text{CS,HQ}}(E)$ bei einer geringen Winkelschrittweite

von $\delta\gamma_{\text{HQ}} = 1,5^\circ$ („High Quality“) berechnet und zusätzlich ein Streusinogramm $\vec{b}'_{\text{CS,HQ}}(E)$ ohne Berücksichtigung der Strahlungsschwächung in der Probe bestimmt. Zusätzlich wird ein Streusinogramm $\vec{b}_{\text{CS,LQ}}(E)$ unter Berücksichtigung der Probenschwächung bei einer größeren Winkelschrittweite von $\delta\gamma_{\text{LQ}} = 5^\circ$ („Low Quality“) simuliert. Bei gegebenem Energiebereich - hier wird $E = 70 - 100 \text{ keV}$ verwendet - wird aus $\vec{b}_{\text{CB,HQ}}(E)$ der zugehörige Projektionsdatensatz $\vec{b}_{\text{CB,HQ}}$ durch Summation über die, dem Energiebereich zugehörigen Energiekanäle, erzeugt.

Im Anschluss an die Sinogramm Simulation wird eine gewöhnliche FBP Rekonstruktion energiekanalweise mit nicht verrauschten Daten durchgeführt, um Referenzwerte für eine „optimale“ Rekonstruktion zu erhalten. Somit liefert die rauschfreie FBP Rekonstruktion der CSCT-Simulation ohne Berücksichtigung der Probenschwächung $\vec{b}'_{\text{CS,HQ}}(E)$ ein CSCT-Referenzbild $\vec{x}'_{\text{CS},0}(E)$. Die relative Abweichung der idealen Rekonstruktion $\vec{x}'_{\text{CS},0}(E)$ vom wahren Eingabebild $\vec{x}_{\text{CS,GT}}(E)$ („ground truth“) wird bezüglich der euklidischen Norm als $\zeta_{\text{CS,GT}}$ definiert. Sie beschreibt in erster Linie die Abweichung der Rekonstruktion aufgrund der Modellierung. Analog lässt sich aus $\vec{b}_{\text{CS,HQ}}(E)$ das CSCT-Referenzbild $\vec{x}_{\text{CS},0}(E)$ unter Berücksichtigung der Probenschwächung bestimmen. Die Abweichung dieses Bildes von $\vec{x}'_{\text{CS},0}(E)$ quantifiziert den Einfluss der limitierten Schwächungskorrektur. Die Rekonstruktion der rauschfreien Transmissions-Projektionsdaten $\vec{b}_{\text{CB,HQ}}$ liefert entsprechend die Referenz $\vec{x}_{\text{CB},0}$. Dieses Transmissions-Schichtbild wird im nächsten Schritt verwendet, um das Dictionary D für die FISTA basierte Rekonstruktion zu erlernen. Für die Simulationsstudien des Rekonstruktionsalgorithmus werden anschließend die Daten der LQ-Sinogramme verwendet.

4.4.2. Studie zur Rekonstruktionsperformance

Zur Untersuchung der Rekonstruktionsperformance werden Phantome zufällig - gemäß der im vorigen Abschnitt definierten Phantomklassen - generiert. Pro Klasse werden 20 Phantom-Konfigurationen simuliert. Das Sinogramm $\vec{b}_{\text{CS,LQ}}(E)$ und das - gemäß des in Unterabschnitt 4.3.4 beschriebenen CBCT-Schätzers definierte - LQ-Sinogramm werden in einem definierten Energiebereich ($E = 70 - 100 \text{ keV}$, 378 Energiekanäle) betrachtet. Die Sinogramme werden bei drei unterschiedlichen Poisson-Rauschlevels, entsprechend der maximalen Anzahl der detektierten Quanten (Summe über alle Energiekanäle im gewählten Energiebereichs), für 10^3 , 10^4 und 10^5 Quanten simuliert. Anschließend werden FISTA Rekonstruktionen mit den Standardparametern unter Verwendung verschiedener Sparsity Parameter $\kappa \in \{0; 0, 2; 0, 4; 0, 6; 0, 8; 0, 9\}$ durchgeführt. Dabei ist anzumerken, dass sich die Werte von κ auf die LQ-Simulation mit lediglich 36 Winkelschritten beziehen⁶. Die FISTA Rekonstruktionen werden mit dem aus der FBP Rekonstruktion $\vec{x}_{\text{CB},0}$ erlernten Dictionary D berechnet. Eine Segmentierung wird bei der Rekonstruktion nicht durchgeführt. Es resultieren die Rekonstruktionen $\vec{x}_{\text{CB}}(\kappa, \epsilon)$ des Schätzers und der LQ-CSCT Simulation $\vec{x}_{\text{CS}}(\kappa, \epsilon, E)$. Der Ablauf zur Generierung der Sinogramme und Rekonstruktionen ist zur Übersicht in Abbildung 46 dargestellt.

Zur Quantifizierung der Rekonstruktionsgüte werden die relativen Abweichungen der vektorisierten rekonstruierten dreidimensionalen Bilder bezüglich der euklidischen Norm bestimmt. An-

⁶Die Anzahl der benötigten Messungen bei $\kappa = 0, 8$ im LQ-Scan ist verglichen mit der HQ-Rekonstruktion ca. um den Faktor 10 geringer.

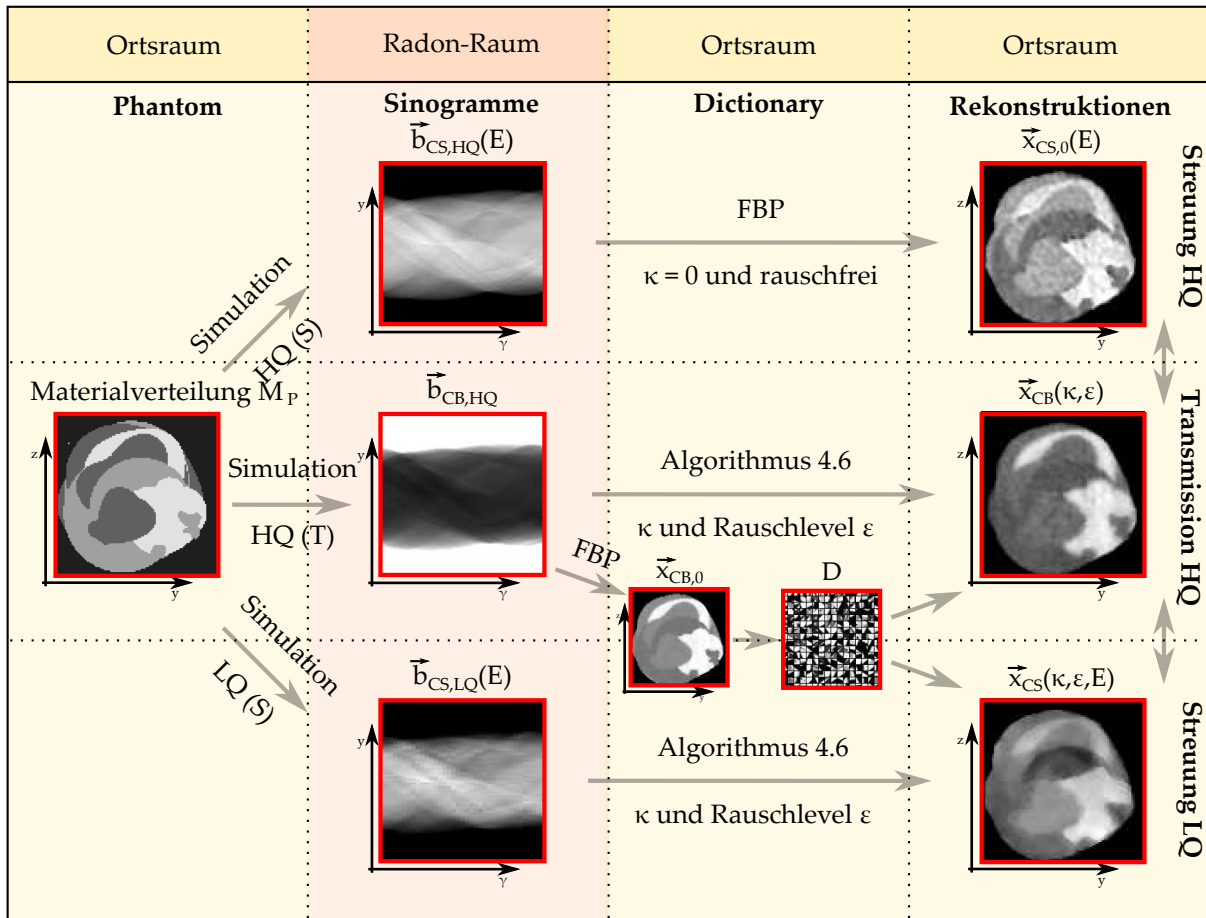


Abbildung 46: Darstellung des Ablaufs der simulativen Studien zur Erfassung der Rekonstruktionsperformance in Abhängigkeit verschiedener Parameter.

schließlich wird

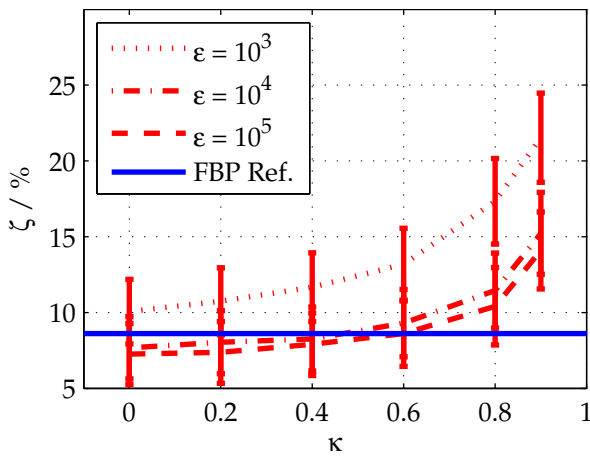
$$\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon) = \frac{\|\vec{x}_{CS}(\kappa, \epsilon, E) - \vec{x}_{GT}(E)\|_2}{\|\vec{x}_{GT}(E)\|_2} - \frac{\|\vec{x}'_{CS,0}(E) - \vec{x}_{GT}(E)\|_2}{\|\vec{x}_{GT}(E)\|_2} \quad (4.39)$$

als Abweichung der CSCT-Rekonstruktionsgüte \vec{x}_{CS} im Bezug auf die „ground truth“ Lösung \vec{x}_{GT} von der Rekonstruktionsgüte der HQ-FBP Rekonstruktion $\vec{x}'_{CS,0}$ (keine Schwächung) definiert. Analog wird ebenfalls $\zeta_{CS,0}$ als Abweichung zwischen der FBP Rekonstruktionsgüte (mit Schwächung) und dem HQ-Referenzbild $\vec{x}'_{CS,0}(E)$ (ohne Schwächung) definiert. $\zeta_{CS,0}$ beschreibt Abweichungen von der idealen Lösung, welche durch die Absorptionskorrektur, also die Sinogramm Normierung, zustande kommen. Die Differenz zwischen der LQ Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ und der Güte der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\zeta_{CS,0}$ wird mit $\zeta_{CS,\Delta}(\kappa, \epsilon)$ bezeichnet. Für die CBCT-Rekonstruktionen lässt sich entsprechend mit

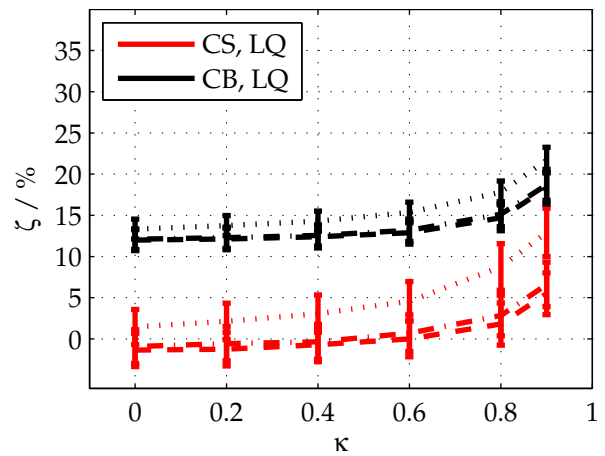
$$\zeta_{CB}(\kappa, \epsilon) = \frac{\|\vec{x}_{CB}(\kappa, \epsilon) - \vec{x}_{CB,0}\|_2}{\|\vec{x}_{CB,0}\|_2} \quad (4.40)$$

die Auswirkung von κ und ϵ auf die Bildqualität der Rekonstruktion quantifizieren.

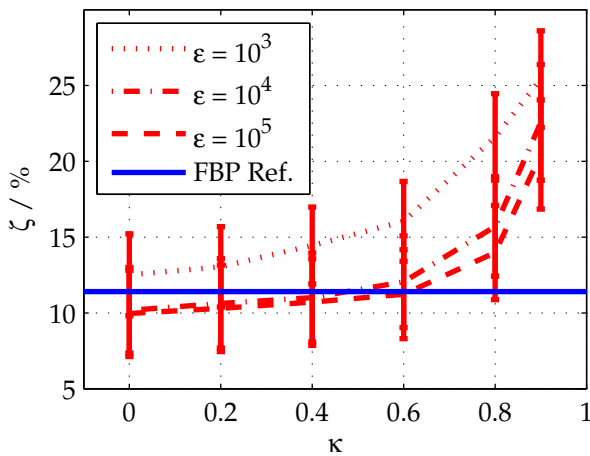
Die Ergebnisse der Studie sind in Abbildung 47 für alle drei Phantomklassen zusammengefasst. Für die Rekonstruktionen mit 10^4 bzw. 10^5 simulierten Photonen, lassen sich bei allen Phantomklassen und Rekonstruktionsgüten ζ deutlich plateauartige Bereiche bis zu einer Grenze κ_{\max} identifizieren. Insbesondere weisen alle Gütekurven bei diesen beiden Rauschleveln nur einen geringen Unterschied auf. Im Vergleich dazu wirkt sich eine Verringerung auf 10^3 Photonen sprunghaft auf die Qualität der Rekonstruktionen aus. Dieser Sprung kann ebenfalls in der CBCT-Schätzkurve (schwarz) beobachtet werden. Entsprechend lässt sich über $\zeta_{\text{CB}}(\kappa, \epsilon)$ sowohl eine Abschätzung für die benötigte Anzahl an CSCT-Messungen (κ_{\max}) als auch für das benötigte Rauschlevel (d.h. die Integrationszeit) ϵ_{\min} für die untersuchten Phantomklassen erhalten. Interessanterweise ist die Güte der LQ-Rekonstruktion mittels FISTA Algorithmus im Falle der mittleren und geringen Rauschlevel bei bis zu $\kappa = 0,6$ mit der Qualität der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\bar{x}_{\text{CS},0}(E)$ vergleichbar, in einigen Fällen ist sie sogar besser.



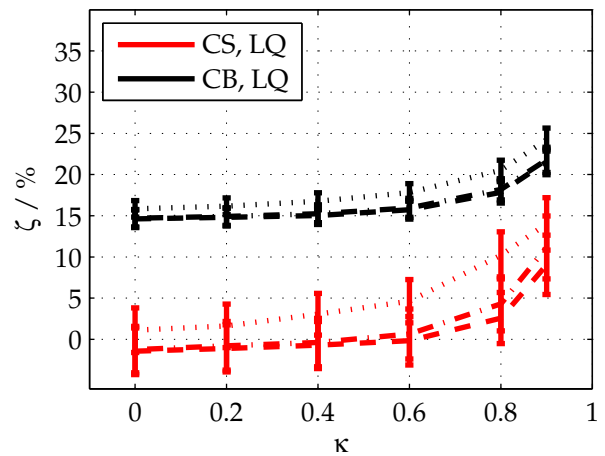
(a) Phantomklasse 1, $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ rot, $\zeta_{CS,0}$ blau.



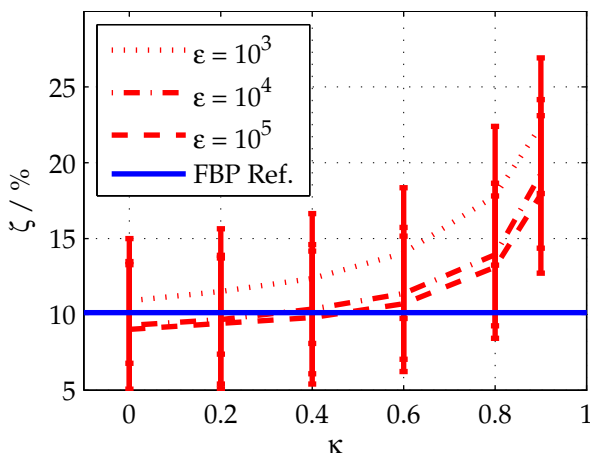
(b) Phantomklasse 1, $\zeta_{CS,\Delta}(\kappa, \epsilon)$ rot, $\zeta_{CB}(\kappa, \epsilon)$ schwarz.



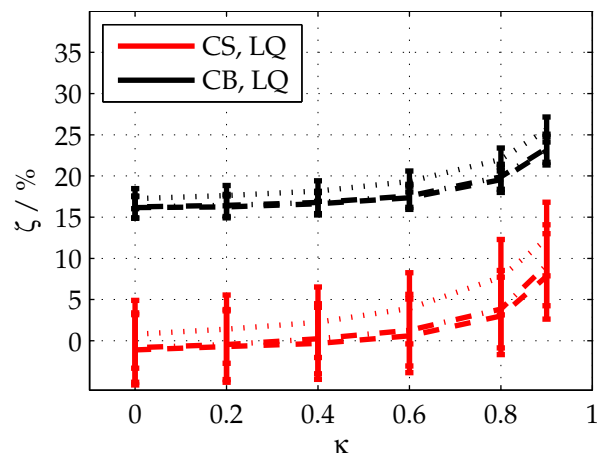
(c) Phantomklasse 2, $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ rot, $\zeta_{CS,0}$ blau.



(d) Phantomklasse 2, $\zeta_{CS,\Delta}(\kappa, \epsilon)$ rot, $\zeta_{CB}(\kappa, \epsilon)$ schwarz.



(e) Phantomklasse 3, $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ rot, $\zeta_{CS,0}$ blau.



(f) Phantomklasse 3, $\zeta_{CS,\Delta}(\kappa, \epsilon)$ rot, $\zeta_{CB}(\kappa, \epsilon)$ schwarz.

Abbildung 47: Übersicht der Rekonstruktionsgüten der drei Phantomklassen in Abhängigkeit des Unterabtastungsgrades κ und der Anzahl der simulierten Photonen. Die Fehlerbalken entsprechen der Standardabweichung der Performance der einzelnen Konfigurationen.

4.4.3. Parameterwahl

In diesem Abschnitt werden die Standardparameter der Rekonstruktion bestimmt. Die Ermittlung der Parameter wird ebenfalls durch simulationsbasierte Studien mit zufällig generierten Phantomen durchgeführt. Dabei werden 20 Phantome der Klasse 2 benutzt und die benötigten Sinogramme analog zu Unterabschnitt 4.4.2 simuliert. Bei einem äquivalenten Rauschlevel von 10^2 Quanten (hoch) bzw. 10^3 Quanten (gering) werden zweidimensionale Rekonstruktionen (Summe aller Energiekanäle des betrachteten Energiebereichs von $E = 70 - 100$ keV) im Ortsraum analysiert. So lassen sich Parameter wie die Rekonstruktions-Sparsity λ , die Iterationsanzahl ν_{\max} , die Dictionary Patch Größe w , die patchweise Ziel-Sparsity n_k^p und die Dictionary Redundanz r optimieren (vgl. Abschnitt 4.3). Zudem werden Auswirkungen der Segmentierung und des Patch-Überlapps auf die Rekonstruktionsqualität untersucht.

Sparsity Parameter λ

Der Sparsity Parameter λ steuert den Grad der Dünnbesetztheit des rekonstruierten Bildes (vgl. Ende von Unterabschnitt 4.2.4). Er wird in jedem Rekonstruktions-Iterationsschritt ν verändert. Dabei wird λ gemäß $\lambda(\nu) = (\eta_\lambda)^\nu \cdot \lambda_{\max}$ mit $\eta_\lambda = 0,95$ solange in jedem Schritt reduziert, bis λ bei $\hat{\nu}$ eine untere Grenze λ_{\min} erreicht hat. Für alle folgenden Iterationsschritte $\nu > \hat{\nu}$ wird dann $\lambda(\nu) = \lambda_{\min} = \text{konst.}$ gesetzt. Da λ durch λ_{\max} nach oben beschränkt ist, wird die untere Grenze gemäß $\lambda_{\min} = \alpha_\lambda \cdot \lambda_{\max}$ gewählt. Im Rahmen der Untersuchung werden Rekonstruktionen bei unterschiedlichen Werten des Parameters $\alpha_\lambda \in \{10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}\}$ durchgeführt und die Rekonstruktionsgüte in Abhängigkeit von κ und ϵ ausgewertet. Die Wahl der Parameter ist auf die Anzahl der Iterationsschritte $\nu_{\max} = 250$ abgestimmt, s.d. ein Erreichen der unteren Grenze λ_{\min} für alle α_λ garantiert ist.

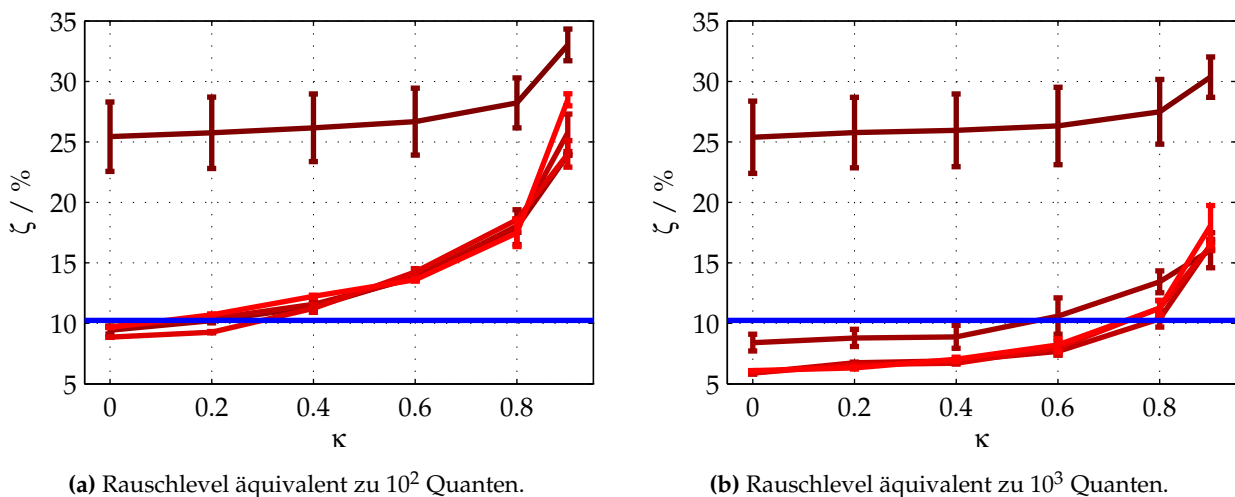


Abbildung 48: Untersuchung zur Wahl von λ_{\min} : Die Rekonstruktionsgüte ζ_{CS} ist in Abhängigkeit von κ für Rauschniveaus von 10^2 a) bzw. 10^3 b) Quanten für Werte $10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}$ bzw. 10^{-5} (dunkelrot \rightarrow hellrot) von α_λ dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls $\zeta_{CS,0}$ eingezeichnet (blau). Die Werte entsprechen den Mittelwerten aller Rekonstruktionen, Fehlerbalken geben die Standardabweichung an.

Der Verlauf der Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ ist für alle untersuchten Sparsity-Parameter in Abbildung 48 dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls die Güte $\zeta_{CS,0}$ der rauschfreien FBP Rekonstruktion eingezeichnet (blaue Linie). Es wird ersichtlich, dass die Rekonstruktionsgüte für $\alpha_\lambda \rightarrow 0$ (dunkelrot \rightarrow hellrot) zunimmt. Dabei fällt zusätzlich auf, dass sowohl bei hohem Rauschlevel (a) als auch bei rauschärmeren Daten (b) die Rekonstruktionsgüte für $\alpha_\lambda \leq 10^{-3}$ keine signifikante Änderung mehr aufweist. Dennoch hängt die Konvergenzgeschwindigkeit von $\zeta_{CS}(\lambda_{\max})$ vom zugrundeliegenden Rauschlevel ab. Dies motiviert eine Wahl von α_λ gemäß $\alpha_\lambda = (\eta_\lambda)^{\nu_{\max}}$. Für ein hinreichend großes ν_{\max} korrespondiert diese Wahl zu einer unteren Grenze von $\lambda_{\min} \approx 0$.

Es ist anzumerken, dass die Dünnbesetztheit der Rekonstruktion bei dem verwendeten Rekonstruktionsalgorithmus 4.6 ebenfalls durch die in jedem Patch der Größe $w \times w$ definierte Ziel-Sparsity n_k^p über den OMP basierten Sparse-Coding Schritt kontrolliert wird. Die Auswirkung der Wahl von n_k^p ist daher Gegenstand des nächsten Abschnitts.

Patchweise Ziel-Sparsity n_k^p

In jeder Iteration der Rekonstruktion werden gemäß Algorithmus 4.6 alle $w \times w$ großen Bild-patches des aktuellen Rekonstruktionsbildes mit Hilfe des OMP Algorithmus bei einer vorgegebenen Ziel-Sparsity n_k^p bezüglich des Dictionaries D analysiert. Abhängig von der Wahl von n_k^p wirkt sich dieses harte Thresholding Verfahren rauschreduzierend auf das Bild aus. Dabei muss ein Kompromiss zwischen dem Maß an Rauschreduzierung und dem zu tolerierenden Kompressionsfehler eingegangen werden: Für eine starke Rauschreduzierung muss n_k^p entsprechend klein gewählt werden, damit die Rauschteile im Bild weniger einflussreich dargestellt werden - wird n_k^p jedoch zu klein gewählt, dominiert der Kompressionsfehler in der Rekonstruktion. Die optimale Wahl von n_k^p ist zudem abhängig von dem zugrundeliegenden Rauschlevel. Um den Einfluss der Wahl der patchweisen Ziel-Sparsity auf das Rekonstruktionsergebnis zu untersuchen,

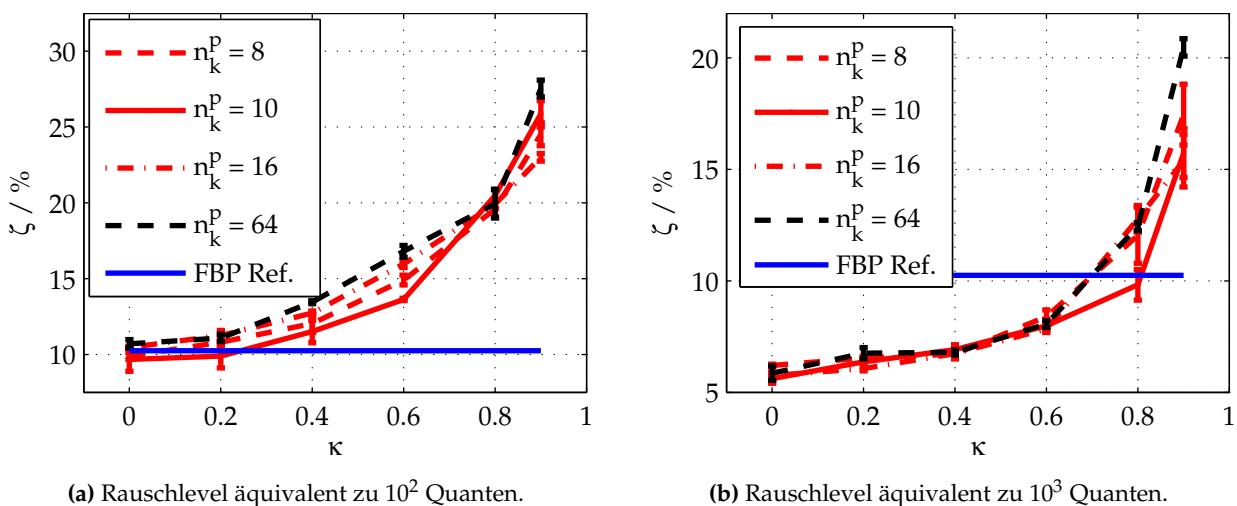


Abbildung 49: Untersuchung zur Wahl von n_k^p : Die Rekonstruktionsgüte ζ_{CS} ist in Abhängigkeit von κ für Rauschniveaus von 10^2 a) bzw. 10^3 b) Quanten für Ziel-Sparsity Werte von $n_k^p = 8, 10, 16$ bzw. 64 dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls $\zeta_{CS,0}$ eingezeichnet (blau). Die Werte entsprechen den Mittelwerten aller Rekonstruktionen, Fehlerbalken geben die Standardabweichung an.

werden Rekonstruktionen bei unterschiedlichen Werten $n_k^p \in \{8, 10, 16, 64\}$ durchgeführt und die Rekonstruktionsgüte in Abhängigkeit von κ und ϵ ausgewertet. Die Untersuchung wird bei einer Patch-Größe von $w = 8$ und einer Dictionary Redundanz von $r_D = 4$, d.h. bei einer vierfachen Überbestimmtheit des Dictionarys, durchgeführt.

Für die verschiedenen Werte der Ziel Sparsity n_k^p ist der Verlauf der Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ in Abbildung 49 gezeigt. Zunächst ist zu erkennen, dass die Rekonstruktionen im Fall von $n_k^p = 64$ die geringste Güte aufweisen. Außerdem ist ersichtlich, dass der optimale Wert von n_k^p - wie erwartet - vom zugrundeliegenden Rauschlevel abhängt. So zeigt sich im Fall von 10^2 simulierten Quanten (a), dass bei relevanten Werten von κ stets eine Verbesserung der Rekonstruktionsgüte gegenüber dem Fall $n_k^p = 64$ vorliegt. Diese beträgt bei $\kappa = 0,6$ mehr als 5%. Im rauschärmeren Fall von 10^3 simulierten Quanten (b) ist im Bereich $\kappa < 0,8$ hingegen kein signifikanter Unterschied der Rekonstruktionsgüten auszumachen - hier liegt der optimale Wert n_k^p mit ≈ 12 entsprechend höher. Für die Standardkonfiguration der Rekonstruktionsparameter wird in dieser Arbeit $n_k^p = 10 = \text{konst.}$ gesetzt.

Anzahl der Iterationen

Iterative Verfahren zur Lösung von schlechtgestellten Problemen können als Regularisierungsmethoden interpretiert werden, deren Regularisierungsparameter durch die Anzahl der Iterationsschritte gegeben ist[175]. Diese Verfahren zeichnen sich typischerweise durch die Eigenschaft der semi-Konvergenz[176] aus. Hierbei existiert ein Iterationsindex ν_{opt} für den eine optimale Rekonstruktion, d.h. die maximal erreichbare Rekonstruktionsgüte, vorliegt; bei Werten $\nu > \nu_{\text{opt}}$ nimmt die Rekonstruktionsgüte wieder ab. Zur Untersuchung des Konvergenzverhalten von Algorithmus 4.6 werden Rekonstruktionen der simulierten Sinogramme bei unterschiedlichen Wer-

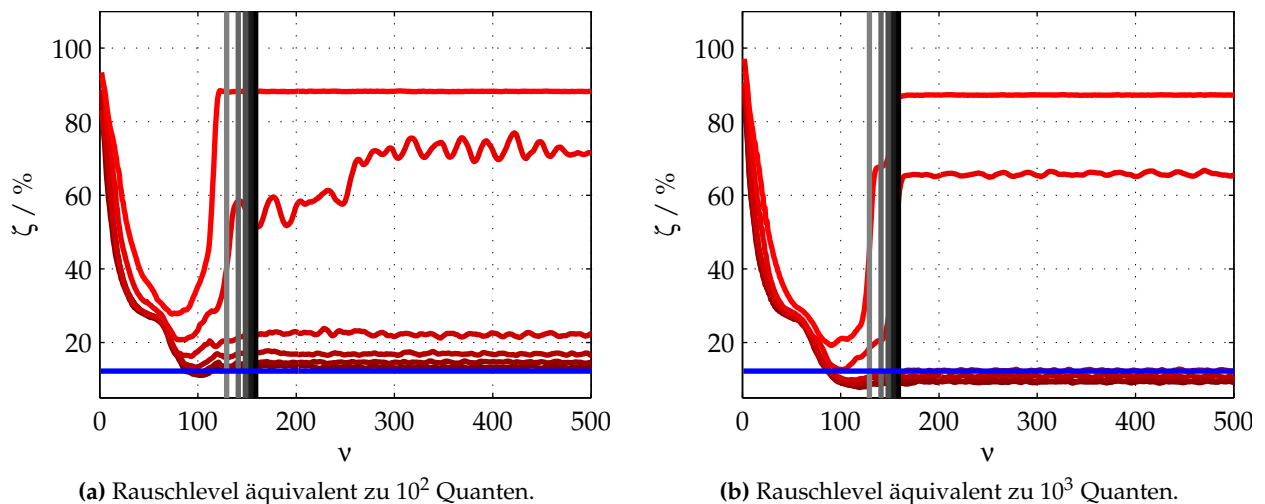


Abbildung 50: Untersuchung zur Wahl von ν_{max} : Die Rekonstruktionsgüte ζ_{CS} ist in Abhängigkeit der Anzahl der Rekonstruktions-Iterationen ν für Rauschniveaus von 10^2 a) bzw. 10^3 b) Quanten bei $\kappa = 0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8$ und $0,9$ dargestellt (dunkelrot \rightarrow hellrot). Zum Vergleich ist ebenfalls $\zeta_{CS,0}$ (blau) und die Anzahl der benötigten CBCT-Rekonstruktionen in Abhängigkeit von κ (grau \rightarrow schwarz) eingezeichnet. Die Werte entsprechen den Mittelwerten aller Rekonstruktionen, Fehlerbalken geben die Standardabweichung an.

ten $\kappa \in \{0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 0,9\}$ durchgeführt und die Rekonstruktionsgüte in Abhängigkeit der Iterationszahl ν für die gegebenen Rauschlevel ausgewertet. Bei der Durchführung werden insgesamt $\nu_{\max} = 500$ Iterationen pro Rekonstruktion berechnet.

Der Verlauf der Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ in Abhängigkeit der Anzahl der berechneten Iterationen ν ist in Abbildung 50 für alle κ Werte dargestellt (dunkelrot \rightarrow hellrot). Ebenfalls ist die Güte $\zeta_{CS,0}$ der rauschfreien FBP Rekonstruktion eingezeichnet (blau). Zum Vergleich wird zusätzlich die optimale Anzahl an Iterationen ν_{opt} des CBCT-Schätzers für alle Werte von κ eingezeichnet (grau \rightarrow schwarz). Es fällt auf, dass alle Gütekurven ein für Semi-Konvergenz typisches Minimum aufweisen. Für größere Werte von ν ist die maximale Abweichung jedoch nach oben beschränkt und die Gütekurven folgen einem nahezu konstanten Verlauf. Zudem ist für Werte von $\kappa \leq 0,6$ bei geringem und hohem Rauschlevel der Rekonstruktionsgüteverlust vergleichsweise gering. Der stabile Verlauf der Rekonstruktionsgüte wird durch die Bildverarbeitung zwischen den Iterationsschritten ermöglicht. Für die Fälle $\kappa \geq 0,8$ sinkt die Rekonstruktionsqualität allerdings sprunghaft ab. Dieses Verhalten kann ebenfalls bei dem CBCT-Schätzer beobachtet werden. Dieser liefert somit offenbar eine gute Abschätzung für die benötigte Anzahl an Iterationen der CSCT-Rekonstruktion.

Dictionary Patch Größe w

Das Erlernen des Dictionarys D mittels K-SVD Algorithmus wird im Rahmen dieser Arbeit stets mit der aus dem CBCT-Bild maximalen Anzahl zur Verfügung stehenden Trainings Patches durchgeführt. Entsprechend ist die maximale Dictionary Patch Größe - unabhängig vom Berechnungsaufwand - bereits durch die limitierte Menge der Lern-Informationen nach oben beschränkt. Die Wahl von w hängt also maßgeblich damit zusammen, wie viele Trainingspatches zum Dictionary Training benötigt werden, um das CSCT- bzw. CBCT-Bild mit hoher Güte und Kompression

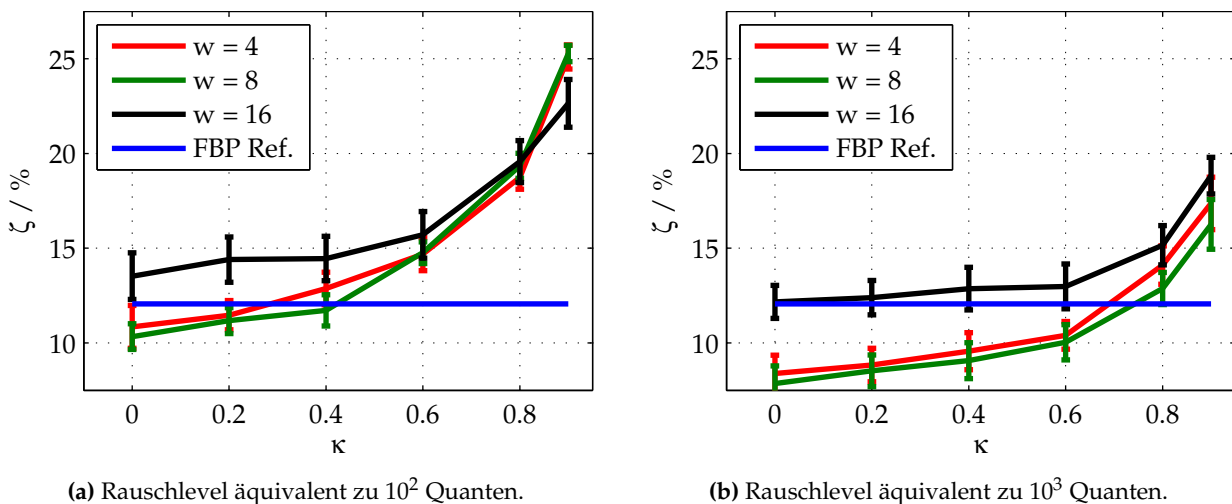


Abbildung 51: Untersuchung zur Wahl der Patch-Größe w : Die Rekonstruktionsgüte ζ_{CS} ist in Abhängigkeit von κ für Rauschniveaus von 10^2 a) bzw. 10^3 b) Quanten für die Patch-Größen $w = 4, 8$ bzw. 16 dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls $\zeta_{CS,0}$ eingezeichnet (blau). Die Werte entsprechen den Mittelwerten aller Rekonstruktionen, Fehlerbalken geben die Standardabweichung an.

bezüglich D darstellen zu können. Zur Untersuchung der Auswirkung von unzureichendem Dictionary Training werden Rekonstruktionen der simulierten Sinogramme in Abhängigkeit von κ und ϵ durchgeführt und für unterschiedliche Segmentgrößen ausgewertet. Ausgehend von einer Bildgröße von $n_r = 96 \times 96$ Pixeln werden Patchgrößen von 4×4 , 6×6 , 8×8 , 12×12 bzw. 16×16 bei einer Redundanz von $r_D = 4$ zum Vergleich benutzt.

Der Verlauf der Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ ist in Abbildung 51 für einige Patchgrößen, $w = 4$ (rot), $w = 8$ (grün) bzw. $w = 16$ (schwarz), dargestellt. Ferner ist die Abweichung der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\zeta_{CS,0}$ (blau) gezeigt. Es lässt sich erkennen, dass die Wahl der optimalen Patchgröße nur gering von der Höhe der simulierten Rauschlevel abhängt. Es wird deutlich, dass die Rekonstruktionen mit einem Dictionary der Patchgröße 16×16 signifikant geringere Rekonstruktionsgüte erzielen als in allen andere simulierten Fällen. Vergleicht man die Ergebnisse der restlichen Patchgrößen (ebenfalls die nicht gezeigten Werte für $w = 6$ und $w = 12$), so zeigt sich, dass mit $w = 8$ die höchsten Rekonstruktionsgüten erzielt werden können. Entsprechend wird für die Standardkonfiguration der Rekonstruktionsparameter in dieser Arbeit $w = 8$ gesetzt.

Reduzierung der Dictionary Redundanz

Im Rahmen des Präprozesses wird der OMP Algorithmus verwendet, um die vom Betrag kleinsten Koeffizienten der Darstellung des CBCT-Bildes bezüglich D zu erkennen und aus der Systemmatrix zu entfernen. Dies geschieht unter der Annahme, dass das CSCT-Bild ebenfalls bezüglich der verbleibenden Atome komprimiert darstellbar ist. So wird einerseits zwar die Redundanz (vgl. Abschnitt 4.3) des erlernten Dictionarys reduziert, jedoch ebenso homogene Bereiche im CBCT-Bild identifiziert und bei der Rekonstruktion forciert. Für die Untersuchung der Auswirkung der Redundanzreduzierung wurden Rekonstruktionsstudien mit simulierten Sinogrammen in Abhängigkeit von κ und ϵ durchgeführt. Die Reduzierung des verwendeten 8×8 Dictionarys

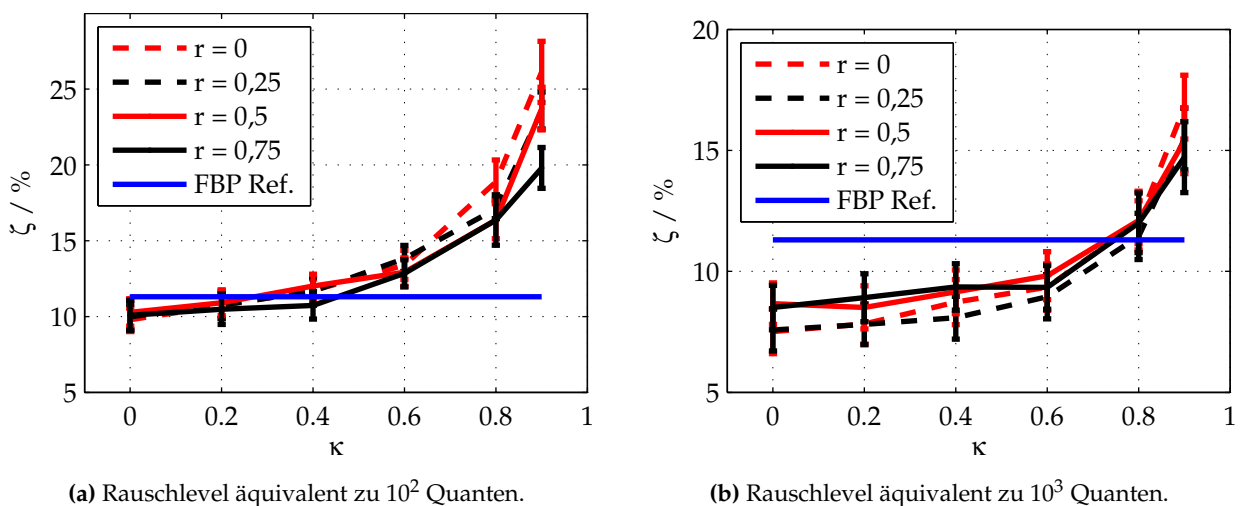


Abbildung 52: Untersuchung zur Dictionary Redundanz Reduzierung: Die Rekonstruktionsgüte ζ_{CS} ist in Abhängigkeit von κ für Rauschniveaus von 10^2 a) bzw. 10^3 b) Quanten für Dictionary Redundanz Werte von 0, 0,25, 0,5 bzw. 0,75 dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls $\zeta_{CS,0}$ eingezeichnet (blau). Die Werte entsprechen den Mittelwerten aller Rekonstruktionen, Fehlerbalken geben die Standardabweichung an.

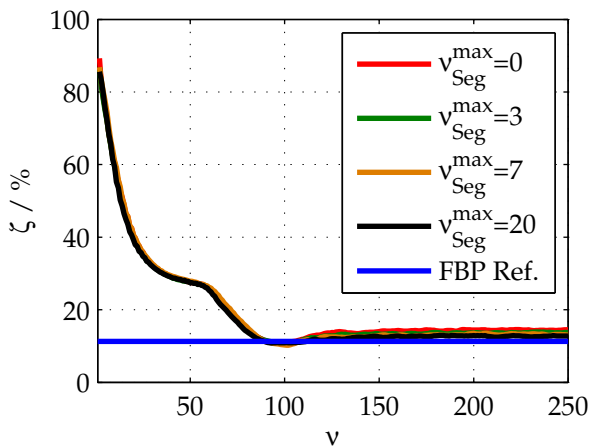
mit 4 facher Redundanz wird dabei um 0 %, 25 %, 50 % bzw. 75 % durchgeführt. Dementsprechend resultiert im Fall einer 75 % Reduzierung ein Dictionary mit $r_D = 1$.

Für die verschiedenen Grade der Redundanzreduzierung ist der Verlauf der Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ in Abbildung 49 gezeigt. Zur Orientierung ist ebenfalls die Abweichung der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\zeta_{CS,0}$ geplottet. Es fällt auf, dass die Unterschiede der Rekonstruktionsgüten vergleichsweise klein sind. Abhängig von dem zugrundeliegenden Rauschniveau, beträgt die Verbesserung bis zu 2 % bei einer Redundanzreduzierung um 25 %. Bei stärkerer Reduzierung nimmt die Rekonstruktionsgüte bei geringen Rauschpegeln erneut ab. Bei hohen Rauschpegeln führen hingegen auch weitere Reduzierungen zu einer leichten Verbesserung der Rekonstruktionsqualität. Aufgrund der vergleichsweise geringen Auswirkung wird im Rahmen dieser Arbeit standardmäßig keine Reduzierung durchgeführt.

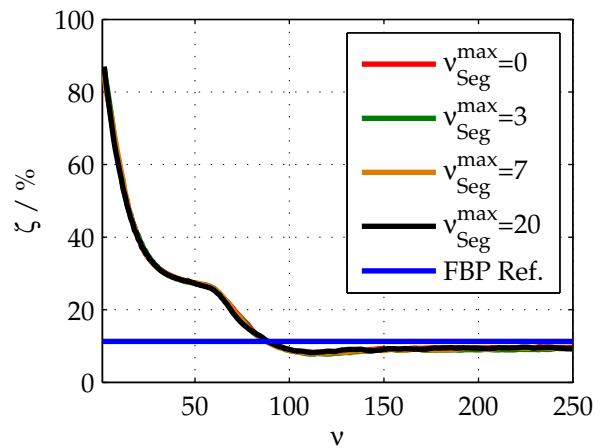
Segmentierung

Durch die Segmentierung des CBCT-Bildes im Rahmen des Präprozesses, vgl. Unterabschnitt 4.3.2, werden geometrische Informationen über zusammenhängende und homogene Objektbereiche zugänglich gemacht. Durch die Implementierung dieser Information in das Minimierungsproblem der Rekonstruktion über die Nebenbedingungsmatrix C lässt sich eine verbesserte Stabilität der Rekonstruktion auch bei größeren Werten von κ erzielen. Der Einfluss der Nebenbedingung wird über den Parameter λ_{seg} gesteuert. Im Rahmen der Erprobung des Segmentierungsprozesses hat sich eine feste Wahl von $\lambda_{\text{seg},0} = 1,1/\sqrt{2}$ bewährt. Dieser Wert wird für alle Untersuchungen verwendet. Zur Untersuchung der Auswirkung des Segmentierungs-Präprozesses auf die Rekonstruktionsgüte und -stabilität wurden Rekonstruktionen der simulierten Sinogramme in Abhängigkeit von $\kappa = 0,2; 0,8; 0,9$ und ϵ bei unterschiedlichen Größen der C -Matrix ausgeführt. Für ein stabiles Segmentierungsergebnis wird das rekonstruierte CBCT-Bild zunächst mit Hilfe eines 3×3 Wiener-Filters entrauscht. Anschließend werden Segmentierungen mit einer Start-Segmentgröße von $n_{\text{seg},0} = 10$ durchgeführt. Dabei wird ein Pixel einem Segment zugeordnet, wenn die Abweichung von $\leq 0,1$ zwischen dessen Wert und dem Segmentmittelwert der bereits ermittelten Pixel besteht. Die Segmentgröße pro Segmentierungs-Iteration wird mit einer Steigung von $m_{\text{seg}} = 10$ erhöht. Dieser Vorgang wird bis zum Erreichen einer maximalen Iteration $v_{\text{seg}}^{\text{max}}$ fortgeführt. Die Untersuchungen wurden bei unterschiedlichen Werten $v_{\text{seg}}^{\text{max}}$ von 0 (keine Segmentierung), 3, 7 bzw. 20 durchgeführt.

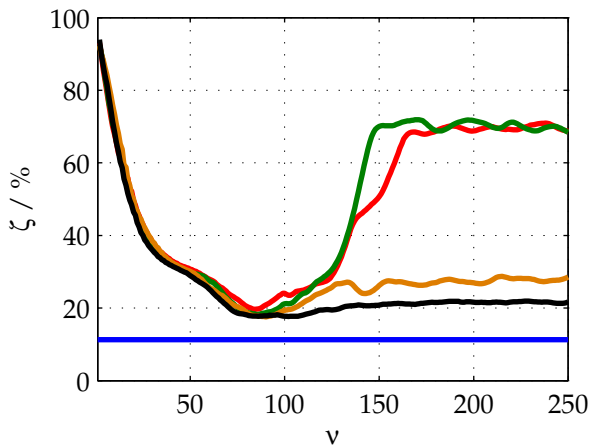
Der Verlauf der Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ ist in Abbildung 53 für die verschiedenen Iterationstiefen der Segmentierung dargestellt. Des Weiteren ist die Abweichung der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\zeta_{CS,0}$ (blau) zum Vergleich gezeigt. Es wird deutlich, dass das Konvergenzverhalten des Rekonstruktionsalgorithmus durch die Segmentierung beeinflusst wird. Die Rekonstruktionsgüte ist in allen Fällen leicht gegenüber der segmentierungsfreien Rekonstruktion verbessert. In Abhängigkeit von $v_{\text{seg}}^{\text{max}}$ wird darüber hinaus die Lösung derart stabilisiert, dass sich ebenfalls die finale Rekonstruktionsgüte (Iterationszahl v groß) im Vergleich zum Fall $v_{\text{seg}}^{\text{max}} = 0$ (keine Segmentierung) verbessert. Für den Fall $v_{\text{seg}}^{\text{max}} = 20$ werden insbesondere Rekonstruktionen generiert, deren Rekonstruktionsgüten sich nur geringfügig von der „optimalen“ Güte (im Minimum) unterscheiden. Es liegt in diesem Fall keine Semi-Konvergenz mehr vor. Die Auswirkung der Segmentierung bei iso-intensen CBCT-Bildern wird in Unterabschnitt 4.4.4 beschrieben; die für die Segmentierung benötigten Parameter sind - sofern eine Segmentierung angewendet wird - an entsprechender Stelle individuell vermerkt.



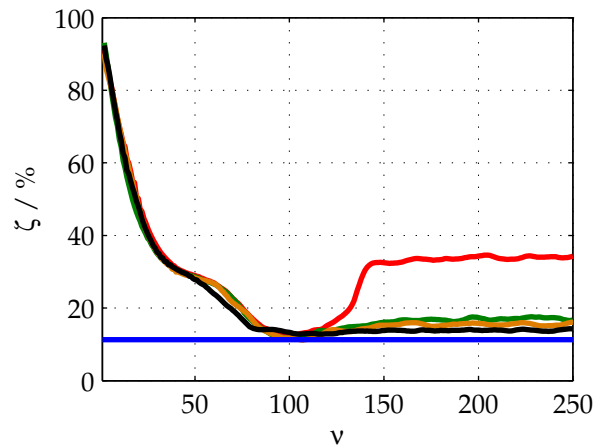
(a) $\kappa = 0,2$, Rauschlevel äquivalent zu 10^2 Quanten.



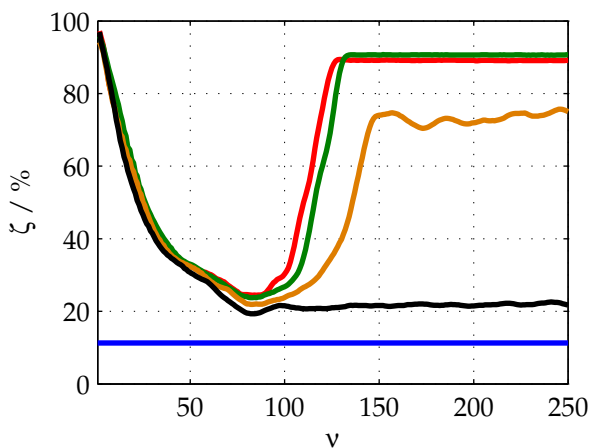
(b) $\kappa = 0,2$, Rauschlevel äquivalent zu 10^3 Quanten.



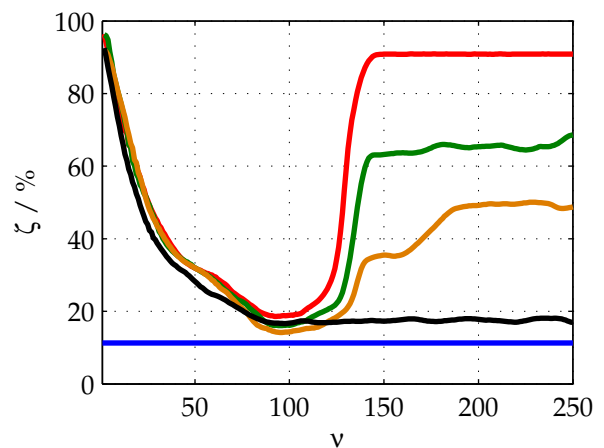
(c) $\kappa = 0,8$, Rauschlevel äquivalent zu 10^2 Quanten.



(d) $\kappa = 0,8$, Rauschlevel äquivalent zu 10^3 Quanten.



(e) $\kappa = 0,9$, Rauschlevel äquivalent zu 10^2 Quanten.



(f) $\kappa = 0,9$, Rauschlevel äquivalent zu 10^3 Quanten.

Abbildung 53: Untersuchung zur Auswirkung des Segmentierungs-Präprozesses: Die Rekonstruktionsgüte ζ_{CS} ist für Werte 0,2; 0,8 bzw. 0,9 von κ bei Rauschniveaus von 10^2 a) bzw. 10^3 b) Quanten und unterschiedlichen Werten v_{seg}^{max} von 0, 3, 7, und 20 in Abhängigkeit der Anzahl der Iterationen v dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls die Rekonstruktionsgüte der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\zeta_{CS,0}$ eingezeichnet (blau). Die Werte entsprechen den Mittelwerten aller Rekonstruktionen.

Block-Artefakt-Reduzierung

Durch die Einteilung des Bildes in einzelne quadratische Segmente (Patches) können bei der Rekonstruktion Artefakte an den Patch-Kanten entstehen (sog „Block“ Artefakte, vgl. Unterabschnitt 4.3.4). Zur Vermeidung dieser Artefakte lässt sich der OMP-Schritt im Rekonstruktionsalgorithmus 4.6 für verschiedene Realisierungen der Patchsegmentierung durchführen. Dabei werden die Patchgitter sowohl horizontal als auch vertikal verschoben. Bei einer Patchgröße von $w \times w$ Pixeln ergeben sich w^2 Möglichkeiten das Patchgitter des Bildes zu definieren. Zur Untersuchung der Auswirkung der Patchgitter-Wahl im Hinblick auf eine resultierende Block-Artefakt-Reduzierung werden Rekonstruktionsstudien mit simulierten Sinogrammen in Abhängigkeit von κ und ϵ durchgeführt. Dabei werden Rekonstruktionen mit jeweils 0 (keine Überlappung) $w^2/2$ (teilweise Überlappung) und w^2 (maximale Überlappung) Gitterkonfigurationen durchgeführt und die rekonstruierten Bilder in jedem Iterationsschritt der Rekonstruktion durch Mittelwertbildung miteinander verrechnet.

Die Rekonstruktionsgüte $\zeta_{CS}(\kappa, \epsilon)$ in Abhängigkeit der verschiedenen Gitterkonfigurationen ist in Abbildung 54 als Funktion von κ und ϵ gezeigt. Zudem ist die Abweichung der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\zeta_{CS,0}$ zur besseren Vergleichbarkeit geplottet. Es wird deutlich, dass die Rekonstruktionsgüte für alle Werte von κ durch die mehrfache Rekonstruktion bei unterschiedlichen Gitterrealisierungen geringfügig verbessert wird. Bei Verwendung der maximalen Anzahl an Gitterkonfigurationen zur Rekonstruktion wird die höchste Rekonstruktionsgüte erzielt und die Block-Artefakte visuell effektiv beseitigt. Werden im Rahmen dieser Arbeit Rekonstruktionen mit Block-Artefakt-Rekonstruktion durchgeführt, wird dies individuell an entsprechender Stelle vermerkt.

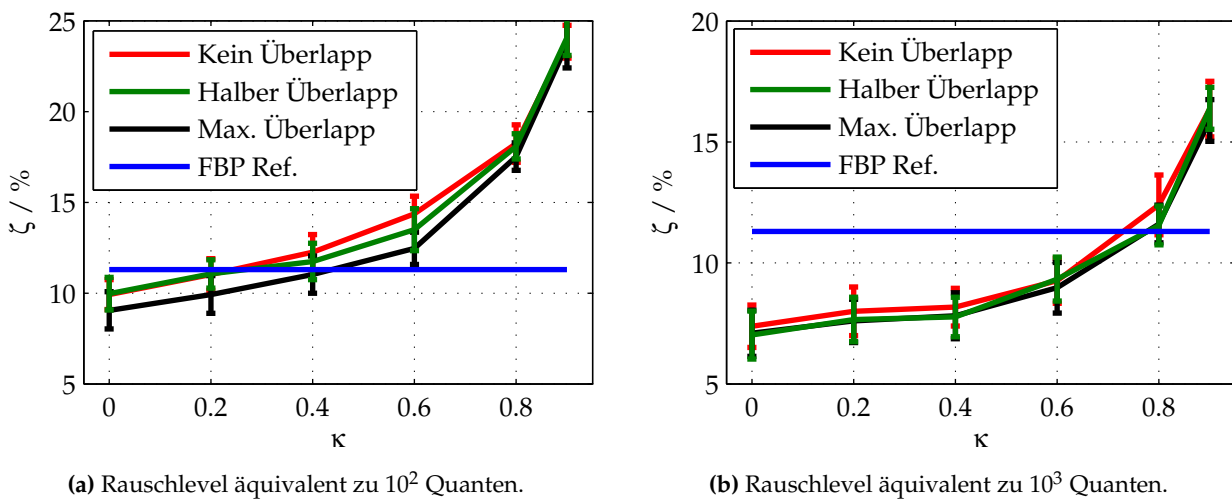


Abbildung 54: Untersuchung der Block-Artefakt-Reduzierung: Die Rekonstruktionsgüte ζ_{CS} ist für unterschiedliche Gitterkonfigurationen (kein Überlapp, „halber Überlapp“ und „kompletter Überlapp“) bei Rauschniveaus von 10^2 a) bzw. 10^3 b) Quanten in Abhängigkeit von κ dargestellt. Zum Vergleich ist ebenfalls die Rekonstruktionsgüte der rauschfreien FBP Rekonstruktion $\zeta_{CS,0}$ eingezeichnet (blau). Die Werte entsprechen den Mittelwerten aller Rekonstruktionen, Fehlerbalken geben die Standardabweichung an.

4.4.4. Prominente CSCT-Artefakte

In diesem Abschnitt werden besonders relevante CSCT-Rekonstruktionsartefakte charakterisiert. Untersucht wird unter anderem die Auswirkung der Schwächungskorrektur sowie der Strahlungsaufhärtung auf die Rekonstruktionsgüte im Hinblick auf die Entstehung sog. „Geisterpeaks“. Weiterer Teil der Untersuchung sind Auswirkungen der im Segmentierungsprozess gewonnenen Nebenbedingungsmatrix C auf die Rekonstruktionsgüte - insbesondere im Fall iso-intenser a priori CBCT-Daten. Des Weiteren werden Effekte aufgrund von nicht-isotrop streuenden Proben behandelt. Diese können durch vorhandene Vorzugsorientierungen in der Probe beispielsweise in Form von Texturen (vgl. „Walztextur“ bei Blechen) oder durch größere einkristalline Körner auftreten.

Zur Untersuchung der geschilderten Fälle wurden Studien mit Hilfe eines simulierten Phantoms durchgeführt. Die Materialverteilung des verwendeten Phantoms ist in Abbildung 55 a) gezeigt. Es besteht aus den drei verschiedenen Kunststoffen PMMA, PTFE und PVC. Die zu den Materialien korrespondierenden Beugungsspektren sind in Teil e) der Abbildung dargestellt. Die Simulation der Sinogramme wurde bei 10^5 Quanten (geringes Rauschlevel) durchgeführt, um die Einflüsse des Quantenrauschens auf die Rekonstruktion gering zu halten. Alle Rekonstruktionen wurden im Energiebereich 70 – 140 keV unter Verwendung von Segmentierung - mit Parametern wie im vorangehenden Unterabschnitt 4.4.3 (Segmentierung) beschrieben - gewonnen.

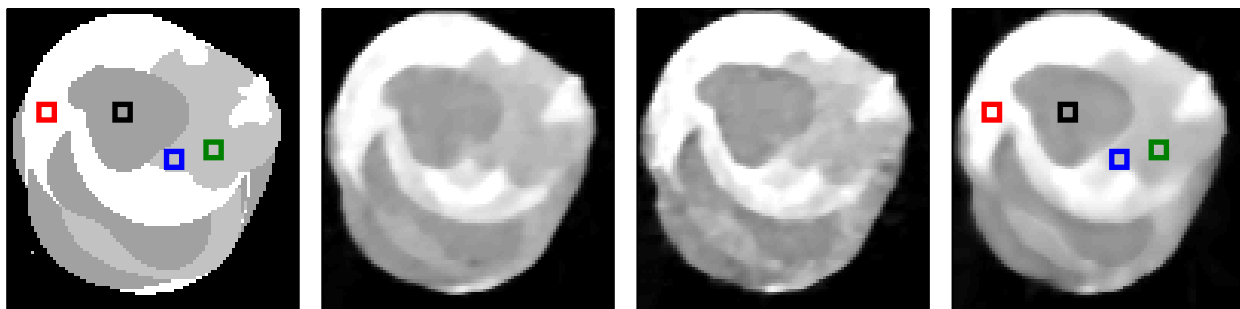
Aufhärtungsartefakte und Geisterpeaks

Im Folgenden wird die Bildung von Strahlaufhärtungsartefakten beleuchtet. Artefakte treten bei energiedispersiven CSCT-Rekonstruktionen sowohl im Orts- als auch im Spektralraum auf. So können bei einer Rekonstruktion beispielsweise Peaks ohne physikalische Bedeutung entstehen. Diese Peaks werden im Allgemeinen als „Geisterpeaks“ bezeichnet. Gegenstand der Untersuchungen ist die Auswirkung der durchgeführten Schwächungskorrektur auf die Rekonstruktion sowie dessen Verhalten bei Verwendung stark schwächender Materialien.

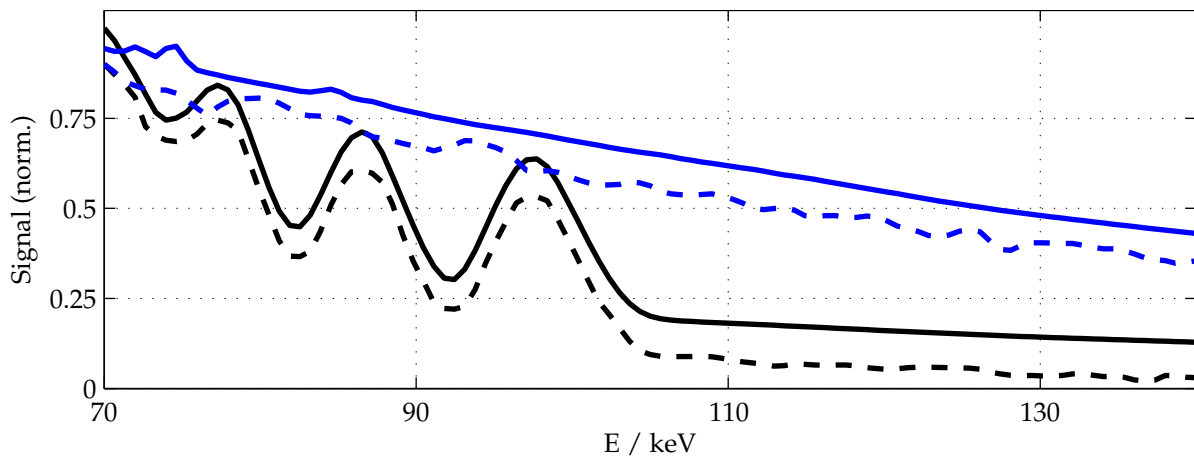
Die bei energiedispersiven CSCT-Systemen üblicherweise angewendete Schwächungskorrektur (Division von Streu- und Transmissionssinogramm, vgl. u.a. [72, S. 36 ff.]) fußt auf der Annahme, dass die Schwächung entlang der Pfade der gestreuten und transmittierten Photonen identisch ist. Abweichungen von dieser Annahme, sowie die Tatsache, dass typischerweise unterschiedliche Durchmesser für den Transmissions- und Streustrahlkollimation verwendet werden (hier beträgt der Unterschied ca. einen Faktor 2 der Strahlbreite), führen zu Fehlern im normierten, d.h. korrigierten Sinogramm. Im Gegensatz zur konventionellen Transmissions-CT Bildgebung spielen bei energiedispersiven CSCT-Rekonstruktion aufgrund der energiekanalweisen Betrachtung klassische Aufhärtungsartefakte keine wesentliche Rolle. Stattdessen treten vermehrt ähnliche, durch mangelnden Photonenfluss (sog. „photon starvation“) hervorgerufene, Artefakte auf, welche sich typischerweise in Streifen-Artefakten äußern[177].

Zur Analyse der beschriebenen Artefakte wurden mit Hilfe des Untersuchungsphantoms Sinogrammsimulationen mit und ohne Berücksichtigung der Strahlungsschwächung in der Probe („transparente“ Probe) bei 36 Winkelschritten (LQ) durchgeführt. Abbildung 55 b) zeigt die zweidimensionale Rekonstruktion (Summation aller Energiekanäle des CSCT-Sinogramms vor Rekonstruktion, $\kappa = 0$) für den Fall einer „transparenten“ Probe und spiegelt somit die höchste zu

erzielende Rekonstruktionsgüte wider. Vergleichend dazu ist in Teil c) der Abbildung die zweidimensionale Rekonstruktion mit realer Probenschwächung und durchgeführter Schwächungskorrektur gezeigt. Durch die Summation über den großen Energiebereich von 70 – 140 keV tragen sowohl Effekte unzureichenden Quantenflusses als auch die beschriebenen Einflüsse der unvollkommenen Schwächungskorrektur zu den Abweichungen bei. In Teil c) ist das Ergebnis der dreidimensionalen Rekonstruktion gezeigt. Dargestellt ist die nach der Rekonstruktion durchgeführte Summation über alle Energiekanäle. Aufhärtungsartefakte werden auf diese Weise minimiert - im Vergleich zu Fall c) ist eine deutliche Verbesserung der Bildqualität zu beobachten. Es tragen hauptsächlich die Fehler aufgrund der unvollständigen Schwächungskorrektur zur Abweichung



(a) Phantomdefinition. (b) Rekonstruktion, 2d ($\kappa = 0$, Simulation ohne Schwächung). (c) Rekonstruktion, 2d ($\kappa = 0$, Simulation mit Schwächung). (d) Rekonstruktion, 3d ($\kappa = 0$, Simulation mit Schwächung).



(e) Beugungsspektren der verwendeten Materialien, gewonnen aus der Phantomdefinition (durchgezogen) und Rekonstruktion (gestrichelt).

Abbildung 55: Phantomübersicht zur Charakterisierung von Rekonstruktionsartefakten: Teil a) zeigt die Materialverteilung des Phantoms. Als Materialien werden die Kunststoffe PTFE (rot), PMMA (schwarz) und PVC (grün) verwendet. Die Rekonstruktionen bei κ mit 10^5 simulierten Quanten sind in b) (Simulation ohne Schwächung, „transparentes Objekt“, 2d Rekonstruktion des Summenspektrums), in c) (Simulation mit Schwächung, 2d Rekonstruktion des Summenspektrums mit Schwächungskorrektur) und in d) (Simulation mit Schwächung, 3d Rekonstruktion mit Schwächungskorrektur) gezeigt. Die aus den farblich markierten Bereichen (5×5 Pixel) extrahierten Spektren sind in e) dargestellt (Auswahl). Zur besseren Unterscheidbarkeit sind die Spektren vertikal versetzt geplottet.

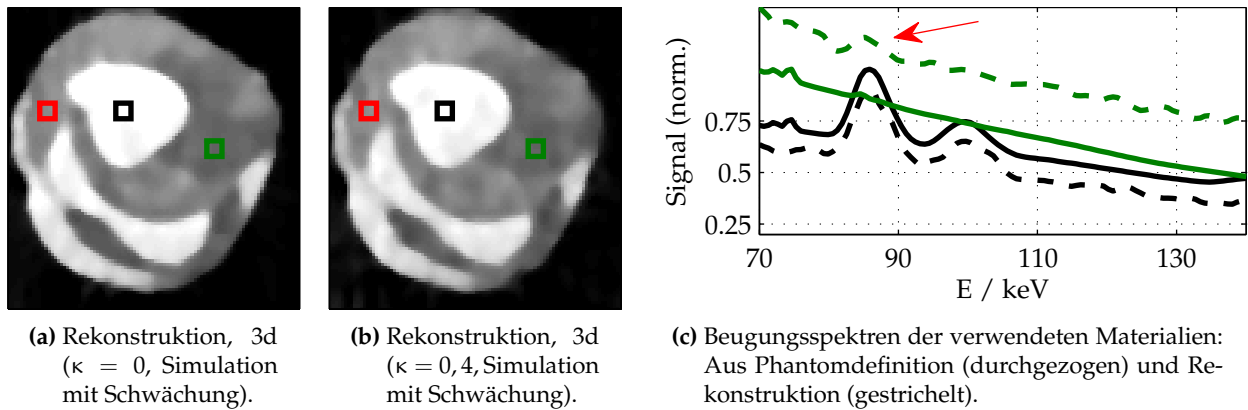


Abbildung 56: Auswirkung stark schwächender Materialien auf die Rekonstruktion: Teil a) zeigt die 3d Rekonstruktion (Summe aller Energiekanäle) des Schwächungsphantoms bei $\kappa = 0$, Teil b) für den Fall $\kappa = 0,4$ bei 10^5 simulierten Quanten. Als Materialien werden PTFE (rot), Aluminium (schwarz) und PVC (grün) verwendet. Die aus den farblich markierten Bereichen (5×5 Pixel) extrahierten Spektren sind in c) dargestellt (Auswahl). Zur besseren Unterscheidbarkeit sind die Spektren vertikal versetzt geplottet; Geisterpeaks werden sichtbar.

bei. Im Vergleich zur zweidimensionalen Referenzrekonstruktion wird eine leichte Zunahme der Verschmierung im Kantenbereich sichtbar. Betrachtet man jedoch die orts aufgelösten Beugungsspektren in verschiedenen Bildbereichen, vgl. Abbildung 55 e), so fällt auf, dass bei der gewählten Materialzusammensetzung selbst an Materialübergängen (blau) Geisterpeaks, d.h. „cross talk“, nur in vernachlässigbarem Maße auftreten.

Für die Untersuchung des Rekonstruktionsverhaltens bei stark schwächenden Proben (unzureichender Photonenfluss) wird in der Phantom-Materialzuordnung das Material PMMA ($Z_{\text{eff}} = 2 - 3,5$, $\rho = 1,19 \text{ g cm}^{-3}$ [178]) durch Aluminium ($Z = 13$, $\rho = 2,70 \text{ g cm}^{-3}$) ersetzt. Für diese Simulation wird ebenfalls der verwendete Streuquerschnitt geringfügig verkleinert und somit an die Werte von PTFE und PVC angepasst. Abbildung 56 a) zeigt die dreidimensionale Rekonstruktion (Summation aller Energiekanäle des CSCT-Sinogramms nach Rekonstruktion) für den Fall $\kappa = 0$, b) zeigt analog das Rekonstruktionsergebnis im Fall $\kappa = 0,4$. Bezogen auf das verwendete Phantom entsprechen diese Werte von κ 36 % bzw. 21 % der durchzuführenden Messungen eines vollständigen Scans. Es fällt auf, dass die Schwächung eine so starke Verringerung der Anzahl der detektierten Quanten entlang von Pfaden durch das Aluminium bewirkt, so dass Artefakte in Form von Streifen resultieren. Dieser Effekt verstärkt sich erwartungsgemäß in Abhängigkeit von κ . Betrachtet man die orts aufgelösten Beugungsspektren in verschiedenen Bildbereichen, wie in Abbildung 56 c) gezeigt, so wird das Vorhandensein der Al-Peaks in den PTFE (rot) bzw. PVC (grün) Spektren sichtbar. Die Aluminium-Spektren werden hingegen mit hoher Güte rekonstruiert.

A priori Daten mit iso-intensen Bereichen

CBCT-Bilder mit iso-intensen Bereichen als Eingabe für die CSCT-Rekonstruktion haben einen Einfluss auf die Rekonstruktionsgüte. Einerseits unterscheiden sich die erlernten Dictionaries bzw. die Koeffizienten zur Darstellung des Bildes, andererseits werden im Segmentierungs-Schritt -

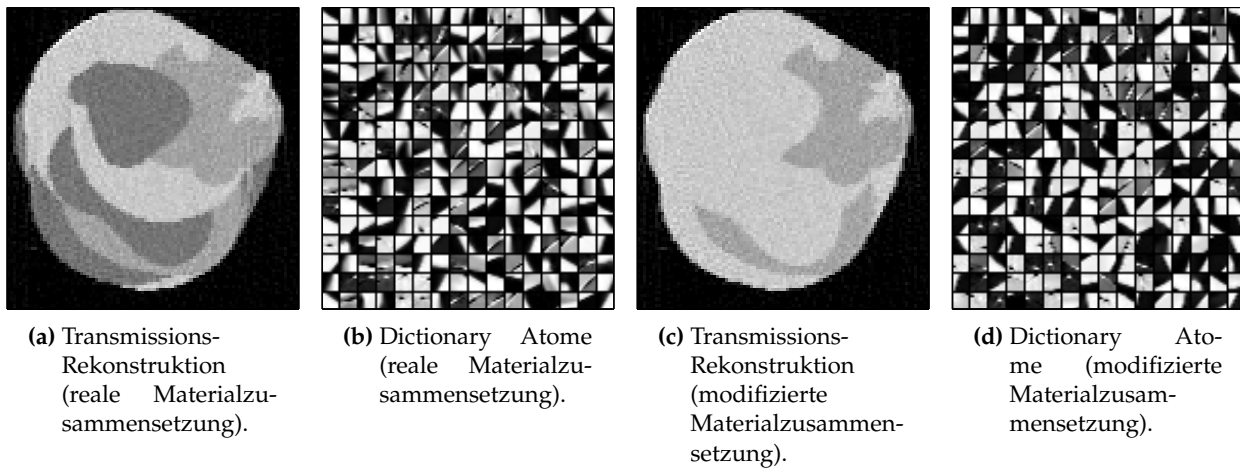


Abbildung 57: Generierung von in Teilen iso-intensen a priori CBCT-Daten. Transmissions-Rekonstruktion der realen Materialverteilung a) und der künstlichen iso-intensen Verteilung b). Die mit Hilfe der Rekonstruktion erlernten Dictionaries sind zugehörig in b) und d) dargestellt.

sofern er verwendet wird - fehlerhafte Nebenbedingungsmatrizen C generiert. Diesen Einfluss gilt es mit Hilfe des Untersuchungsphantoms zu untersuchen.

Eine Möglichkeit zur Darstellung eines solchen Szenarios kann durch die Anpassung der Materialdichten des Phantom geschehen. Die Dichten zweier Materialien werden derart gewählt, bis die CBCT-Rekonstruktion keine Unterscheidbarkeit dieser Materialien mehr zulässt. Um eine Unterscheidbarkeit jedoch unabhängig vom vorliegenden Quantenrauschen völlig auszuschließen werden die iso-intensen CBCT-Daten künstlich erzeugt: In Abbildung 57 a) ist die Transmissions-Rekonstruktion des „realen“, d.h. wie zuvor definierten, Phantoms gezeigt. Für die Studie wird ein künstliches zwei-Materialien Phantom aus dem realen drei-Materialphantom erzeugt, indem

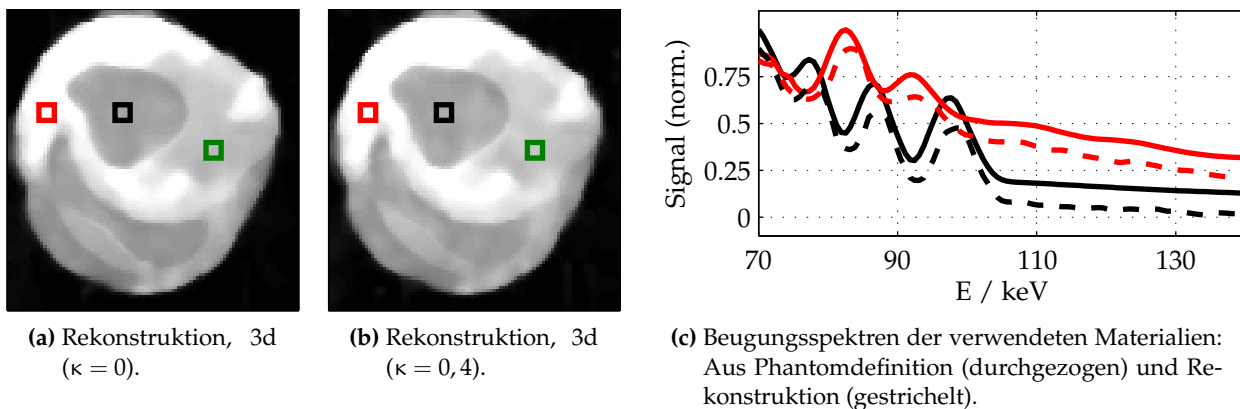


Abbildung 58: Auswirkung iso-intenser a priori CBCT-Daten auf die CSCT-Rekonstruktion: Teil a) zeigt die 3d Rekonstruktion (Summe aller Energiekanäle) des realen Phantoms bei $\kappa = 0$, Teil b) für den Fall $\kappa = 0,4$ bei 10^5 simulierten Quanten. Als Materialien werden PTFE (rot), PMMA (schwarz) und PVC (grün) verwendet. Die aus den farblich markierten Bereichen (5×5 Pixel) extrahierten Spektren sind in c) dargestellt (Auswahl). Zur besseren Unterscheidbarkeit sind die Spektren vertikal versetzt geplottet.

das Material PMMA durch PTFE ersetzt wird. Die Rekonstruktion dieses modifizierten CBCT-Phantoms ist in Teil c) der Abbildung gezeigt. Die Teilabbildungen b) bzw. d) visualisieren die Atome der entsprechend erlernten Dictionarys. Die in Teil c) gezeigte CBCT-Rekonstruktion wird als a priori Eingabe für die CSCT-Rekonstruktion des realen Phantoms bezüglich des Dictionarys d) - insbesondere für den Segmentierungsprozess - verwendet.

Die in Abbildung 58 a) und b) dargestellten Bilder zeigen die dreidimensionale Rekonstruktion (Summation aller Energiekanäle des CSCT-Sinogramms nach Rekonstruktion) für den Fall $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,4$. Es wird deutlich, dass sich die Rekonstruktion nur geringfügig von der Referenzrekonstruktion aus 55e unterscheiden. Die Untersuchung der Beugungsspektren in verschiedenen Bildbereichen, wie beispielsweise in Abbildung 58 c) dargestellt, zeigt zudem, dass keine signifikanten Geisterpeak-Artefakte bei der Rekonstruktion entstehen. Es ist anzumerken, dass durch das verwendete Phantom, welches durch großflächige, homogene Bereiche charakterisiert ist, der Einfluss der Segmentierung auf die Rekonstruktionsgüte deshalb vergleichsweise gering ausfällt, weil die Segmentierungs-Routine lokal angewendet wird. Zudem ist das Training des Dictionarys nicht stark beeinflusst, da auch das iso-intense CBCT-Bild ausreichend Trainingsdaten liefern kann (z.B. äußere Konturen).

Nicht-isotrope Streuung

CSCT-Systeme sind klassischerweise für die Untersuchung flüssiger, amorpher oder feiner Pulverproben - bei denen isotrope Streuung angenommen werden kann - ausgelegt. Bei einer Vielzahl realer Proben ist diese Annahme über die Streucharakteristik der Probe nur bedingt erfüllt. Diese sog. texturierten Proben, welche eine Vorzugsstreurichtung aufweisen, können beispielsweise im Produktionsprozess (z.B. Walztextur, Fasertextur, ...) entstehen. Im Extremfall können Proben sogar aus großvolumigen Einkristallen bestehen. Hierbei kann Streuung nur bei diskreten Winkeln beobachtet werden (vgl. Laue Aufnahme). Die Auswirkung derartiger Abweichungen von einem isotropen Streuverhalten gilt es zu untersuchen.

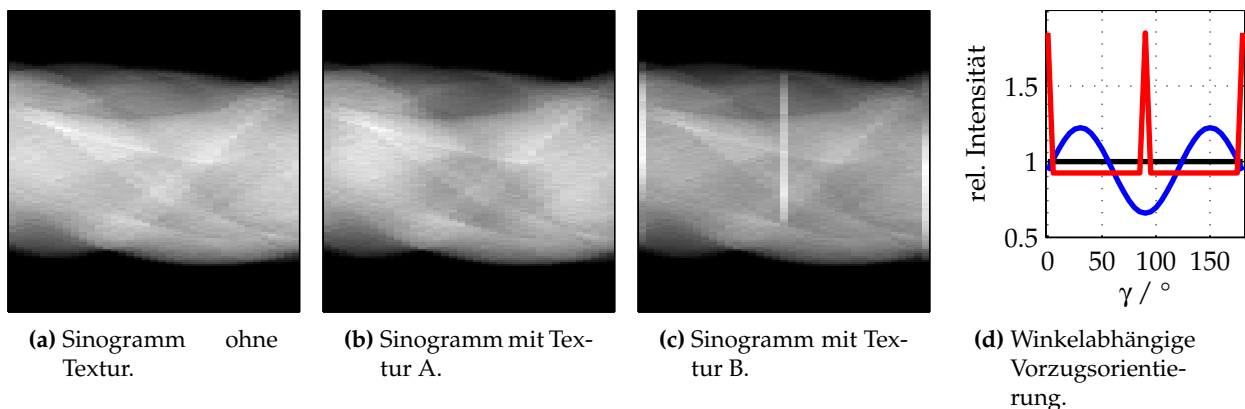


Abbildung 59: Sinogramme zur Untersuchung der Auswirkung nicht isotroper Streuung auf die Rekonstruktion. Gezeigt ist das Referenzsinogramm ohne Vorzugsstreurichtung in a), das Sinogramm mit Texturmuster A in b) und das Sinogramm mit Texturmuster B in Teil c). In d) sind die winkelabhängigen Vorzugsrichtungen der Texturkonfigurationen visualisiert: Keine Textur (Konstante, schwarz), Walztextur A (Sinus, blau) und Einkristall-Textur B (Peaks, rot).

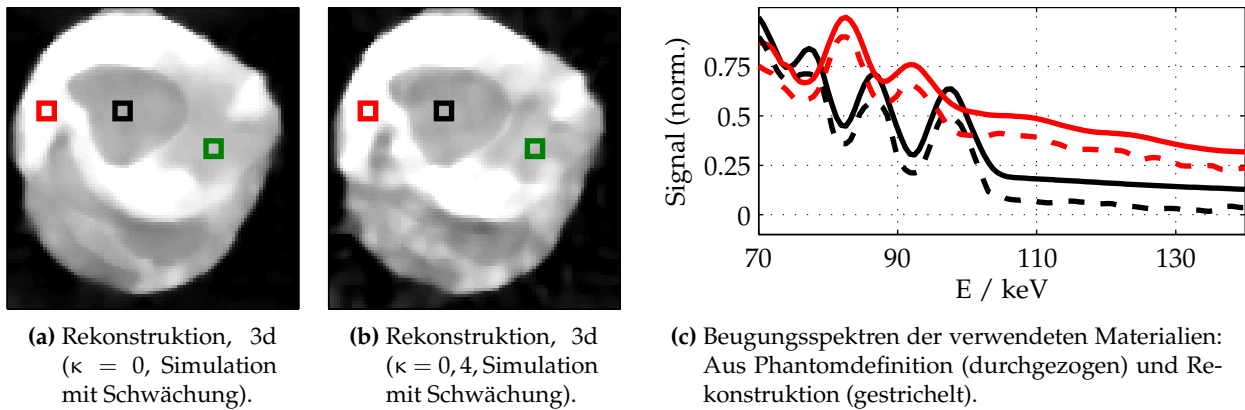


Abbildung 60: Rekonstruktionen zur Untersuchung der Auswirkung des Texturmusters A: Teil a) zeigt die 3d Rekonstruktion (Summe aller Energiekanäle) des realen Phantoms bei $\kappa = 0$, Teil b) für den Fall $\kappa = 0,4$ bei 10^5 simulierten Quanten. Als Materialien werden PTFE (rot), PMMA (schwarz) und PVC (grün) verwendet. Die aus den farblich markierten Bereichen (5×5 Pixel) extrahierten Spektren sind in c) dargestellt (Auswahl). Zur besseren Unterscheidbarkeit sind die Spektren vertikal versetzt geplottet.

Die mit einer vorhandenen Vorzugsrichtung einhergehenden Veränderungen der Sinogramme - also die Eingabedaten des Rekonstruktionsalgorithmus - lassen sich prinzipiell als „starkes“ Rauschen interpretieren, welches jedoch vom typisch Poisson-verteilten Quantenrauschen abweicht. Im Falle der ART basierten Rekonstruktion unter Verwendung der Kaczmarz-Methode sind die Auswirkungen von stark texturierten Proben auf die CSCT-Rekonstruktionsgüte in [72, S. 48 ff.] untersucht worden. Zur Untersuchung der Auswirkungen bei dem in dieser Arbeit verwendeten Algorithmus sollen vereinfacht hypothetische Texturierungen verwendet werden, um die Fälle realer Vorzugsorientierungen nachzustellen. Dazu werden zwei Textur-Modelle, welche die Abweichungen von isotroper Streuung beschreiben und sich durch ihre Winkelcharakteristik unterscheiden, verwendet. In Abbildung 59 d) sind die Winkelverteilungskurven der beiden „Texturmodelle“ gezeigt und dem Fall isotroper Streuung (schwarz) gegenübergestellt. Eine Vorzugsorientierung, wie sie zum Beispiel in gewalzten Blechen auftritt, soll durch Modell A (blaue Kurve) mit einem harmonischen Kurvenverlauf nachgestellt werden. Einkristalline Anteile in der Probe hingegen führen zu Peak-artigen Intensitätsschwankungen, bzw. zu einer diskreten Abstrahlungscharakteristik, wie in Modell B (rote Kurve) angenommen. Für die Studie wird das Untersuchungsphantom analog zum vorangegangenen Abschnitt verwendet, lediglich das Material PMMA wird mit einer nicht-isotropen Streukurve versehen. In den Teilabbildungen a) - c) ist das Sinogramm des originalen Phantoms den beiden Sinogrammen der texturierten Proben gegenübergestellt.

Die Rekonstruktionen mit Hilfe des Sinogramms aus Teilabbildung b), d.h. Texturmodell A, sind in Abbildung 60 gezeigt. Teil a) und b) der Abbildung zeigen die Rekonstruktionen bei Sparsity Werten von $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,4$. Punktförmige Objekte im Phantom, welche ein derartiges Streuverhalten aufweisen, führen zu gewöhnlichen Streifenartefakten im rekonstruierten Bild. Da in dem untersuchten Fall das komplette Material das beschriebene Texturverhalten aufweist, äußert sich die Überlagerung der Artefakte optisch in einem erhöhten Grundrauschen in der Rekonstruktion. Bei $\kappa = 0$ ist der Unterschied lediglich geringfügig sichtbar, bei $\kappa = 0,4$ ist jedoch bereits eine deutliche Abnahme der Rekonstruktionsqualität aufgrund des erhöhten Grundrauschens festzu-

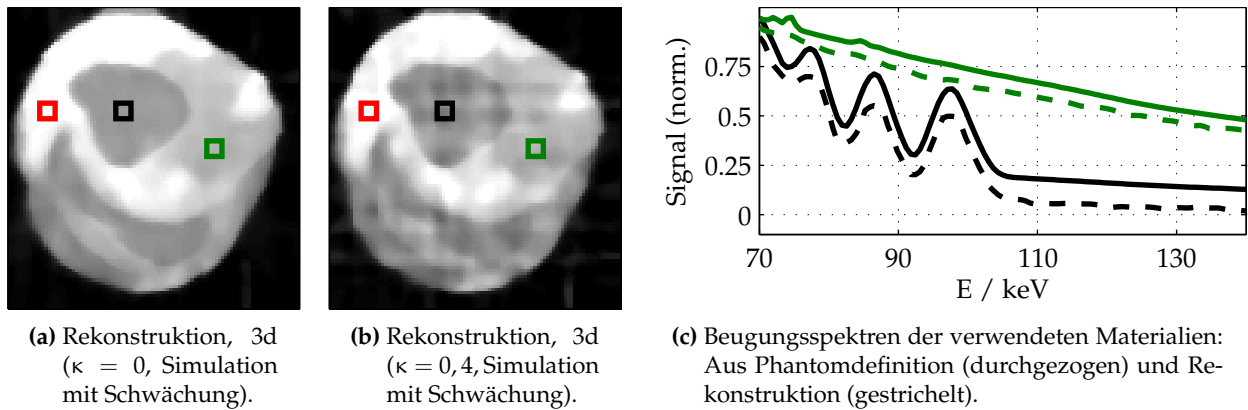


Abbildung 61: Rekonstruktionen zur Untersuchung der Auswirkung des Texturmusters B: Teil a) zeigt die 3d Rekonstruktion (Summe aller Energiekanäle) des realen Phantoms bei $\kappa = 0$, Teil b) für den Fall $\kappa = 0,4$ bei 10^5 simulierten Quanten. Als Materialien werden PTFE (rot), PMMA (schwarz) und PVC (grün) verwendet. Die aus den farblich markierten Bereichen (5×5 Pixel) extrahierten Spektren sind in c) dargestellt (Auswahl). Zur besseren Unterscheidbarkeit sind die Spektren vertikal versetzt geplottet.

stellen. Dieses erhöhte Rauschen kann mit dem Auftreten von Geisterpeaks einhergehen.

Für das Einkristall-Texturmodell (B) sind die Rekonstruktionen des Sinogramms aus Abbildung 59 c), in Abbildung 61 dargestellt. Erneut sind in Teil a) und b) der Abbildung die Rekonstruktionen für $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,4$ gezeigt. Punktförmige einkristalline Objekte führen bei der Rekonstruktion zu diskreten Streifen im rekonstruierten Bild. Dabei korreliert die Streifenbildung mit den Richtungen, in denen der Einkristall in Reflektionsstellung steht. Für großflächige einkristalline Objekte überlagern sich die diskreten Streifen, so dass sich Gitternetz-Artefakt in der Rekonstruktion ausbildet. Für den Fall $\kappa = 0$ ist dieses noch nicht sichtbar, bei $\kappa = 0,4$ tritt es jedoch deutlich zum Vorschein. In den rekonstruierten Spektren treten Geisterpeaks dennoch nur stark unterdrückt auf.

EXPERIMENTELLER AUFBAU

In diesem Kapitel wird der experimentelle Aufbau des kombinierten EDXRD-CBCT-Systems vorgestellt. Es werden die elementaren Komponenten der Röntgenbeugungsanlage beschrieben und spezifiziert. Die für die Datenakquisition verwendete Hardware-Architektur sowie die entwickelte Software werden präsentiert. Außerdem wird auf die Methode der Datenverarbeitung und die hierfür erstellte Matlab-basierte Software eingegangen.

5.1. Das kombinierte EDXRD-CBCT-System

Das aufgebaute kombinierte EDXRD-CBCT-System ist schematisch in Abbildung 62 dargestellt. Der Grundaufbau des reinen Röntgenbeugungssystems für punktuelle Beugungsmessungen ist mit Hilfe von X95-Aluminium-Profilen realisiert und wurde bereits im Rahmen vergangener Arbeiten durchgeführt. Für nähere Informationen vgl. beispielsweise [131]. Weitere Details zu den Bemaßungen der Anlage sind in Anhang A zu finden.

Als gemeinsame Komponenten, d.h. Hardware, welche in allen Akquisitionsmodi verwendet wird, sind Röntgenröhre und Probenmanipulator zu nennen. Als Röntgenquelle wird eine Philips MRC-200 Röhre mit ölgekühlter Wolfram-Drehanode eingesetzt. Die Röhre liefert eine maximale Dauerleistung von 4,2 kW bei 160 kV und 26 mA. Die Brennfleckgröße beträgt $0,6 \text{ mm} \times 0,9 \text{ mm}$. Zur Probenmanipulation wird ein motorisierter xyz-Verschiebetisch eingesetzt, mit welchem sich das zu untersuchende Objekt innerhalb des Strahlengangs mit einer Positioniergenauigkeit von 0,05 mm in xy-Richtung und 0,1 mm in z-Richtung über eine Länge von 200 mm bewegen lässt. Zur Probenrotation ist zusätzlich an der z-Achse ein motorisierter Präzisionsdrehtisch (OWIS DMT 100) befestigt. Die Positioniergenauigkeit beträgt $0,01^\circ$. Zur Probenhalterung wird ein zentrisch spannendes Vierbackenfutter eingesetzt. Um bequem zwischen CSCT- und CBCT-Modus wechseln zu können, sind sowohl der Primärkollimator als auch der digitale Flatpaneldetektor (FPD) auf motorisierten Lineareinheiten in y-Richtung beweglich gelagert. Beide Komponenten können individuell aus bzw. in den Strahlengang gefahren werden.

5.1.1. CSCT-Modus

Im CSCT-Modus befindet sich der Primärkollimator im Strahlengang und der Flatpaneldetektor außerhalb. Der Primärkollimator zur Nadelstrahlerzeugung besteht dabei aus zwei Kreisblenden

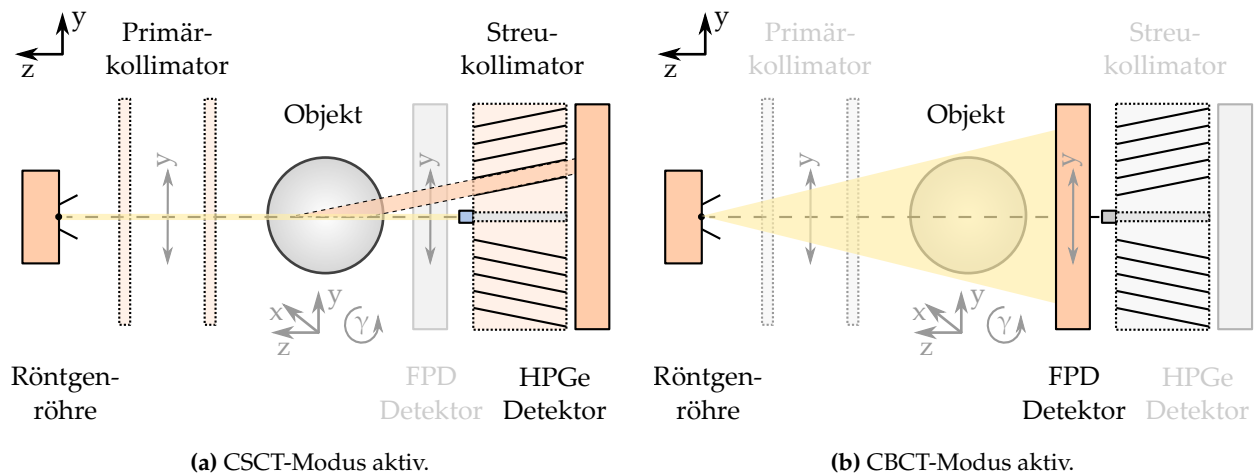


Abbildung 62: Schematischer Aufbau der kombinierten EDXRD-CBCT-Röntgenbeugungsanlage. Primärkollimator und Flatpaneldetektor sind auf motorisierten Lineareinheiten (Bewegung y-Richtung) montiert, sodass ein schneller Wechsel zwischen beiden Akquisitionsmodi erfolgen kann.

aus Wolfram. Es stehen 5 mm dicke Primärblenden mit einem Innendurchmesser von 0,3 – 3,0 mm zur Verfügung. Im CSCT-Beugungsmodus wird standardmäßig eine Konfiguration mit Blendenöffnungen von 2,0 mm (oben) und 0,8 mm (unten) benutzt. Im CBCT-Transmissionsmodus (Zentralstrahl) werden beide Blendenöffnungen auf 0,3 mm verkleinert. Nach der Primärkollimation werden die am Messobjekt gebeugten Photonen durch einen eigens aus Blei gefertigten Multi-Lamellenkollimator selektiert. Der Kollimator besitzt 13 Streukanäle und hat einen Öffnungswinkel von 3,5°. Für Transmissionsmessungen besitzt er eine Zentralbohrung, welche im Beugungsmodus mit Hilfe eines Bleistopfers verschlossen wird. Die Lamellenwandung beträgt 0,25 mm und der Lamellenabstand 0,6 mm bei einer Bauhöhe von 175 mm. Um den Abstand der einzelnen Lamellen voneinander zu realisieren, wurden Abstandhalter aus Kapton eingesetzt. Die Performance des Kollimators wurde mit Hilfe eines sog. „VOI-Scan“ ermittelt (vgl. Abschnitt 5.2). Die erzielbare Linienauflösung liegt bei 6 %. Die energiedispersive Detektion der Quanten geschieht mit einem stickstoffgekühlten hochreinen Germanium-Detektor (Eurisyss EGP 2000-20-TR-X). Gewöhnliche NIM Elektronik (Shaping Amplifier + ADC) und eine in einem Akquisitions-PC befindliche Vielkanalanalysatorkarte (ADC) erlauben die Akquisition von Röntgenspektren mit 2048 Kanälen und einer Energieauflösung von $\approx 1,2\%$ bei einer Zählrate von bis zu 10 kHz.

Durch dieses Setup lassen sich im EDXRD-Modus Einzelmessungen (auch zeitaufgelöst), Raster-, Kontur- und CSCT-Scans ausführen. Die Akquisition der CSCT-Scans geschieht dabei nach dem Aufnahmeschema eines CT-Systems der 1. Generation: Die Probe wird in Einzelschritten entlang der y-Richtung verfahren und Spektren in den einzelnen Positionen aufgenommen (Parallelprojektion). Anschließend wird der Drehtisch um ein vorgegebenes Inkrement rotiert und eine weitere Parallelprojektion aufgezeichnet. Dieser Vorgang wird solange wiederholt bis ein Gesamtrationswinkel von 180° erreicht ist.

5.1.2. CBCT-Modus

Im CBCT-Modus befindet sich der Flatpaneldetektor innerhalb des Strahlengangs und der Primärkollimator außerhalb. Aufgrund des fehlenden Primärkollimators wird der Flatpaneldetektor (Thales SiX 650HD, Pixelgröße 150 μm , ADC 14 bit) komplett vom Strahlenkegel der Röntgenröhre ausgeleuchtet. Der Detektor besitzt einen CsI-Szintillator und wird mit einem 1,0 mm starken Eisenfilter betrieben. Das Auslesen der Detektorbilder wird via CameraLink-Anschluss über einen Framegrabber im Datenakquisitions-PC ausgeführt.

Messungen zur Bestimmung der Systemperformance wurden mit Hilfe eines Auflösungsphantoms durchgeführt. Bei einer geometrischen Vergrößerung von 1, 10 und vergleichsweise geringen Objektgrößen (ca. 50 mm) lassen sich Strukturen von bis zu 150 μm auflösen. Detaillierte Informationen zur Charakterisierung und Spezifizierung des CBCT-Systems sind in [179] zu finden.

Als Akquisitionsmodi sind Einzelaufnahmen und (Video-)Sequenzen mit Bildfrequenzen von 0,25–300 Hz möglich. Für einen CBCT-Scan werden solange sukzessive Einzelaufnahmen und Probenrotationen mit einem vorgegebenen Winkelinkrement durchgeführt bis eine vollständige Umdrehung erreicht wird.

5.2. Datenakquisition

Eine schematische Darstellung zur Übersicht des Aufbaus von Anlagensteuerung und Datenakquisition ist in Abbildung 63 gezeigt. Im Folgenden wird kurz auf die in der Abbildung gezeigten Komponenten eingegangen und die Abkürzungen erläutert: Die komplette Datenakquisition und

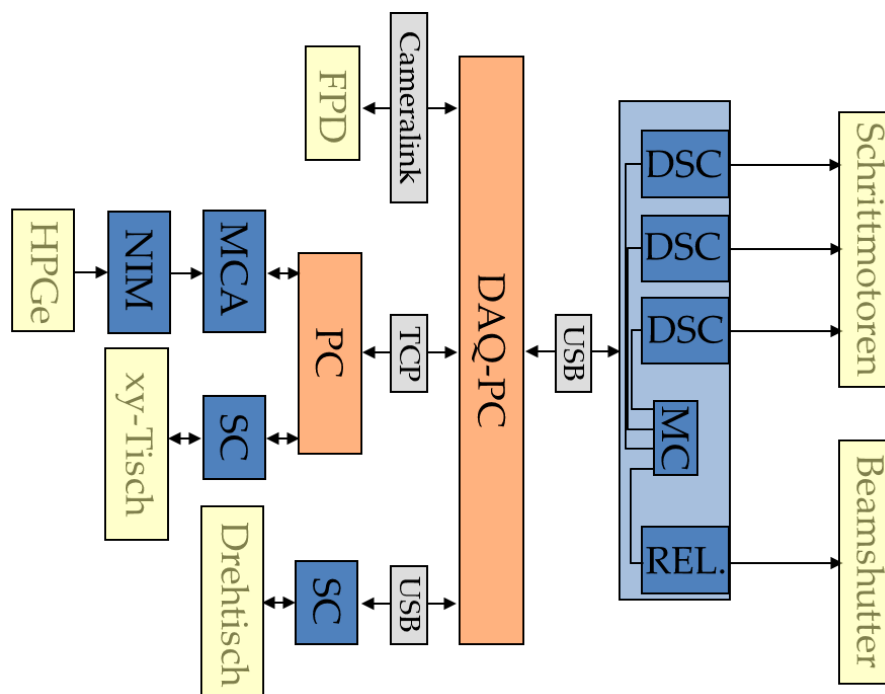


Abbildung 63: Schematische Darstellung zur Übersicht des Aufbaus von Anlagensteuerung und Datenakquisition.

Steuerung der Anlage wird über einen zentralen Computer (DAQ-PC) geregelt. Der Bildeinzug des digitalen Flatpaneldetektors (FPD) wird über eine im DAQ-PC befindliche Framegrabber-Karte via CameraLink-Anschluss realisiert. Die Aufnahme der Röntgenspektren im EDXRD-Modus geschieht über einen weiteren Computer (PC) mit Hilfe einer MCA-Karte. Um die Steuerung der Datenakquisition und den Datentransfer vom DAQ-PC aus ermöglichen zu können, wurde eine Software entwickelt, die diese Funktionen durch Fernsteuerung via TCP/IP Kommunikation realisiert. Zur Programmierung der Servomotor-Steuerungen (SC) des xy-Tisches (Newport Motion Master 2000) und des Rotationstisches (OWIS PS 10) werden die Softwarebibliotheken der Gerätehersteller benutzt. Die restlichen Linearachsen (z-Achse, FPD-Verschiebung, Primärkollimator-Verschiebung) werden über Schrittmotoren im Open-Loop Betrieb verfahren. Zur Regelung der Motoren werden digitale Schrittmotorsteuerungen (Leadshine DM442) eingesetzt. Die Schrittmotorsteuerungen (DSC) werden über einen eigens programmierten Microcontroller (Arduino Leonardo) angesteuert, welcher per USB mit dem DAQ-PC kommunizieren kann. Der Microcontroller (MC) erlaubt es zudem, zusätzliche Relais (REL) zu steuern, um beispielsweise einen optionalen Beamshutter betreiben zu können.

5.2.1. Software „EasyTomography“

Um die Datenakquisition und Steuerung der Anlage mit einem einzelnen Programm regeln zu können, wurde die im Rahmen vergangener Arbeiten [180][72] entwickelte C#-Software (für Bildeinzug u. Drehtischsteuerung) um die o.g. Funktionen maßgeblich erweitert. Das entstandene Tool „EasyTomography“ ermöglicht es dem Benutzer beliebig frei konfigurierbare Scanprogramme abzubilden und die Anlage zu steuern. Ein Screenshot der Software ist in Abbildung 64 gezeigt.

5.2.2. Durchführung von Scans

Im EDXRD-Modus wurden alle Beugungsmessungen bei 150 kV und 10 mA durchgeführt. Die zu jeder Beugungsmessung ebenfalls aufgenommenen Transmissionsspektren wurden mit 150 kV bei einem an die Probe angepassten Röhrenstrom aufgezeichnet, um Pile-Up Effekte der Ausleselektronik zu verringern (max. Zählrate ca. 10 kHz). Für eine zuverlässige Energie-Kanal-Zuordnung wurden regelmäßig Kalibrierungsmessungen mit Hilfe der Radioisotope ^{241}Am und ^{57}Co durchgeführt. Hierbei konnte immer die Energieauflösung des Detektors kontrolliert werden.

Zur Bestimmung des für die Rekonstruktion benötigten VOI-Profiles der Anlage wurde ein 1 mm starkes Eisenblech im Strahlengang platziert und schrittweise entlang der z-Achse verschoben (linearer z-Scan mit 1 mm Schrittweite). Das Ergebnis eines derartigen VOI-Scans ist in Abbildung 65 dargestellt. Aus dem VOI-Profil lässt sich so eine mögliche Dejustierung der Anlage ablesen. In diesem Fall würde die Peakposition des Eisen (110) Reflexes ebenfalls eine z-Positionsabhängigkeit aufweisen. Aus der Halbwertsbreite des Beugungspeaks kann zudem die spektrale Auflösung der Anlage zu 6 % ermittelt werden.

Im CBCT-Modus wurden die Strahlparameter individuell an die jeweils zu untersuchenden Proben angepasst. Die geometrische Vergrößerung betrug $1,10\times$, die Anzahl der pro Projektionswinkel aufgenommenen Bilder typischerweise 1 – 5. Der Detektor wurde regelmäßig einer Offset- und Gainkalibrierung unterzogen. Dabei wurde auch die Gültigkeit der Defect-Map kontrolliert.

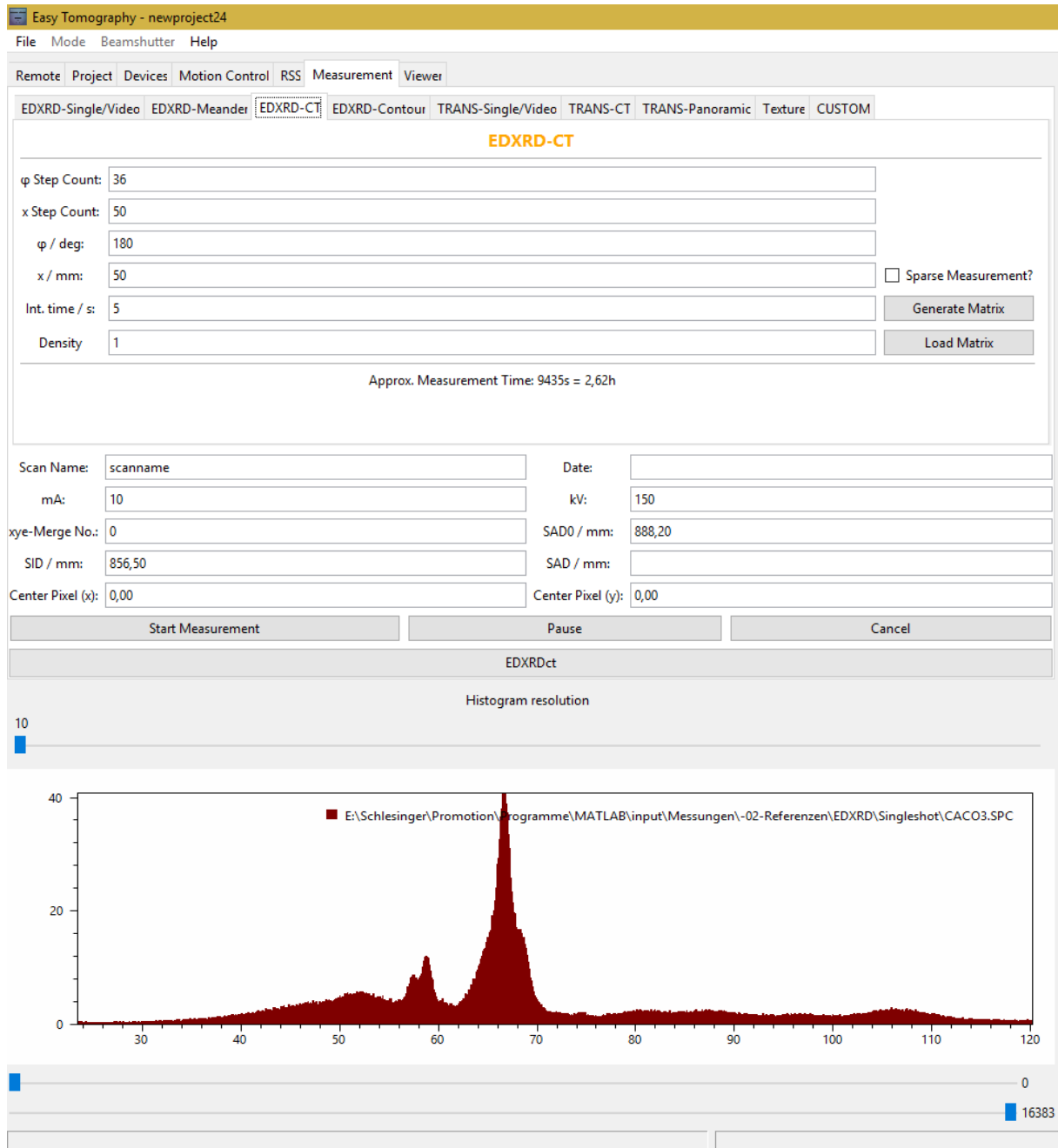


Abbildung 64: Screenshot des C#-Programms „EasyTomography“ zur Anlagensteuerung und Datenakquisition.

5.3. Datenverarbeitung und Rekonstruktion

Zur Verarbeitung, Rekonstruktion und Visualisierung der Messdaten wurde die Auswertesoftware „mEasyTomography“ in MATLAB entwickelt. Ein Screenshot der graphischen Benutzeroberfläche ist in Abbildung 66 gezeigt. Mit dem Programm lassen sich die mit EasyTomography erstellten Dateien / Messungen einlesen und alle relevanten Auswertungen durchführen.

Lediglich die FDK-Rekonstruktion der CBCT-Scans wird mit einem anderen Programm durchge-

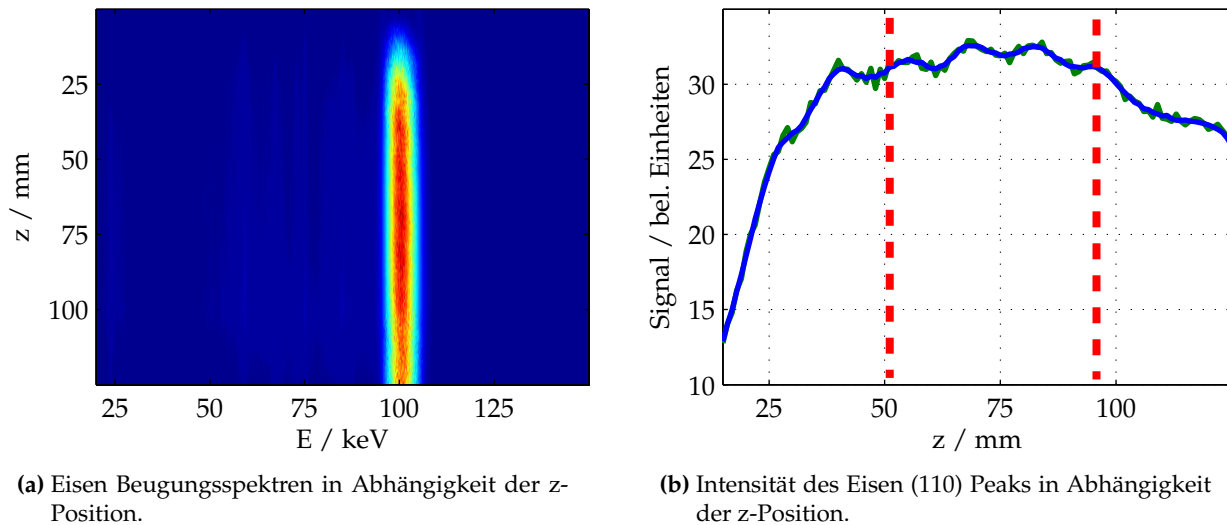


Abbildung 65: Linearer Scan in z-Richtung zur Bestimmung des VOI-Profiles der Beugungsanlage. In a) sind die kompletten Beugungsspektren in Abhängigkeit der z-Position dargestellt, während in b) lediglich die Peakintensität des Eisen (110) Reflexes höhenaufgelöst geplottet ist. Der im Rahmen dieser Arbeit verwendete Arbeitsbereich ist rot markiert dargestellt.

führt: Hierzu wird das freie FDK-Rekonstruktionstoolkit „Platimatch“ verwendet[181]. Die mit dem Flatpaneldetektor aufgenommenen radiographischen Bilder müssen vor der Rekonstruktion präprozessiert werden. Es werden die mehrfach aufgenommenen Bilder gemittelt und die Projektionsbilder $p(\gamma, x', y')$ durch Normierung und anschließende Logarithmierung berechnet. Platimatch generiert aus den Projektionsdaten FDK-Rekonstruktionen im MHA Format, welche sich mit „mEasyTomography“ einlesen lassen. Aus dem dreidimensionalen MHA Datensatz kann das für die CSCT-Rekonstruktion relevante Schichtbild extrahiert, herunterskaliert und zum Dictionary Learning verwendet werden.

Für die Prozessierung der CSCT-Daten werden zunächst die Streu- und Transmissionssinogramme geladen. Anschließend wird eine Anpassung der Energiekanalbreite ausgeführt und ein Threshold bzw. Upholding entlang der Energieachse durchgeführt. Dann wird mittels Division das normierte Beugungssinogramm berechnet, welches zur Rekonstruktion verwendet wird. Optional lassen sich vor der Rekonstruktion noch Filter auf den 3d-Sinogrammdatensatz anwenden. Die Sinogramme können anschließend mit dem FISTA-basierten Algorithmus rekonstruiert werden. Für die OMP und K-SVD Berechnung bei der Rekonstruktion wird eine spezielle schnelle Implementierung benutzt[182][142].

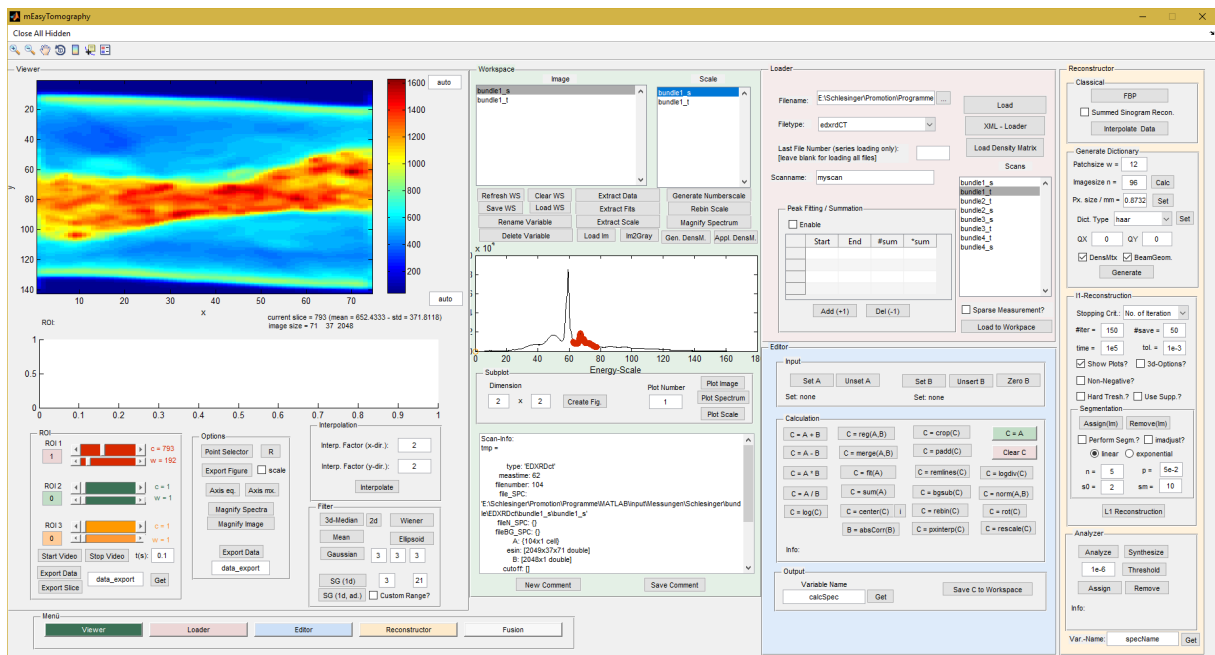


Abbildung 66: Screenshot des MATLAB-Programms „mEasyTomography“ zur Verarbeitung, Rekonstruktion und Visualisierung der Messdaten.

ERGEBNISSE

In diesem Kapitel werden Rekonstruktionen diverser Scan-Objekte vorgestellt, welche mit Hilfe realer Messdaten unter Verwendung des präsentierten Rekonstruktionsalgorithmus gewonnen wurden. Dazu gehören unter anderem Rekonstruktionen Phantom-basierter Messungen zur quantitativen Bestimmung von Bildqualitätsparametern. Anhand von Anwendungsbeispielen zur zerstörungsfreien Untersuchung, wie der Erkennung unbekannter Substanzen bei geringen Teilvolumeneffekten oder der orts aufgelösten Darstellung des Ladungszustands kommerziell erhältlicher zylindrischer Lithium-Ionen Akkumulatoren, wird das Potential der materialelektiven Bildgebung demonstriert.

6.1. Phantombasierte Rekonstruktionen

Gegenstand dieses Abschnitts sind phantombasierte Rekonstruktionsstudien zur experimentellen Charakterisierung von Systemeigenschaften. Es werden insbesondere Orts- bzw. Spektralauflösung, Dynamik und Artefaktbildung des Systems untersucht. Bei der Durchführung der Studien haben die Phantome sequentiell einen CBCT- und einen CSCT-Scan durchlaufen. Dabei wurden die Objekte stets derart im Scanner platziert, dass die zu rekonstruierende CSCT-Schicht bei der CBCT-Aufnahme bereits im Zentralstrahl lag. Entsprechend kann die Registrierung des CBCT-Bildes lediglich durch eine Umskalierung erfolgen. Die benötigten CBCT-Scans wurden mit einer Winkelschrittweite von 1° durchgeführt, pro Projektion wurden jeweils 5 Bilder aufgenommen und gemittelt. Die geometrische Vergrößerung beträgt 1,10, die Strahlparameter sind phantomabhängig gewählt worden. Zur Rekonstruktion wird der FDK Algorithmus verwendet, die rekonstruierte Voxelgröße beträgt $(0,15 \text{ mm})^3$.

Die anschließenden CSCT-Scans wurden mit der Standard-Primärblenden-Konfiguration (2,0 mm oben, 0,8 mm unten) bei den Strahlparametern 150 kV / 10 mA durchgeführt. In Höhe der Probenmitte beträgt die FWHM basierte Strahlbreite damit etwa 1 mm. Die Anzahl der verwendeten Translationsschritte wurde abhängig von der Objektgröße gewählt. Für die Winkelschritte wurde im Standardfall analog zu den simulationsbasierten Studien $\delta_\gamma = 5^\circ$ gesetzt. Jede CSCT-Messung besteht aus der Akquisition eines Beugungs- und eines Transmissionssinogramms. Aus diesen Sinogrammen wird via Division der für den Rekonstruktionsalgorithmus benötigte normierte Eingabedatensatz berechnet.

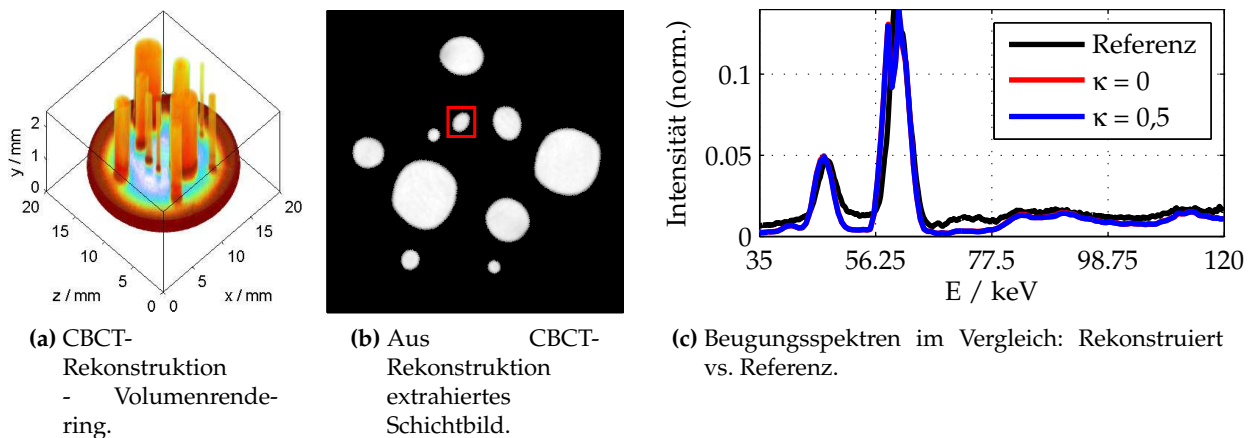


Abbildung 67: Untersuchungen zur Systemauflösung: Teil a) zeigt die 3d CBCT-Rekonstruktion des Phantoms, Teil b) das für die CSCT-Rekonstruktion extrahierte Schichtbild. Die rote Markierung kennzeichnet den Bereich zur Extraktion von Beugungsspektren nach der CSCT-Rekonstruktion. Die rekonstruierten Spektren aus diesem Bereich sind in Teil c) vergleichend mit einem Referenzspektrum gezeigt.

6.1.1. Bestimmung der Ortsauflösung: Ein-Material-Phantom

Ziel der folgenden Betrachtung ist es, die Ortsauflösung des Systems mit Hilfe einer Linienbildfunktion zu charakterisieren. Um Artefakten aufgrund von Aufhärtung oder nicht-isotroper Streuung vorzubeugen, wird ein pulverbasiertes „Einmaterial“-Phantom verwendet. Das Phantom besteht aus feinkörnigem SiO_2 Pulver, welches sich innerhalb von dünnwandigen (< 1 mm) und amorphen Kunststoffröhren mit unterschiedlichen Durchmessern befindet. Dabei sind Durchmesser von 1 – 2 – 3,5 – 6 bzw. 9 mm realisiert worden. Der geometrische Aufbau des Phantoms ist der Schichtrekonstruktion in Abbildung 67 b) zu entnehmen. Die CBCT-Projektionen des Phantoms wurden bei 85 kV Röhrenspannung und 2,1 mA Röhrenstrom aufgenommen. Die volumengereordnete dreidimensionale Rekonstruktion ist in Teil a) der Abbildung dargestellt.

Für die CSCT-Aufnahme wurden im Falle des Auflösungsphantoms abweichend 60, statt der üblichen 36 Winkelschritte, bei einer Translationsschrittweite von $n_{\delta y} = 1,0$ mm verwendet. Die Spektren der Sinogramme wurden jeweils mit einer Messzeit von 5 s bei einer maximal auftretenden integralen Zählrate von $4,3 \times 10^3$ Quanten pro Sekunde aufgenommen. Die normierten Sinogramme werden im Energiebereich von 35 – 120 keV für verschiedene Werte von κ rekonstruiert; der Fall $\kappa = 0$ entspricht einem kompletten Messdatensatz. Für Werte $\kappa > 0$ wird der aufgenommene Datensatz nachträglich reduziert. Die rekonstruierten Spektren aus einem gewählten Bereich des Phantoms sind in Teil c) der Abbildung 67 für die Fälle $\kappa = 0$ und $\kappa = 0,5$ vergleichend mit einem zuvor aufgenommenen Referenzspektrum des reinen SiO_2 Pulvers dargestellt. Es lassen sich nur geringe Unterschiede zwischen den Spektren erkennen.

In Abbildung 68 sind die rekonstruierten CSCT-Bilder bei verschiedenen Energien gezeigt. Im Fall $E = 120$ keV sind in Teilabbildung a) bzw. b) die Rekonstruktionen für die Fälle $\kappa = 0$ und $\kappa = 0,8$ - d.h. bei einer um 80 % reduzierten Anzahl an Messdaten - gegenübergestellt. Optisch unterscheiden sich die beiden Rekonstruktionen durch eine geringfügige Abnahme des Bildkontrastes in Abhängigkeit von der beobachteten Strukturgröße. Für den Fall $E = 42$ keV ist in Abbildung 68 c) eine Rekonstruktion für $\kappa = 0$ gezeigt. Bei dieser Energie weist das SiO_2 Spektrum un-

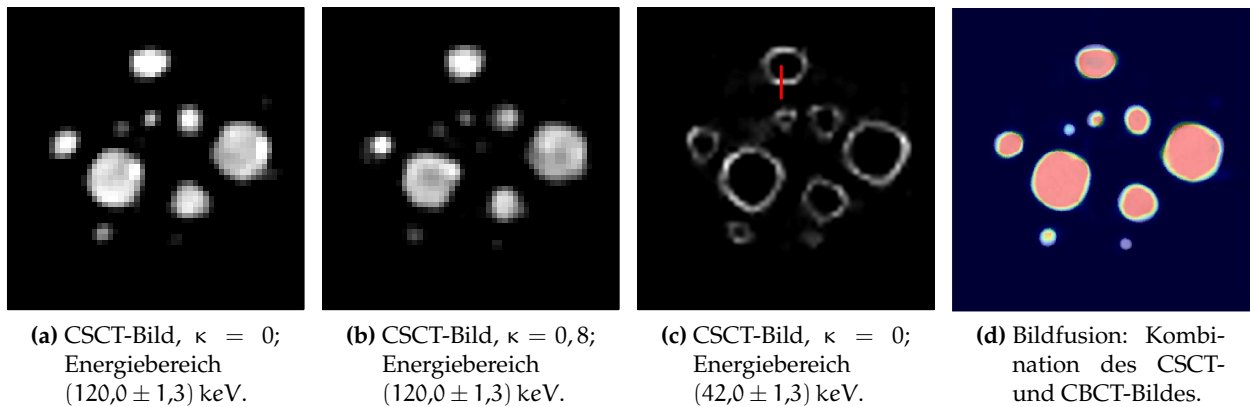


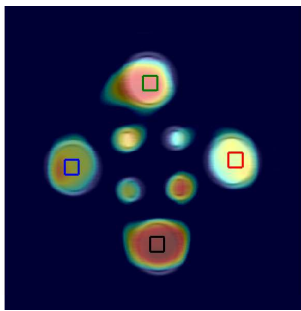
Abbildung 68: Rekonstruktionen zur Bestimmung der Systemauflösung: Teil a) und b) zeigen die CSCT-Rekonstruktionen bei $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,8$ bei $E = (120,0 \pm 1,3)$ keV. In Teil c) ist für $\kappa = 0$ die Rekonstruktion für den Fall $E = (120,0 \pm 1,3)$ keV abgebildet. Deutlich ist die verwendete Kunststoffummantelung der Pulverproben zu erkennen. Diese wird ebenfalls in der Bildfusion aus CBCT- und CSCT-Rekonstruktion in d) sichtbar.

ter dem verwendeten Streuwinkel keine signifikanten Peaks auf. Das verbleibende Signal stammt dementsprechend von den amorphen Kunststoffhüllen des Pulvers. Da die Wandung der Röhren hinreichend dünn ist ($< 0,1$ mm), lässt sich aus der Wandkontur die Linienbildfunktion des Systems entlang beliebiger Pfade abschätzen. Sowohl in horizontaler als auch in vertikaler Richtung (vgl. rote Markierung), weist die Verbreiterungskurve eine Halbwertsbreite von < 2 mm auf. Verglichen mit direkten XDI-Systemen (siehe Abschnitt 2.2) ist diese rekonstruktiv erzielte, „longitudinale“ Auflösung ca. um eine Größenordnung höher.

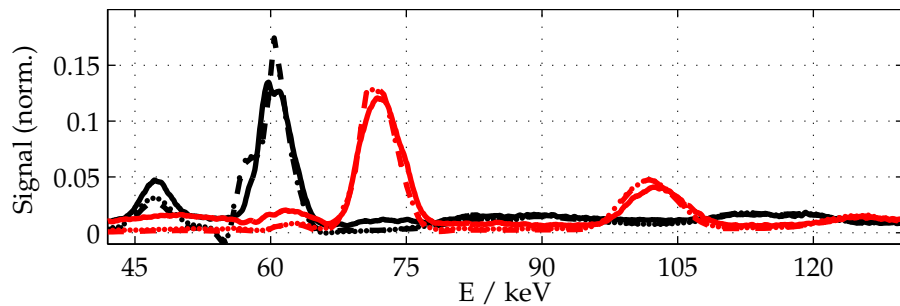
6.1.2. Bestimmung der Ortsauflösung: Mehr-Material-Phantom

Im Gegensatz zur vorangegangenen Bestimmung der Ortsauflösung mit Hilfe eines „Ein-Material-Phantoms“, wird nun die Bestimmung unter Verwendung eines „Mehr-Material-Phantoms“ beschrieben. Um erneut der Artefaktbildung aufgrund nicht-isotropen Streuverhaltens vorzubeugen, werden Pulverproben für diese Untersuchung eingesetzt. Dazu wurden vier verschiedene Pulver, bestehend aus SiO_2 , NaCl , CaCO_3 und einer Mischung aus gleichen Teilen SiO_2 und CaCO_3 , in dünnwandige Glasröhren gefüllt. Pro Material wurden zwei Glasröhren unterschiedlicher Durchmesser verwendet. Die Innendurchmesser der Röhren betragen 3,0 mm bzw. 8,0 mm, die Wandstärken 1,0 mm bzw. 1,5 mm. Die einzelnen Proben sind entsprechend Abbildung 69 a) auf den Eckpunkten eines Quadrates mit einer Kantenlänge von 26 mm bzw. 10 mm angeordnet.

Das CSCT-Sinogramm wurde mit 36 Winkelschritten bei einer Translationsschrittweite von $n_{\delta y} = 1,5$ mm aufgenommen und auf einem 40×40 Pixel großen Raster im Energiebereich von 40 – 135 keV für verschiedene Werte von κ rekonstruiert. Für $\kappa = 0$ werden dabei ca. 74 % und für $\kappa = 0,5$ etwa 37 % der Daten eines vollständigen Scans verwendet. Für jedes Spektrum wurde eine Aufnahmedauer von 5 s verwendet. Die maximal auftretende integrale Zählrate betrug $4,7 \times 10^3$ Quanten pro Sekunde. Teil b) der Abbildung 69 zeigt die rekonstruierten Spektren innerhalb eines selektierten Bereichs in der Rekonstruktion. Vergleichend zur Rekonstruktion mit $\kappa = 0$ (gestrichelte Linie) bzw. $\kappa = 0,5$ (gepunktet) ist ein für jedes Material zuvor einzeln aufgenommenes



(a) CSCT-Bild, $\kappa = 0,5$; Summe über alle Energien.



(b) Beugungsspektren im Vergleich: Rekonstruktion vs. Referenz. Zur besseren Unterscheidbarkeit sind die Spektren einzeln skaliert worden.

Abbildung 69: Bestimmung der Systemauflösung mit Hilfe eines Mehr-Materialien-Phantoms: Teil a) zeigt die CSCT-Rekonstruktion. Aus den markierten Bereichen werden die Spektren extrahiert. Für die unterschiedlichen Materialien SiO₂ (schwarz) und NaCl (rot) sind in b) diese Beugungsspektren dargestellt. Dabei ist für das jeweilige Material zum Vergleich ein Referenzspektrum (durchgezogene Linie), die Rekonstruktion mit $\kappa = 0$ (gestrichelte Linie) und die Rekonstruktion mit $\kappa = 0,5$ (gepunktet) geplottet.

Referenzspektrum (durchgezogene Linie) dargestellt.

Abbildung 70 zeigt beispielhaft rekonstruierte CSCT-Bilder bei unterschiedlichen Energien im Bereich von 59 – 110 keV für $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,5$. Bei $E = 59$ keV weist lediglich das SiO₂ Pulver, bzw. entsprechend vermindert die Pulvermischung, einen signifikanten Peak auf. Bei 67 keV ist hingegen nur das CaCO₃ Pulver samt der Pulvermischung sichtbar. Das NaCl Pulver lässt sich bei 76 keV im Bild gut von den restlichen Pulvern trennen. In diesem Energiebereich liefern allerdings auch die Glasröhrchen einen nicht zu vernachlässigenden Streubeitrag und sind damit im Bild als Kontur zu erkennen. Für das in der letzten Spalte gezeigte Bild wurde die Energie 110 keV gewählt. Hier überlagern sich die Peaks aller Materialien im Spektrum und sind folglich mit unterschiedlicher Intensität im Bild sichtbar.

Die rekonstruierten Bilder demonstrieren, dass sich auch bei einer Translationsschrittweite von $\delta_y = 1,5$ mm eine Ortsauflösung von 3 mm (Innendurchmesser der Röhrchen) erzielen lässt. Im Gegensatz zum konventionellen Transmissions-CT, lassen sich angrenzende Materialien besser in der Rekonstruktion voneinander trennen, wenn Spektralbereiche existieren, in denen sich die Beugungspeaks der Materialien nicht überlappen. Im Bereich dieser Energien kann das Untersuchungsobjekt dann als eine Zusammensetzung mehrerer „Ein-Material-Objekte“ interpretiert werden[69].

6.1.3. Rekonstruktion ausgewählter Flüssigkeiten

Die Detektion von Flüssigsprengestoffen unter Verwendung XDI-basierter Verfahren ist grundsätzlich möglich. Artefakte aufgrund eines nicht-isotropen Streuverhaltens sind nicht zu erwarten, es treten jedoch auch keine scharfen Bragg-Reflexe zur Materialunterscheidung auf. Als Unterscheidungsmerkmal der Flüssigkeiten dient dabei typischerweise die effektive Ordnungszahl der Materialien, welche beispielsweise mit Hilfe des sog. HETRA-Verfahrens („High Energy Tip Region Analysis“) ermittelt werden kann[183]. Ebenfalls ist der Einsatz des Verfahrens zur reinen

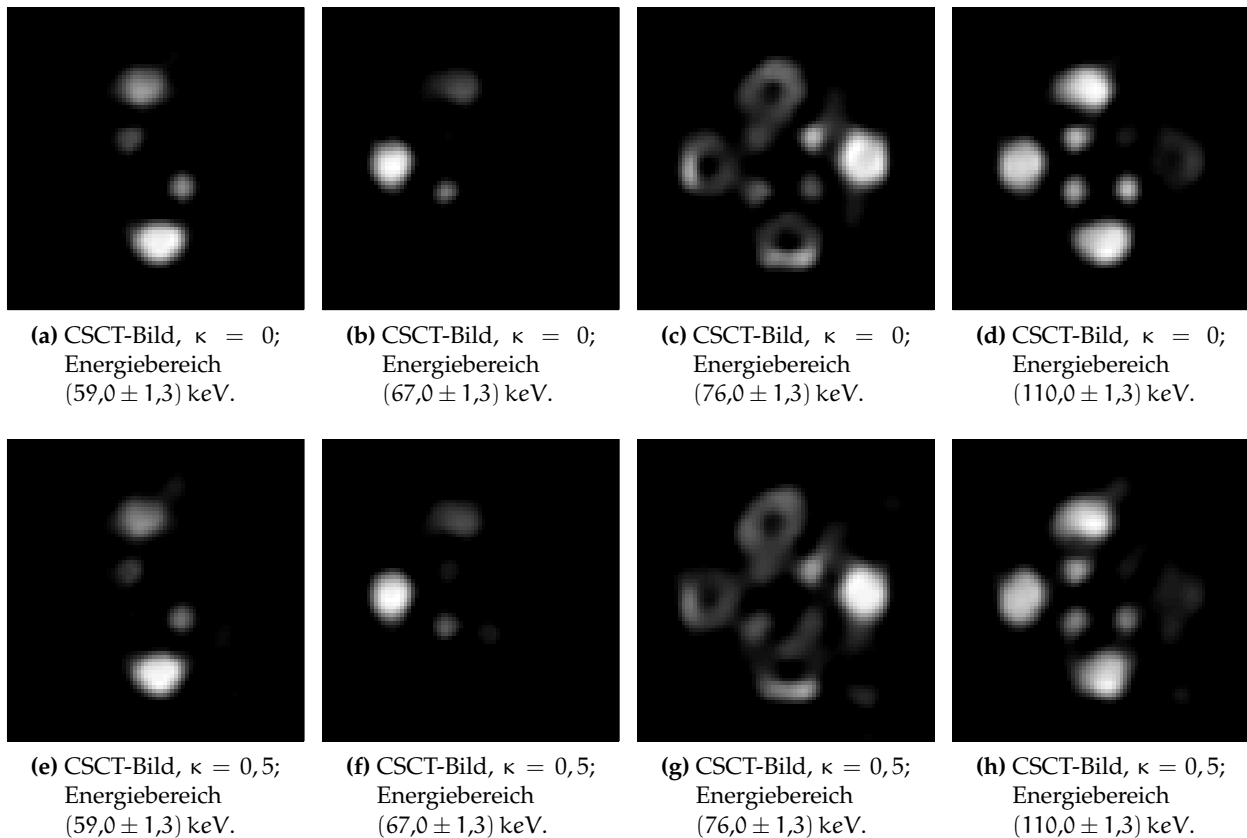


Abbildung 70: Rekonstruktionen des Mehr-Material-Phantoms zur Überprüfung der Systemauflösung: Die obere Zeile (a) - d)) zeigt CSCT-Rekonstruktionen bei verschiedenen Energien im Bereich von 59 – 110 keV bei $\kappa = 0$. Analog sind in der unteren Zeile die Rekonstruktion für den Fall $\kappa = 0,5$ abgebildet.

Unterscheidung zweier Flüssigkeiten denkbar. So lassen sich beispielsweise defekte Flugzeugtragflächen durch die Unterscheidung von Wasser- bzw. Kerosin-Einlagerungen im Bereich von Flugzeugteilen identifizieren[61].

Ziel der im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchung ist die Beurteilung der CSCT-basierten Erkennbarkeit von Wasser-fremden Flüssigkeiten geringer Volumina ($< 10 \mu\text{L}$). Hierzu werden die Fremdflüssigkeiten Kerosin, Ethanol und Isopropanol jeweils in dünnwandige Kunststoffröhrchen (Wandstärke ca. 0,2 mm) mit Innendurchmesser 3,0 mm gefüllt. Diese drei Röhrchen werden anschließend in einer „Matrix“ von 39 mit Wasser befüllten Röhrchen innerhalb eines Glasrohres (Innendurchmesser 23,1 mm, Wandstärke 1,0 mm) platziert. Die Anordnung der Röhrchen ist der Darstellung der CBCT-Rekonstruktion in Abbildung 71 a) zu entnehmen. Das extrahierte 2d-Schichtbild zeigt in Teil b) die durch den Kontrastunterschied bedingte Erkennbarkeit der Fremdflüssigkeiten. Diese sind jedoch nicht voneinander zu unterscheiden. Die Luftblasenbildung innerhalb einiger Wasserröhrchen ist ebenfalls in diesem Bild zu erkennen. Zuvor isoliert aufgenommene Referenzspektren sind in Teilabbildung c) dargestellt.

Die CSCT-Aufnahmen wurden mit 36 Winkelschritten bei einer Translationsschrittweite von $\delta y = 1,0 \text{ mm}$ durchgeführt und auf einem 80×80 Pixel großen Raster im Energiebereich von 35 – 95 keV für $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,8$ rekonstruiert. Im Fall $\kappa = 0$ werden ca. 58% und mit $\kappa = 0,8$

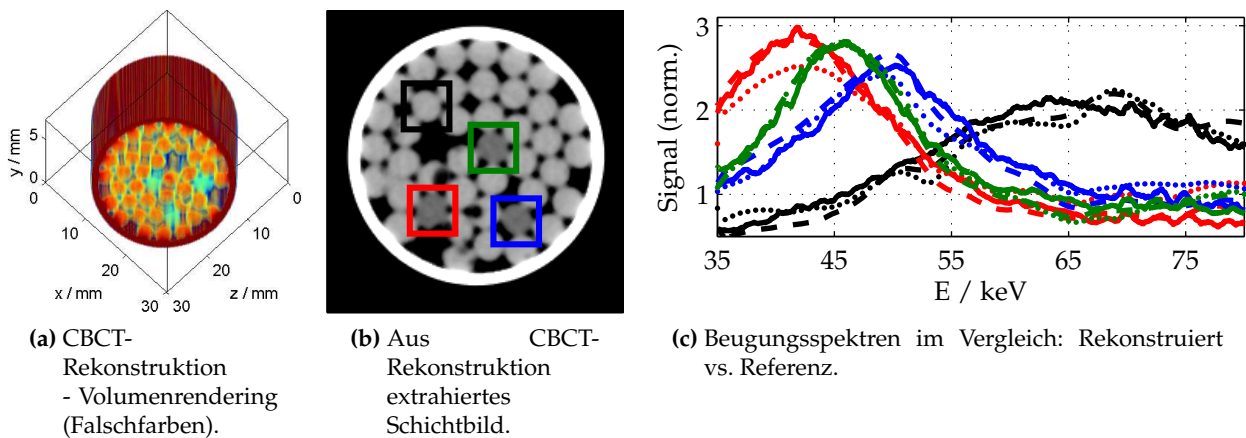


Abbildung 71: Untersuchung zur Unterscheidbarkeit von Flüssigkeiten: Teil a) zeigt die 3d CBCT-Rekonstruktion des Phantoms, Teil b) das für die CSCT-Rekonstruktion extrahierete Schichtbild. Die Markierungen kennzeichnen die Bereiche, welche zur Extraktion der Beugungsspektren nach der CSCT-Rekonstruktion verwendet werden. Diese Beugungsspektren sind für $\kappa = 0$ (gestrichelte Linie) und $\kappa = 0,5$ (gepunktete Linie) in Teil c) jeweils vergleichend mit separat bestimmten Referenzspektren (durchgezogene Linie) gezeigt. Dargestellt sind jeweils die Spektren von Kerosin (rot), Ethanol (blau), Isopropanol (grün) und Wasser (schwarz).

etwa 29% der Daten eines vollständigen FBP-Scans für die Rekonstruktion benutzt. Jedes Spektrum wurde mit einer Integrationszeit von 3 s aufgenommen, die maximal auftretende integrale Zählrate lag bei $1,8 \times 10^4$ Zählern pro Sekunde. In Teil c) der Abbildung 71 sind die rekonstruierten Spektren innerhalb der in Teil b) markierten Bereiche für die Fälle $\kappa = 0$ (gestrichelte Linie) bzw. $\kappa = 0,5$ (gepunktete Linie) gezeigt.

In Abbildung 72 sind Rekonstruktionen im Energiebereich von 35 – 65 keV für den Fall $\kappa = 0,8$ dargestellt. Teil a) zeigt die CSCT-Rekonstruktion bei $E = 35$ keV. Hier unterscheidet sich das Kerosin Spektrum deutlich von den Beugungsspektren der anderen Materialien. Das mit Kerosin gefüllte Röhrchen kann eindeutig identifiziert werden. Bei $E = 44$ keV überlagern sich die „Peaks“ von Kerosin, Isopropanol und Ethanol im Beugungsspektrum. Entsprechend sind in Teil b) der Abbildung alle nicht-Wasser-Flüssigkeiten im Bild sichtbar. Nichtsdestotrotz lassen sich die Materialien anhand der Streuintensitäten, d.h. anhand der Grauwerte im Bild, unterscheiden. Im Vergleich zu den nicht-Wasser-Flüssigkeiten, überwiegt ab 55 keV das Streusignal des Wassers im Spektrum. Daher sind in Teilabbildung c) die Bildbereiche mit Wasser hervorgehoben. Trotz der dichtgepackten Anordnung lassen sich die einzelnen Wassersäulen in den unterschiedlichen Röhrchen erkennen. Die verwaschenen Strukturen im Bereich der Wasser-Röhrchen in Bild a) bzw. b) entstehen durch die dünnen Wandungen der Kunststoff-Matrix. Die Rekonstruktionen zeigen, dass es möglich ist, ausgewählte Flüssigkeiten, wie beispielsweise Kerosin, Ethanol oder Isopropanol anhand ihres Streumusters von Wasser zu unterscheiden. Dies ist konnte sogar bei geringen Volumenmengen von $< 10 \mu\text{L}$ demonstriert werden.

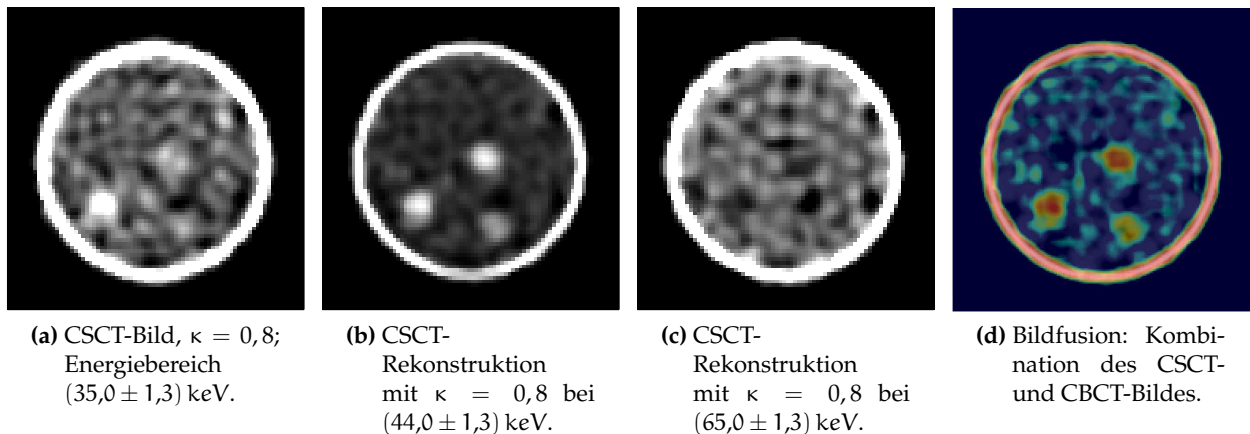


Abbildung 72: Rekonstruktionen zur Bestimmung der Erkennbarkeit von Fremdflüssigkeit: Die Teile a) - c) zeigen CSCT-Rekonstruktionen bei $\kappa = 0,8$ für Energien im Bereich 35 – 65 keV. In Teil d) ist die Bildfusion mit dem CBCT abgebildet.

6.1.4. Artefakte bei der CSCT-Rekonstruktion

In diesem Abschnitt wird die Entstehung von Artefakten in der CSCT-Rekonstruktion thematisiert. Dazu werden die Einflüsse von Artefakten, welche in den CBCT-Rekonstruktionen auftreten können, auf die CSCT-Rekonstruktionsgüte untersucht. Für diese Untersuchungen sind bewusst Phantome gewählt worden, welche das Auftreten der gewünschten Artefakte begünstigen. Neben Aufhärtungsartefakten sind ebenfalls die Auswirkungen von Ring-, Aliasing- und texturbedingten Artefakten Gegenstand der Studie.

Auswirkung von „Metallartefakten“

Die Entstehung von Artefakten aufgrund von mangelndem Photonenfluss oder aufgrund von Strahlungsaufhärtung wird unter dem Sammelbegriff „Metallartefakte“ zusammengeführt und zählt zu den häufig auftretenden Artefakten bei gewöhnlichen CT Verfahren[177][184]. Zur anwendungsnahen Untersuchung der Metallartefaktauswirkung auf die CSCT-Rekonstruktion wird als Phantom ein Planetengetriebe mit drei Zwischenrädern verwendet. Der Innenzahnkranz mit einem Außendurchmesser 44,0 mm besteht aus normalisiertem, ferritischem Stahl (C45) und weist 36 Zähne bei einem Innendurchmesser von 36,0 mm auf (Modul 1). Das mit einer 4 mm breiten Bohrung versehene Antriebsrad besteht aus austenitischem Edelstahl (1.4305) und hat einen Durchmesser von 12 mm bei 12 Zähnen. Die drei Zwischenräder sind analog zum Antriebsrad aufgebaut, zusätzlich allerdings mit einer 5 mm Bohrung ausgestattet und sind aus Kunststoff (POM).

Für die CBCT-Rekonstruktion wurden 360 Projektionen, bei jeweils 5 Aufnahmen pro Winkelschritt, mit Röhrenparametern von 125 kV und 2,0 mA aufgenommen. Abbildung 73 a) zeigt ein dreidimensionales Volumenrendering des untersuchten Phantoms mittels Falschfarbendarstellung. Innerhalb des Innenzahnkranzes werden deutliche Grauwertunterschiede zwischen den Zahn- und Vollmaterialbereichen des Rings sichtbar. Teilabbildung b) stellt die, für die CSCT-Rekonstruktion relevante, extrahierte Schicht dar. In dieser Darstellung sind aufgrund der Zahnstruktur des Getriebes deutliche Aliasing-Artefakte zusätzlich erkennbar. Die in c) farblich ein-

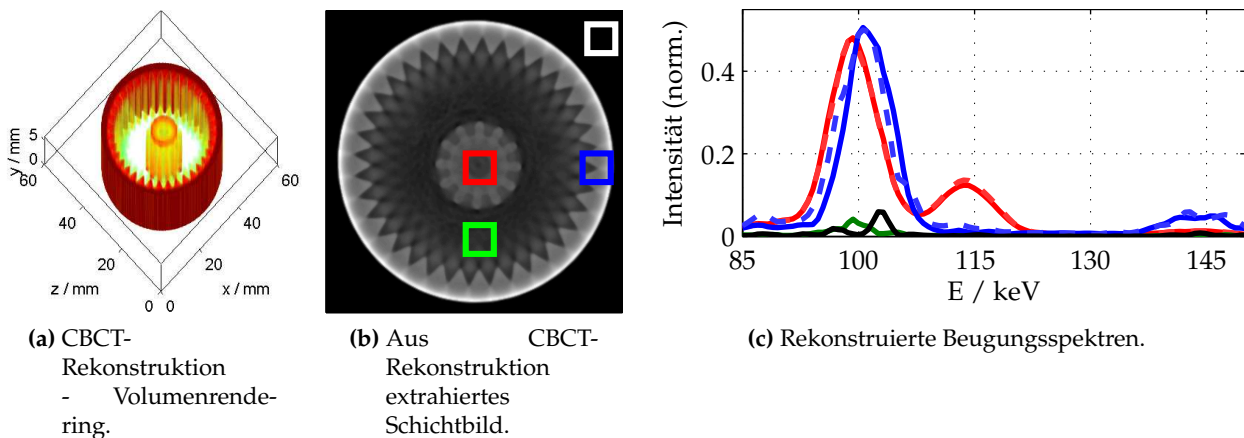


Abbildung 73: Untersuchung zur Auswirkung von Metall Artefakten auf die CSCT-Rekonstruktion: Teil a) zeigt die 3d CBCT-Rekonstruktion des Phantoms, Teil b) das für die CSCT-Rekonstruktion extrahierte Schichtbild. Die Markierungen kennzeichnen die Bereiche, aus denen die rekonstruierten CSCT-Spektren extrahiert werden. Diese sind in Teil c) für $\kappa = 0$ (durchgezogene Linie) und $\kappa = 0,5$ (gestrichelte Linie) geplottet. Die schwarze Kurve repräsentiert die weiße Markierung. Der Hintergrundbereich wurde gewählt, um die Geisterpeaks zu visualisieren.

gezeichneten Quadrate entsprechen den Bereichen, die für die Extraktion der Beugungsspektren benutzt worden sind.

Die für die CSCT-Rekonstruktion benötigten Sinogramme wurden mit einer Translationsschrittweite von $\delta y = 0,5$ mm bei 36 Winkelschritten aufgenommen. Die Rekonstruktion ist auf einem 96×96 großen Pixelrastrer (Pixelgröße 0,5 mm) in einem Energiebereich von 85 – 150 keV bei $\kappa = 0$ und $\kappa = 0,5$ durchgeführt worden. Bei $\kappa = 0,5$ werden für die Rekonstruktion lediglich 19 % der Daten eines vollständigen FBP Scans benötigt. Die Integrationszeit wird auf 4 Sekunden bei einer maximal auftretenden Zählrate von $2,5 \times 10^3$ Photonen pro Sekunde eingestellt. Die CSCT-Bilder der Rekonstruktion bei $\kappa = 0,5$ sind für unterschiedliche Energien in Abbildung 74 zu finden. Teil a) zeigt das integrale Streubild, sowohl der Innenzahnkranz als auch das Antriebsrad sind zu erkennen - die Zähne zeichnen sich ab. In Teilabbildung b) ist eine Darstellung bei $E = 114$ keV gewählt. Hier weist lediglich der austenitische Stahl einen Beugungspeak auf. Dementsprechend ist nur das Antriebsrad im Bild sichtbar. Bei $E = 145$ keV hingegen zeigt nur der ferritische Stahl einen Röntgenreflex. Daher ist in Abbildung c) der Innenzahnkranz deutlich wahrzunehmen. Ferner ist im inneren Bereich des Antriebsrads eine ringförmige Struktur zu erkennen. Als mögliche Ursache ist hier eine martensitische Umwandlung des Austenitgefüges zu nennen[185]. Exemplarisch ist in Teilabbildung d) die Überlagerung des CSCT-Bildes (Austenit) mit dem CBCT-Bild gezeigt.

Die Auswirkungen der Strahlhärtung bzw. die extreme Verminderung des Photonenflusses führen bei der CSCT-Rekonstruktion zur Artefaktbildung. Die Zwischenräder aus Kunststoff können aufgrund der starken Stahlwandungen (max. auftretende Weglänge ca. 15 mm) weder mit dem CBCT- noch mit dem CSCT-System gemessen werden. Der Grad der Artefaktbildung lässt sich im Fall der CSCT- Rekonstruktion mit dem Peak-zu-Hintergrund Verhältnis quantifizieren. Durch die entstehenden Geisterpeaks beträgt es hier lediglich 6,5 : 1.

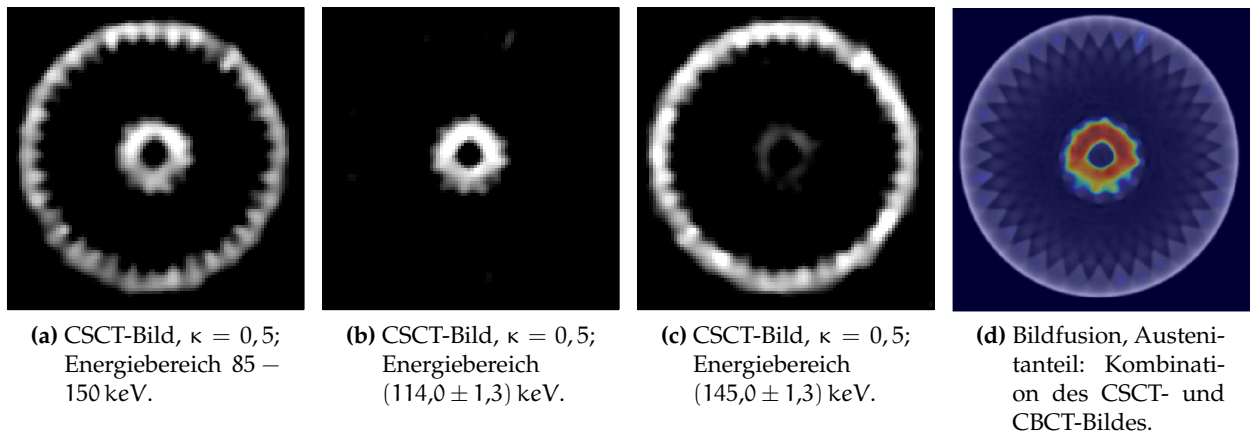


Abbildung 74: Auswirkungen Metall-Artefakt-behafteter CBCT-Daten auf die CSCT-Rekonstruktion: Die Teile a) - c) zeigen die CSCT-Rekonstruktionen bei unterschiedlichen Energien für $\kappa = 0,5$. In Teil a) ist die Rekonstruktion des integralen Streuspektrums, in b) der Ferrit-Anteil und in c) der Austenit-Anteil des Phantoms dargestellt. In Teilabbildung d) ist eine Überlagerung der CSCT-basierten Austenitanteildarstellung mit der CBCT-Rekonstruktion gezeigt.

Aliasing Effekte aufgrund scharfer Kanten

Aliasing Artefakte treten bei konventionellen CT Rekonstruktionen aufgrund einer Unterabtastung bei der Datenakquisition auf. Übersteigen die im Objekt auftretenden Ortsfrequenzen entsprechend die „Abtastfrequenz“, so werden Streifen-Artefakte im Bild sichtbar. Dieser Effekt ist daher besonders häufig an scharfen Kanten im Objekt zu beobachten[177]. Um das Aliasing in der CBCT-Rekonstruktion zu forcieren, wird ein aus einem Quader und einem Keil bestehendes Aluminium-Phantom mit glatten Kanten verwendet. Die in der CSCT-Schicht, einen rechteckigen ($30 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$) bzw. dreieckigen ($30 \text{ mm} \times 0 - 10 \text{ mm}$) Querschnitt aufweisenden Objekte (Abstand Außenkanten 25 mm) sind im Abstand von 25 mm (Außenseite zu Außenseite) in eine zylindrische Polystyrolform (Durchmesser 45 mm) eingebettet.

Es wurden 360 Projektionen mit jeweils 3 Aufnahmen pro Winkelschritt bei Röhrenparametern von 125 kV und $0,6 \text{ mA}$ gemessen. In Teil a) der Abbildung 75 ist eine 3d-Darstellung der FDK-Rekonstruktion gezeigt¹. Teilabbildung b) stellt die extrahierte Schicht für die CSCT-Rekonstruktion dar. In dieser Darstellung sind die Aliasing-Streifen deutlich erkennbar. Teil c) zeigt bei verschiedenen Werten von κ die rekonstruierten Beugungsspektren aus den markierten Bereichen. Die Stärke des Artefakts in der CSCT-Rekonstruktion lässt sich über das „Peak-zu-Untergrund“ Verhältnis (schwarze Markierung / rote Markierung) abschätzen; hier liegt ein Verhältnis von $> 20 : 1$ vor.

Für die Aufnahme der CSCT-Sinogramme wurden 36 Winkelschritte bei einer Translationsschrittweite von $\delta y = 0,8 \text{ mm}$ durchgeführt. Die Daten wurden einem 56×56 Pixel großen Raster im Energiebereich von $80 - 140 \text{ keV}$ für $\kappa = 0$, $\kappa = 0,5$ und $\kappa = 0,8$ rekonstruiert. Im Fall $\kappa = 0$ werden ca. 56 %, mit $\kappa = 0,5$ etwa 28 % und mit $\kappa = 0,8$ ungefähr 11 % der Daten eines vollständigen FBP-Scans für die CSCT-Rekonstruktion benutzt. Die einzelnen Spektren wurden über 4 s bei einer maximal auftretenden Zählrate von $4,8 \times 10^3$ Quanten pro Sekunden aufgezeichnet.

¹Durch die gewählte Histogramm-Fensterung sind die Artefakte in dieser Darstellung nur schlecht sichtbar.

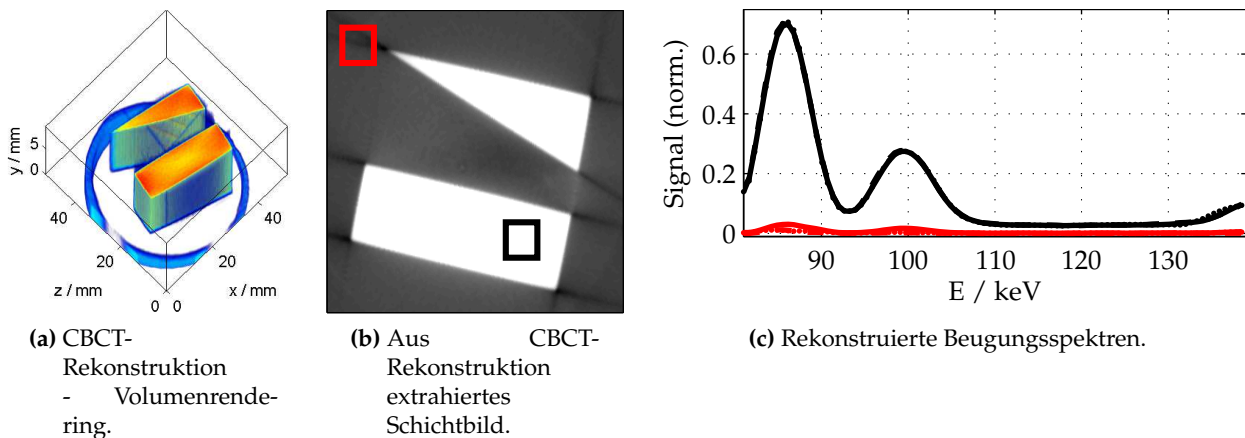


Abbildung 75: Auswirkungen Aliasing-Artefakt-behafteter CBCT-Daten auf die CSCT-Rekonstruktion: Teil a) zeigt die 3d CBCT-Rekonstruktion des Phantoms, Teil b) das für die CSCT-Rekonstruktion extrahierte Schichtbild. Die rote Markierung kennzeichnet einen im Bild sichtbaren Artefaktbereich. Die in Teil c) für $\kappa = 0$ (durchgezogene Linie), $\kappa = 0,5$ (gestrichelte Linie) und $\kappa = 0,8$ (gepunktete Linie) gezeigten rekonstruierten Beugungsspektren sind aus den gekennzeichneten Bereichen entnommen.

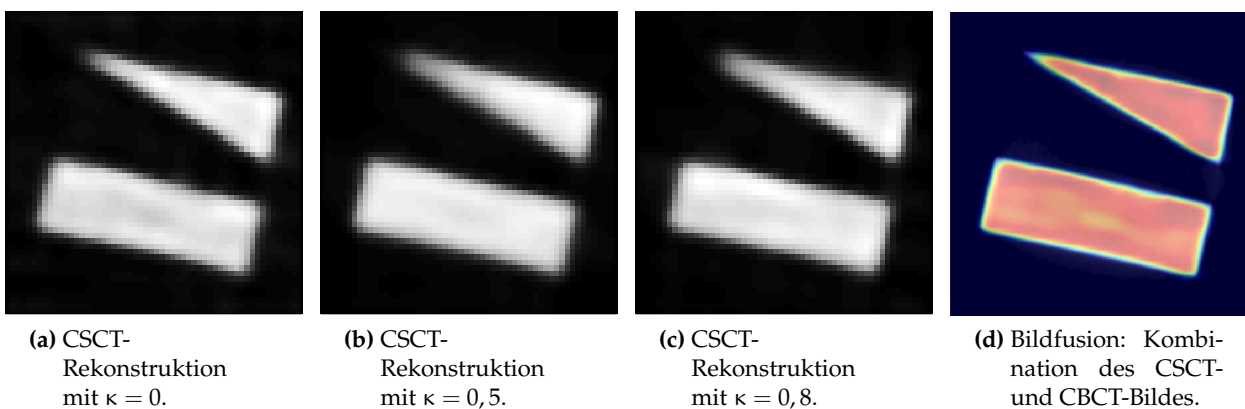


Abbildung 76: CSCT-Rekonstruktionen zur Untersuchung von Auswirkungen Aliasing-Artefakt-behafteter CBCT-Daten: Die Teile a) - c) zeigen die CSCT-Rekonstruktionen (integrale Streuleistung, $E = 80 - 140 \text{ keV}$) bei $\kappa = 0$, $\kappa = 0,5$ bzw. $\kappa = 0,8$. In Teil d) sind CSCT- und CBCT-Rekonstruktion als Überlagerung dargestellt.

Die rekonstruierten Spektren aus den markierten Bereichen in Abbildung 75 b) sind in Teilabbildung c) geplottet. Es lassen sich keine signifikanten Unterschiede bei verschiedenen κ -Werten erkennen. Die zugehörigen rekonstruierten Bilder sind in Abbildung 76 gezeigt. Da es sich um ein Ein-Material-Phantom handelt, sind lediglich die über alle Energiekanäle summierten Bilder in Teil a) - c) dargestellt. Auch bei einer starken Unterabtastung kann das CSCT-Bild erfolgreich mit nur 360 Beugungsspektren ($\kappa = 0,8$) rekonstruiert werden. Anhand des hohen Peak-zu-Untergrundverhältnisses zeigt sich, dass die CSCT-Rekonstruktion mit vergleichsweise geringer Ortsauflösung keine ausgeprägten Aliasing-Artefakte aufweist.

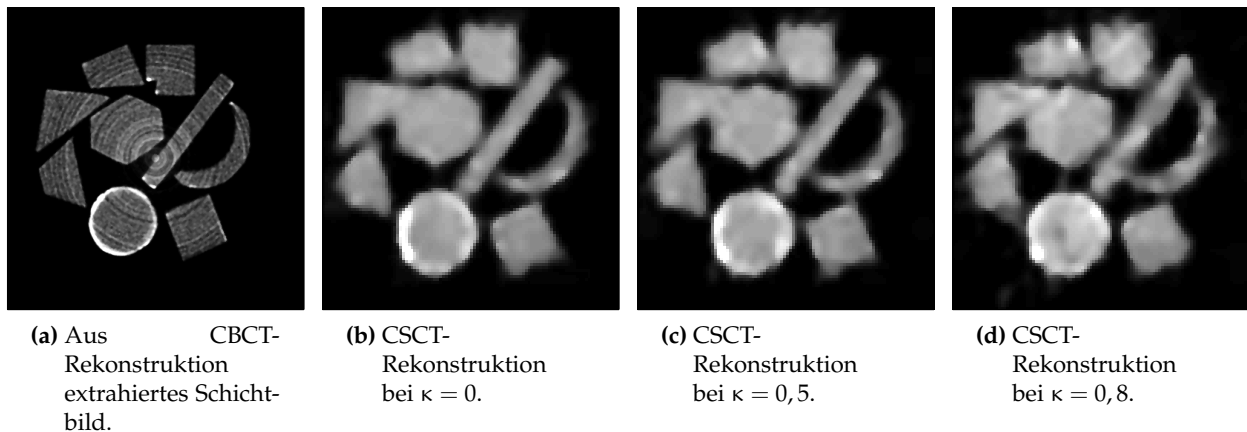


Abbildung 77: Auswirkung von Ringartefakten auf die CSCT-Rekonstruktion: Teilabbildung a) zeigt das aus der FDK-Rekonstruktion extrahierte Schichtbild der CBCT-Aufnahme. Die Ringartefakte sind deutlich als konzentrische Kreise um das Isozentrum erkennbar. In den Teilen b) - d) sind die über alle Energiekanäle (Energiebereich 45 – 115 keV) summierten CSCT-Rekonstruktionen abgebildet.

Ringartefakte aufgrund geringer Signalstärke

In der konventionellen Computertomographie treten Ringartefakte als Folge von dejustierten Scanner Komponenten auf[184]. Auch nicht-lineares Detektorverhalten, z.B. aufgrund einer fehlenden oder fehlerhaften Gain-Kalibrierung des Detektors, kann zu diesen Artefakten führen[186]. Obwohl Korrekturen dieser Artefakte nachträglich häufig möglich sind[187], wird für diese Studie die Bildung von Ringartefakten durch eine unterlassene Gain-Kalibrierung und durch die Verwendung eines schwach absorbierenden Phantom-Materials provoziert. Das Untersuchungsphantom besteht aus neun unterschiedlichen Polystyrol Formen mit einer Dichte von ca. 40 kg m^{-3} , welche auf einer Scheibe mit Radius 25 mm angeordnet sind. Die Form mit dem quadratischen Querschnitt im Bild besitzt dabei eine Kantenlänge von 10 mm. Bei der Aufnahme des CBCT-Datensatzes wurden die Röhrenparameter 80 kV und 0,6 mA verwendet. Teilabbildung a) zeigt das aus der FDK-Rekonstruktion extrahierte Schichtbild. Die konzentrisch angeordneten Ringartefakte werden in dieser Darstellung deutlich sichtbar².

Die CSCT-Sinogramme wurden mit einer Translationsschrittweite von $\delta y = 0,5 \text{ mm}$ und einer Winkelschrittweite von 5° aufgenommen. Die anschließende Rekonstruktion wurde auf einem Raster von 106×106 Pixeln mit einer Pixelgröße von δy für $\kappa \in \{0; 0,5; 0,8\}$ im Energiebereich 45 – 115 keV durchgeführt. Dabei entspricht $\kappa = 0$ ca. 37 %, $\kappa = 0,5$ etwa 18 % und $\kappa = 0,8$ ungefähr 7 % der Datenmenge, welche für einen vollständigen FBP Scan benötigt werden. Die Spektren wurden dabei über 3 s integriert; die maximal auftretende Zählrate betrug lediglich $1,3 \times 10^3$ Quanten pro Sekunde. Die über alle Energiekanäle summierten rekonstruierten Bilder sind in Teil b) - d) der Abbildung 77 für die unterschiedlichen κ Werte dargestellt. Für alle Werte werden die Phantom-Formen gut erkennbar rekonstruiert. Die Verdichtungseffekte am Rand einiger Formen sind ebenfalls im CSCT-Bild sichtbar. Optisch weisen die Rekonstruktionen nur geringfügige Un-

²Die erhöhte Schwächung am Rand einiger Formen (z.B. der Kreisform) ist durch die Herstellung der Formen bedingt: Die Formen wurden mit einem Heißdraht-Schneidegerät aus dem Polystyrol herausgeschnitten. Bei den Formen, welche frei Hand geschnitten wurden, resultiert aufgrund längerer und ungleichmäßiger Wärmeeinwirkung eine Verdichtung am Rand der Form.

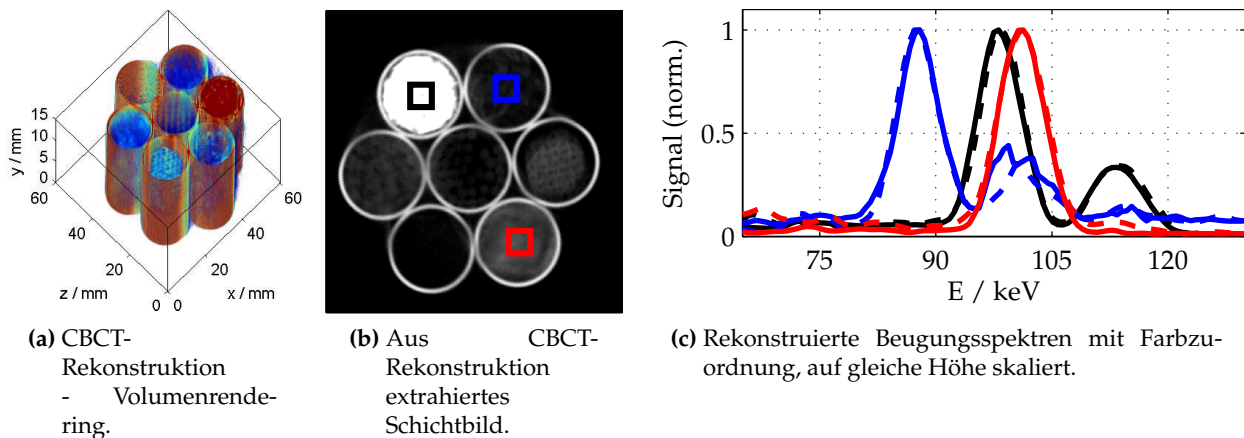


Abbildung 78: Untersuchungen zur Auswirkung von anisotropem Streuverhalten: Teil a) zeigt die 3d CBCT-Rekonstruktion des Phantoms, Teil b) das für die CSCT-Rekonstruktion extrahierte Schichtbild. Die Markierungen kennzeichnen die, zur Extraktion rekonstruierter Beugungsspektren, verwendeten Bildbereiche. Diese Spektren sind in Teil c) der Abbildung gezeigt.

terschiede auf. Auch bei der Rekonstruktion mit den stark unterabgetasteten Eingabedaten (838 Beugungsspektren bei $\kappa = 0,8$) sind die Formen gut erkennbar dargestellt.

Rekonstruktion bei anisotropem Streuverhalten

Simulationsbasierte Untersuchungen zur Auswirkung von anisotropem Streuverhalten auf CSCT-Rekonstruktionen sind in Abschnitt 4.4.4 thematisiert und werden detailliert in [72] beschrieben. Im Rahmen der folgenden experimentellen Untersuchung sollen derartige Auswirkungen für sehr ungünstige Fälle beleuchtet werden. Dazu werden in einem Phantom schwach streuende Materialien mit einem stark anisotropen Streuer kombiniert. Das Phantom besteht aus sieben, mit unterschiedlichen Materialien befüllten, Glasröhrchen. Die Glasröhrchen haben einen Außendurchmesser von 18 mm, einen Innendurchmesser von 16 mm und sind dichtgepackt angeordnet, vgl. Abbildung 78 b). Die Röhrchen sind mit folgenden Materialien befüllt (beginnend wie in dem in der Abbildung gezeigten Material mit der schwarzen Markierung, im Uhrzeigersinn fortlaufend): Dünnwandige Hülsen (0,15 mm) aus Kupfer, Aluminium Späne, Leiterplattenmaterial FR4 (GFK in Epoxidmatrix), Stahlwolle (ferritisch, Feinheitsgrad 00), Polyurethan Schaum und PTFE Granulat. Im zentralen Röhrchen befinden sich Stäbchen (2,5 mm Durchmesser) aus Birkenholz. Aufgrund des Produktionsprozesses weisen die Kupferhülsen ein stark anisotropes Streuverhalten, ähnlich einem gezogenen Draht, auf[188]. Die Materialien wurden in den Röhrchen jeweils derart komprimiert eingebracht, dass bei der Probenrotation keine Materialbewegung erfolgt. Für die CBCT-Rekonstruktion wurden jeweils 5 Aufnahmen pro Winkelschritt bei Röhrenparametern von 125 kV und 0,6 mA aufgenommen. Abbildung 78 a) zeigt eine Volumenrendering-Darstellung der FDK-Rekonstruktion. Texturbedingte Artefakte sind in der CBCT-Rekonstruktion nicht sichtbar. Für die metallischen Phantomkomponenten sind die rekonstruierten Beugungsspektren in Teilabbildung c) geplottet.

Bei der CSCT-Datenaufnahme wurde eine Translationsschrittweite von $\delta y = 0,65$ mm verwendet, um die Rekonstruktion auf einem 96×96 großen Pixelraster mit einer entsprechenden Pi-

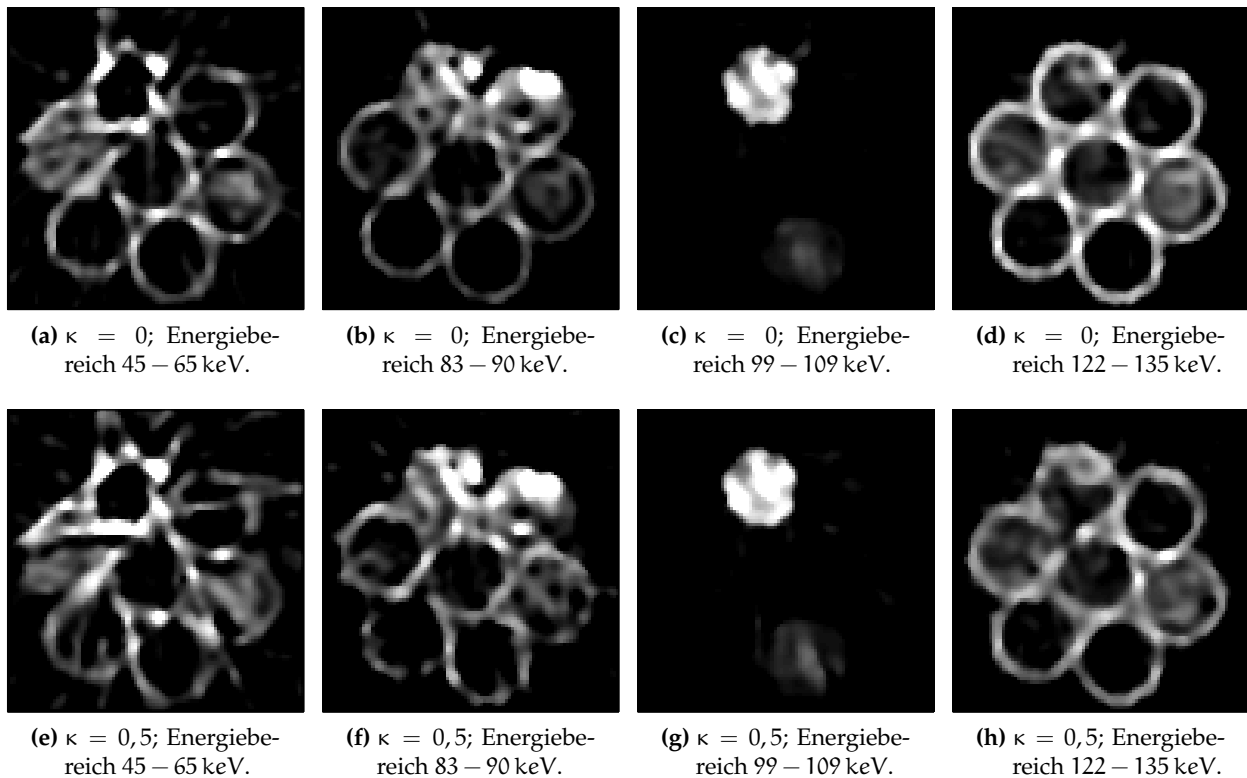


Abbildung 79: Rekonstruktionen zur Untersuchung der Auswirkungen von anisotropem Streuverhalten: Die obere Zeile a) - d) zeigt CSCT-Rekonstruktionen über unterschiedliche Energiebereiche summiert bei $\kappa = 0$. Analog sind in der unteren Zeile die Rekonstruktionen für den Fall $\kappa = 0,5$ abgebildet.

xelgröße von δy durchführen zu können. Die Rekonstruktion wurde in dem Energiebereich von 45 – 130 keV bei $\kappa = 0$ und $\kappa = 0,5$ (hier werden lediglich 17% der Daten eines vollständigen FBP Scans benötigt) durchgeführt. Die gewählte Integrationszeit betrug 3 s bei einer maximalen integralen Zählrate von $6,6 \times 10^3$ Quanten pro Sekunde. Eine Auswahl an Rekonstruktionen für verschiedene Energien ist in Abbildung 79 abgebildet. Im vergleichsweise geringen Energiebereich von 45 – 65 keV werden neben den Glaswandungen der Röhren ebenfalls die Epoxid- bzw. PTFE-Kunststoffe im Bild sichtbar. Diese beiden Materialien lassen sich durch ihre Beugungsspektren unterscheiden. Der Bereich 83 – 90 keV entspricht dem Aluminium (111)-Reflex, daher ist das mit Aluminium befüllte Röhren im Bild erkennbar. Zudem sind Bereiche innerhalb der Glasröhren, welche mit den Kupferhülsen und dem Epoxidkunststoff befüllt sind, hervorgehoben. In diesem Energiebereich trägt zwar nur ein geringer Teil des (111) Peaks der Kupferhülsen zum Bild bei, aufgrund der ca. $18\times$ höheren Intensität (verglichen mit dem Al-Peak) kann er dennoch beobachtet werden. Auch gegenüber dem (110) Reflex des ferritischen Stahls weist dieser Kupfer-Peak eine etwa $5\times$ höhere Intensität auf. Daher sind im Energiebereich von 99 – 109 keV die Bereiche der Kupferhülsen und der Stahlwolle deutlich im Bild zu sehen. Bei $E = 122 - 135$ keV sind erneut die Kunststoffe und die Glaswandungen aufgezeigt.

In Abbildung 78 sind die rekonstruierten Spektren der metallischen Phantom-Komponenten im Vergleich für $\kappa = 0$ (durchgezogene Linie) und $\kappa = 0,5$ (gestrichelte Linie), jeweils einzeln auf die gleiche Höhe skaliert, dargestellt. Die Spektren können sowohl für die Metalle als auch für

die Epoxid- und PTFE-Kunststoffe rekonstruiert werden. Der PUR Schaum und das Holz kann in der Rekonstruktion nicht gezeigt werden. Die Auswirkungen der Artefakte sind anhand der verringerten Ortsauflösung und der Streifenartefaktbildung deutlich im Bild zu erkennen. Das Peak-zu-Untergrund Verhältnis zwischen dem (111) Cu-Peak und den induzierten Streifenartefakten beträgt lediglich 5 : 1.

6.2. Erkennung unbekannter Substanzen

Die zerstörungsfreie Erkennung unbekannter Substanzen innerhalb ausgedehnter Objekte stellt eine Kernanwendung von XDI-Verfahren dar[16][18][68]. Der Photonendurchsatz und die Orts- bzw. Spektralaufösung beeinflussen dabei maßgeblich die Erkennungsquote eines solchen Systems. Im Vergleich zu direkten XDI-Verfahren erlauben CSCT-basierte Verfahren - in Folge der isotropen Ortsaufösung innerhalb einer Schicht im Objekt - eine Minimierung der bei der Detektion auftretenden Teilvolumeneffekte. Dieser Vorteil der intrinsisch höheren Ortsaufösung wird bei der Erkennung von Materialien innerhalb eines in Teilen iso-intensen CBCT-Bildes demonstriert. Anschließend wird mit Hilfe von weiteren Messobjekten die Notwendigkeit der Verwendung einer hohen Ortsaufösung bei der Durchführung von Detektionsaufgaben motiviert. Es werden Untersuchungen zur Bestimmung, der für die Rekonstruktion benötigten Mindestanzahl an Messungen, präsentiert.

6.2.1. Materialerkennung bei teilweisen iso-intensen CBCT-Daten

Die mit Hilfe simulationsbasierter Daten durchgeführte Untersuchung zur Auswirkung von in Teilen iso-intenser CBCT-Eingabedaten auf die CSCT-Rekonstruktion ist in Unterabschnitt 4.4.4 zu finden. In diesem Abschnitt wird die experimentelle Untersuchung vorgestellt und die Materialerkennbarkeit mittels CSCT demonstriert. Hierzu wurde ein, aus mehreren Materialien bestehendes, Scanobjekt aufgebaut. Die unterschiedlichen Materialien sind dabei in einem Kunststoffrohr (Außendurchmesser 50 mm, Wandstärke 2 mm) aus Polypropylen angeordnet. Um ebenfalls flüssige und pulverartige Materialien verwenden zu können, wurde ein Teil der Materialien in dünnwandige ($< 0,1$ mm) Kunststoffballons gefüllt. Hierzu zählen Wasser sowie feinkörnige SiO_2 bzw. SiC Pulver. Um das Schwächungsverhalten von Wasser zu „simulieren“ wird eine Hülse aus Epoxidharz (Außendurchmesser 15,5 mm, Wandstärke 1,5 mm), wie es beispielsweise in Phantomen zur Simulation von Wasser (sog. „plastic water“) zum Einsatz kommt[189], verwendet. Das Schwächungsverhalten der Pulverproben wird durch die Verwendung von Stahlwolle (ferritisch, Feinheitsgrad 00) simuliert, welche mit variabler Dichte zwischen den Materialien eingebracht wurde. Eine Hülse aus Aluminium (Außendurchmesser 13 mm, Wandstärke 1,5 mm) repräsentiert den Einfluss stärker schwächender Materialien auf die Rekonstruktion. Um die Bewegungssteifheit des Messobjekts sicherzustellen, wurden die verbleibenden Lücken innerhalb des PP-Rohres mit Hilfe eines Polyurethan Schwamm geringer Dichte (ca. 15 kg m^{-3}) aufgefüllt.

Die CBCT-Rekonstruktion wurde mit 360 Projektionen bei jeweils 5 Aufnahmen pro Winkelschritt mit Röhrenparametern von 125 kV und 2,0 mA aufgenommen. Abbildung 80 a) zeigt die dreidimensionale Darstellung der CBCT-Rekonstruktion. Auf dem in Teil b) dargestellten zweidimensionalen Schichtbild lässt sich die Anordnung der Materialien im Messobjekt erkennen. Beginnend bei dem Polyamid Kunststoffrohr (grün) sind die Materialien im Uhrzeigersinn wie folgt angeordnet: Wasser (schwarz), Aluminium-Rohr, SiC Pulver, SiO_2 Pulver (rot) und Stahlwolle (blau). Auf dem Bild ist die Materialdichteveriation der Stahlwolle deutlich sichtbar. Innerhalb ausgewählter räumlicher Bereiche weist die Grauwertverteilung ähnliche Werte wie die des SiO_2 Pulvers bzw. des PP-Außenrohrs auf. Zum Vergleich des Bildkontrastes sind in den Teilabbildungen c) und d) die CSCT-Rekonstruktion (Summe aller Energiekanäle) für $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,5$ dargestellt. Die farblichen Markierungen in Teil b) kennzeichnen die Bereiche der Extraktion der Beugungsspektren, welche in Teil e) der Abbildung für $\kappa = 0,5$ geplottet sind.

Die CSCT-Sinogramme wurden mit 36 Winkelschritten bei einer Translationschrittweite von $\delta y = 0,55 \text{ mm}$ aufgenommen. Rekonstruiert wurden die CSCT-Bilder auf einem 96×96 Pixel großen Raster im Energiebereich von $40 - 125 \text{ keV}$ für $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,5$. Bei $\kappa = 0,5$ werden etwa 18 % der Daten eines vollständigen FBP Scans für die CSCT-Rekonstruktion benutzt (ca. 1500 Projektionen). Die Spektren wurden über 3 s bei einer maximal auftretenden Zählrate von $8,4 \times 10^3$ Quanten pro Sekunde aufgezeichnet.

Bei der in Abbildung 80 d) dargestellten Rekonstruktion des integralen Streuverhaltens bei $\kappa = 0,5$ ist gegenüber der Rekonstruktion bei $\kappa = 0$ eine geringfügige Artefaktbildung (vor allem am Rand) sichtbar. Werden die Rekonstruktionen jedoch in eng begrenzten materialcharakteristischen Energiebereichen betrachtet, lässt sich die Bildqualität durch eine „individuelle“ Filterung verbessern. Anhand der rekonstruierten Spektren lassen sich diese Energiebereiche definieren. Abbildung 81 zeigt derartige Rekonstruktionen für verschiedene Energiebereiche. Bei vergleichsweise geringen Energien von beispielsweise $(41,9 \pm 1,3) \text{ keV}$ lassen sich die amorphen Stoffe im Bild darstellen. Es werden zusätzlich die mit Polyurethan ausgefüllten Bereiche sichtbar. Bei

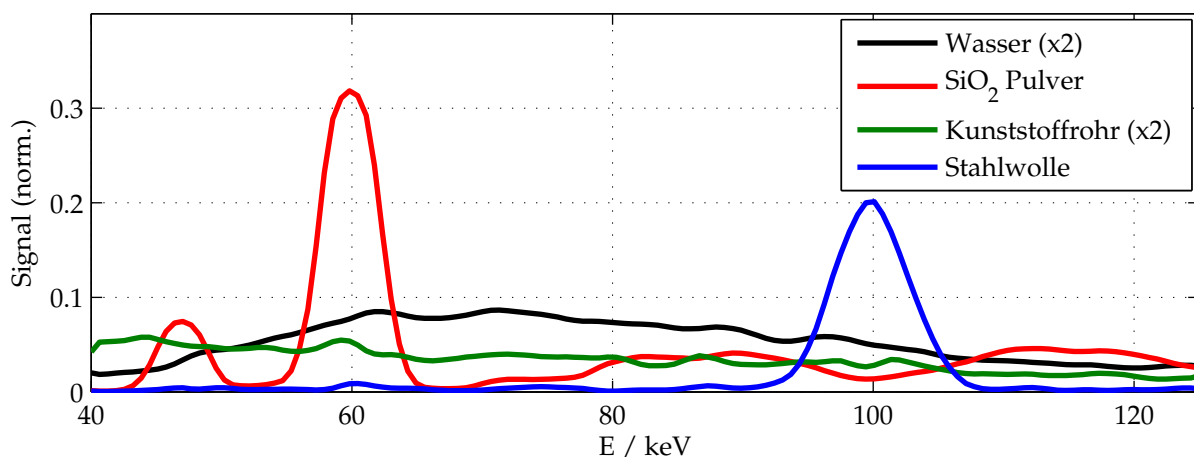
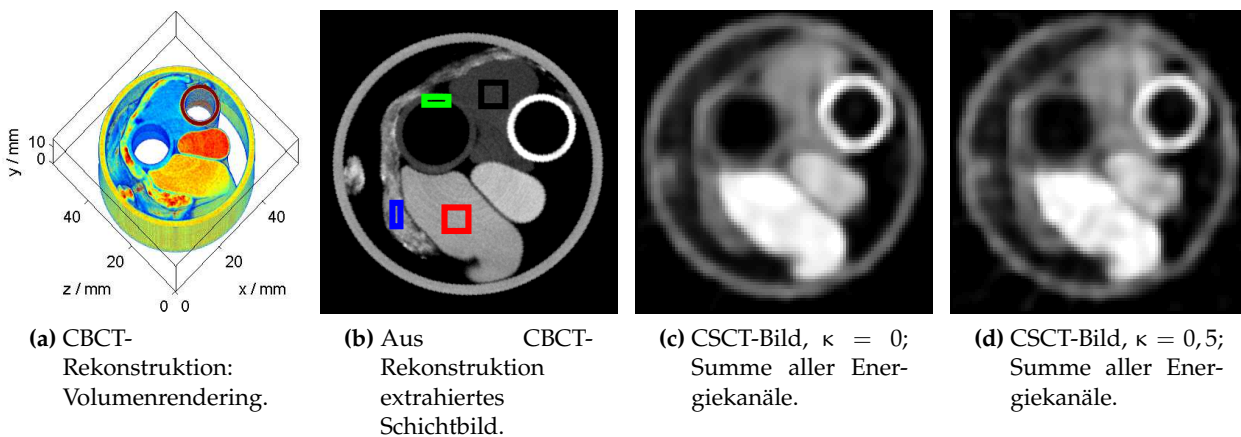


Abbildung 80: Untersuchung zur Materialerkennbarkeit bei in Teilen iso-intensen CBCT-Daten. Teil a) und b) zeigen die CBCT-Rekonstruktion des Untersuchungsobjekts. In c) - e) sind Bilder bzw. Spektren der CSCT-Rekonstruktion dargelegt.

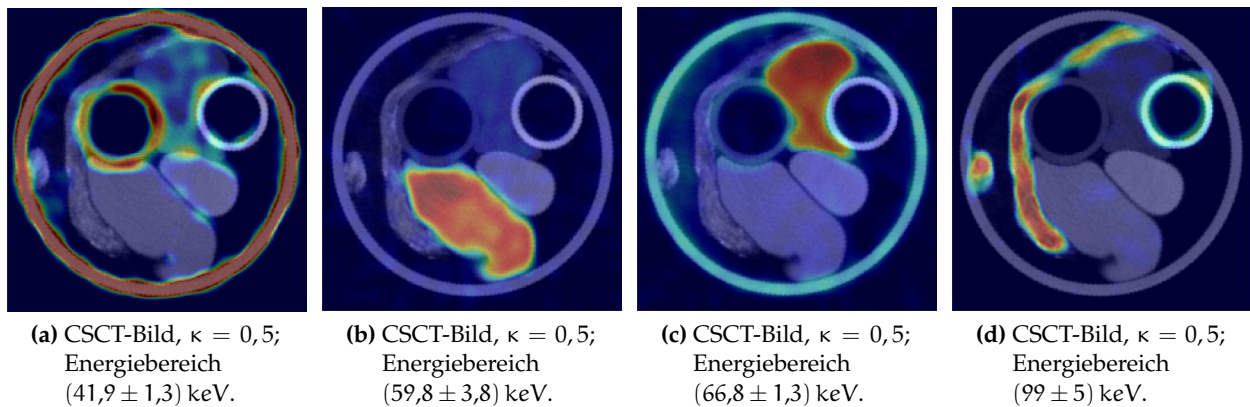


Abbildung 81: Die Teilabbildungen a) - d) zeigen CSCT-Rekonstruktionen, welche der hochauflösenden CBCT-Rekonstruktion überlagert sind, in unterschiedlichen Energiebereichen bei $\kappa = 0,5$.

(59,8 ± 3,8) keV lässt sich der SiO_2 (101) Reflex isoliert darstellen, wohingegen bei (66,8 ± 1,3) keV hauptsächlich das Wasser bzw. in schwächerer Ausprägung die PP- und PUR-Kunststoffe erkennbar werden. Im Energiebereich von (99,0 ± 5,0) keV überlappt der Aluminium (200) Reflex der Hülse teilweise mit dem (110) Peak der Eisens. Dennoch lässt sich das Eisen mit Hilfe des Beugungsspektrums von dem Aluminium unterscheiden. Bei der Betrachtung der Spektren kann man erkennen, dass aufgrund der isotropen Ortsauflösung Teilvolumeneffekte keinen signifikanten Einfluss auf die Spektrenqualität haben. Die spektrale Auflösung der rekonstruierten Beugungsmuster beträgt ca. 7 % und liegt damit im zur Materialidentifikation geeigneten Bereich[190].

6.2.2. Eingebettete Materialien

In einigen Anwendungen liegt das zu identifizierende Material von einem Hüllmaterial eingebettet vor. Um den Einfluss von Teilvolumeneffekten des Hüllmaterials auf die Güte des rekonstruierten Beugungsspektrums zu untersuchen, werden Untersuchungsobjekte gewählt, welche schematisch einer Paketinspektionsaufgabe nachempfunden wurden. Bei diesem Experiment soll ebenfalls die Wahl der Messparameter des CSCT-Scans mit Hilfe der CBCT-Daten ausgewählt werden.

Die Ausmaße der verwendeten Objekte sind an die Größe des VOI der Beugungsanlage angepasst worden. Als Messobjekte dienen dabei Rohre aus Pappe mit einem Außendurchmesser von 55 mm und einer Wandstärke von 2,5 mm. Die unbekannte Substanz wurde jeweils in eine dünnwandige (< 0,2 mm) Kunststofftüte gefüllt, welche verschlossen innerhalb des Rohres positioniert wurde. Um ein Verrutschen des Probenmaterials während der Messung zu verhindern, wurde der verbleibende Zwischenraum mit Packpapier aufgefüllt. Zum Vergleich sind exemplarisch zwei Resultate mit Füllmaterialien unterschiedlicher Dichte anzuführen. Bei Probe A wurde KClO_3 Pulver, bei Probe B Stärkemehl als Füllmaterial verwendet. Kaliumchlorat kann in sog. „gefährlichen Selbstlaboraten“ als Basis-Rohstoff für einen Chloratsprengstoff verwendet werden[191, Seite 179 ff.]), Stärkemehl soll hingegen als ungefährliche und unbekannte Substanz detektiert werden. In Abbildung 82 sind die CBCT-Rekonstruktionen der Proben A und B sowohl dreidimensional als auch als Schichtbild dargestellt. Die CBCT-Rekonstruktion wurde mit 360 Projektionen bei jeweils

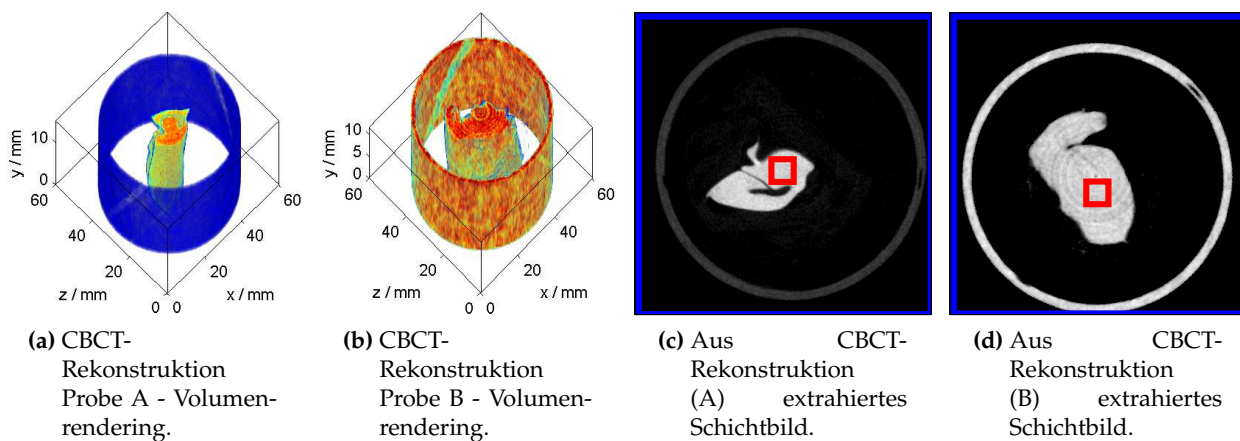


Abbildung 82: Untersuchung zur Materialerkennbarkeit eingebetteter Proben. Die Teile a) und b) zeigen dreidimensionale CBCT-Rekonstruktionen der Proben A und B. In den Teilabbildungen c) und d) sind die zugehörigen extrahierten Schichtbilder dargestellt.

5 Aufnahmen pro Winkelschritt durchgeführt (Röhrenparameter: 80 kV bei 1,0 mA). Bei der gewählten Fensterung der Grauwerte lässt sich erkennen, dass das Stärkemehl eine mit der Pappe des Außenrohres vergleichbare Schwächung besitzt. Das Packpapier ist in dieser Darstellung nur undeutlich zu sehen. Die farblichen Markierungen innerhalb der Schichtbilder kennzeichnen die Bereiche der Extraktion der Beugungsspektren.

Zur Abschätzung der Messparameter des CSCT-Scans wird das CBCT-Bild bei unterschiedlichen Werten von κ , gemäß der in Unterabschnitt 4.3.4 beschriebenen Prozedur, in Abhängigkeit der Anzahl der für die Rekonstruktion verwendeten Quanten N_ϵ rekonstruiert und die Abweichung der resultierenden Bilder $\zeta_{CB}(\kappa, N_\epsilon)$ von der rauschfreien Rekonstruktion berechnet. Mathematisch formuliert muss zur Optimierung der Messzeit t_M der Ausdruck $t_M = n_m \cdot (t_{Int} + t_{Pos})$ minimiert werden. Dabei beschreibt n_m die Anzahl der Messpunkte im Sinogramm, t_{Int} gibt die Integrationszeit pro Messpunkt und t_{Pos} die mittlere Positionierdauer zwischen zwei Messungen an. Unter der Annahme $t_{Int} \gg t_{Pos}$ kann die gesamte Messzeit durch $t_M \approx n_{m,FBP} \cdot (1 - \kappa) \cdot N_\epsilon / \dot{N}_{Max}$ ausgedrückt werden, wobei die maximal auftretende Zählrate \dot{N}_{Max} sowie die Anzahl der benötigten $n_{m,FBP}$ vom Objekt bzw. von den Anlagenparametern abhängig sind. Ein möglicher Messzeitvorteil kann folglich durch $1/(1 - \kappa) \cdot N_\infty / N_\epsilon$ quantifiziert werden. In Abbildung 83 a) - d) ist dieser Messzeitvorteil für unterschiedliche Akzeptanzwerte ζ_{CB} in Abhängigkeit von κ und N_ϵ graphisch dargestellt und die zugehörigen „optimalen“ Rekonstruktionen - siehe Markierungen a) - d) - gezeigt, vgl. e) - h). Aufgrund der geringen optischen Unterschiede bei den Fällen $\zeta_{CB} = 5,0 - 10\%$ wurden die CSCT-Rekonstruktionen bei $\kappa = 0$ (zu Referenzzwecken) und $\kappa = 0,8$ mit $N_\epsilon \approx 200$ durchgeführt, vgl. Plot d).

Im Vergleich zu der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Untersuchung wurde die Translationschrittweite auf $\delta y = 0,75$ mm angepasst und die CSCT-Bilder auf einem 88×88 Pixel großen Raster im Energiebereich von 30 – 115 keV rekonstruiert. Der Fall $\kappa = 0,8$ entspricht der Verwendung von ca. 8% der Daten eines vollständigen FBP Scans (≈ 600 Messungen). Alle Spektren wurden über 3 s bei einer maximal auftretenden Zählrate von $9,8 \times 10^3$ (A) bzw. $5,7 \times 10^3$ (B) Quanten pro Sekunde aufgezeichnet. Die Rekonstruktionen der Objekte A und B sind für einen einzelnen Energiekanal - mit einer zum CBCT-Schätzer vergleichbaren Quantenanzahl - in Abbildung 84 verdeutlicht. In den Teilabbildungen c) und d) lässt sich bei der gewählten Energie

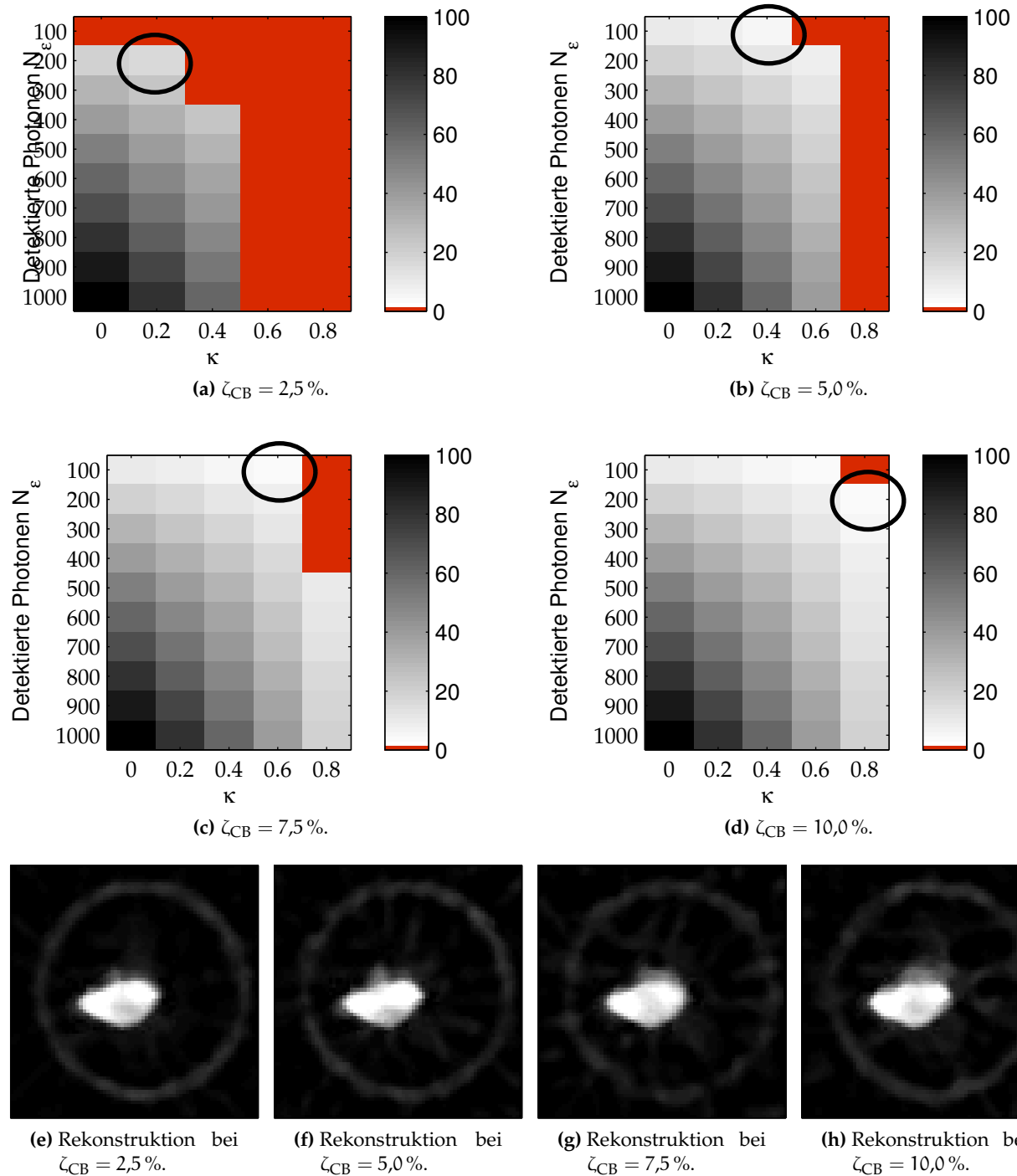


Abbildung 83: Auswahl der CSCT-Scanparameter und Messzeitoptimierung: Für definierte Werte von ζ_{CB} (erlaubte Abweichung von „idealer Rekonstruktion“) ist der Messzeitvorteil in Abhängigkeit von κ und N_ϵ in a)- d) graphisch dargestellt. Die Grauwertskala quantifiziert die Messzeit relativ zur „idealen Rekonstruktion“ in Prozent. Rote Felder kennzeichnen, dass eine Rekonstruktion mit einer Abweichung $\leq \zeta_{CB}$ in dieser Konfiguration nicht möglich ist. Die Rekonstruktionen der jeweils optimalen Konfigurationen (vgl. Markierungen) sind in den Teilabbildungen e) - h) gezeigt.

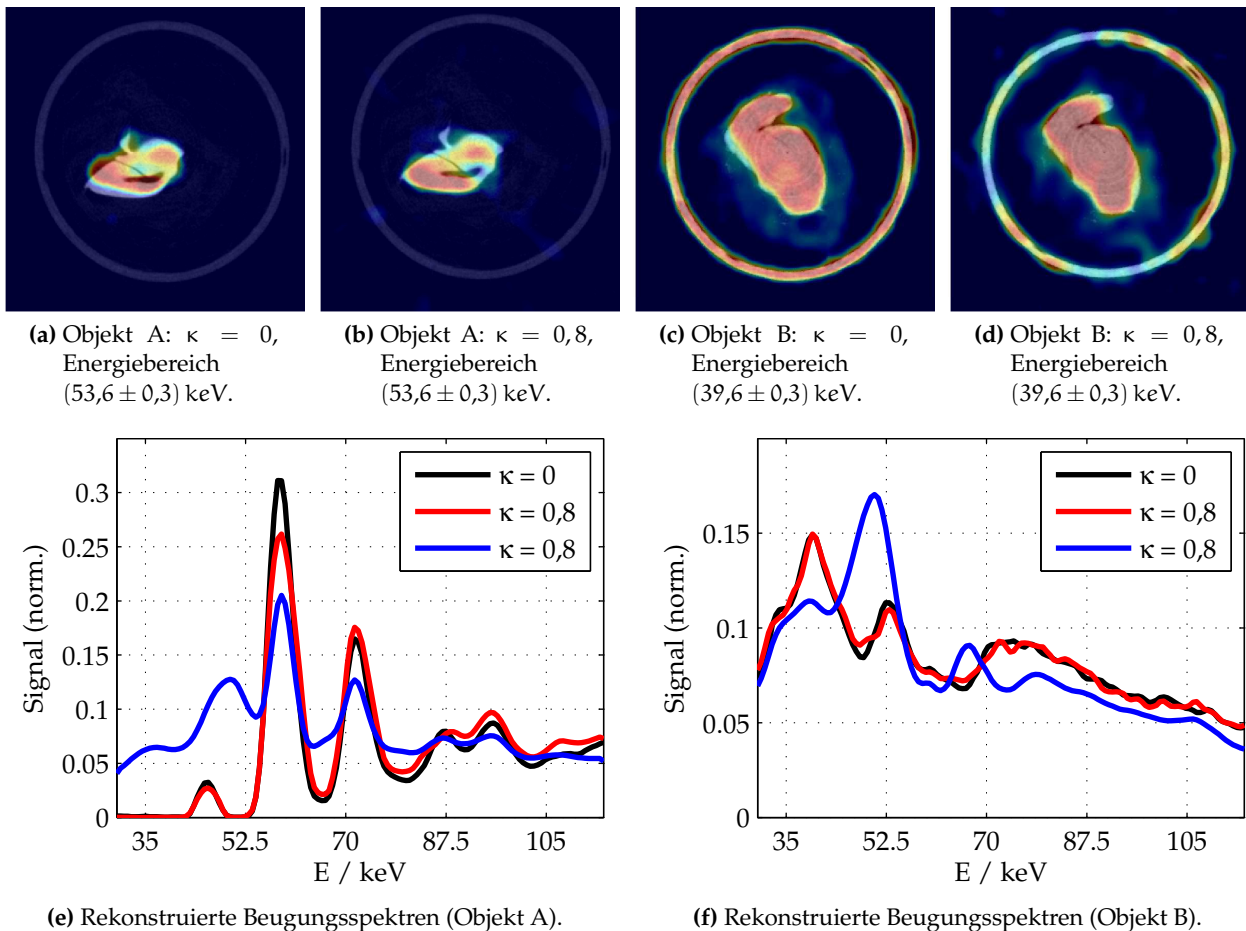


Abbildung 84: Rekonstruktionsergebnisse zur Materialerkennung eingebetteter Proben: Abbildungen a) - d) zeigen CSCT-Rekonstruktionen der Objekte A und B in Abhängigkeit von κ zum Vergleich. Die Beugungsspektren beider Objekte sind in den Teilabbildungen e) und f) geplottet. Es sind für $\kappa = 0$ (schwarz) und $\kappa = 0,8$ (rot) die Spektren aus den markierten Bereichen in c) u. d) aus Abbildung 82 gezeigt. Die blaue Kurve spiegelt die Summe aller rekonstruierten Pixel im Fall $\kappa = 0,8$ wider.

ebenso die Kunststoffhülle des Materials erkennen. Die Rekonstruktionsqualität ist optisch mit der Rekonstruktionen aus Abbildung 83 vergleichbar. Betrachtet man die Spektren in den Teilabbildungen e) und f), lassen sich keine signifikanten Unterschiede zwischen den Fällen $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,8$ feststellen (rote und schwarze Kurve). Vergleicht man jedoch die rekonstruierten Beugungsmuster mit aus der gesamten Probe stammenden Spektren (blaue Kurve), um ein direktes XDI-System mit geringer Ortsauflösung zu simulieren, wird deutlich, dass eine Materialidentifikation aufgrund der Teilvolumeneffekte hier nicht möglich ist. Bereits leichte Materialien mit geringer Dichte und vergleichsweise niedriger Ordnungszahl verfälschen das Beugungsspektrum ausreichend stark.

6.3. Ortsaufgelöste Darstellung des Ladezustands von Li-Ionen Akkumulatoren

Die technologische Bedeutung von Li-Ionen Batterien hat aufgrund ihrer Preisentwicklung³ in den letzten Jahren stark zugenommen. Die einhergehende Steigerung der erzielbaren Energiedichten ($> 500 \text{ Wh L}^{-1}$) führt zu einem verstärkten Einsatz dieser Zelltechnologie im Bereich der Elektromobilität und Energiespeicherung[193]. Um die Lebensdauer einer Li-Ionen Zelle zu maximieren, werden bereits jetzt Konzepte zur Wiederverwendung (sog. „Second-Life“) angewendet. Dabei werden beispielsweise degradierte Zellen - etwa bei einer Restkapazität von 70 – 80 % - aus Traktionsbatterien verwendet, um anderweitig als Energiespeicher eingesetzt zu werden[194]. Eine wesentliche Herausforderung dieses Ansatzes stellt die Minimierung des Aufwandes zur Prüfung von Akkusätzen dar. Zur Bestimmung des Akkuzustandes (sog. „state-of-health“) müssen die einzelnen Zellen einen zeitintensiven Lade-Entlade-Zyklus durchlaufen[195, Seite 42 ff.]. Dies motiviert die Suche nach einer kontakt- und zerstörungsfreien Methode zur Bestimmung der für den state-of-health relevanten Zellparameter.

Klassische Röntgenbildungsverfahren, wie etwa die Computertomographie, ermöglichen bei der kontaktlosen Untersuchung von Li-Ionen Zellen die Darstellung morphologischer Veränderungen des Elektrodenmaterials. Durch Verformungen lassen sich so induzierte Veränderungen des Elektrodenabstandes feststellen[196] oder das Verhalten der Zelle beim sog. "thermischen Durchgehen" untersuchen[24]. Tiefergehende Informationen, z.B. über die ladezustandsabhängige Kristallstruktur des Zellmaterials, sind mit diesen Methoden nicht ohne Weiteres zugänglich. Daher werden im Bereich der Akkumulatorforschung unter anderem röntgenanalytische Verfahren eingesetzt. Häufig werden hierzu speziell präparierte Zellen verwendet, um mittels in-situ Röntgenbeugung - unter Verwendung von Synchrotronstrahlung - den Lade- bzw. Entladevorgang analysieren zu können[34][197][198]. Zur Untersuchung bereits komplett gefertigter, funktionsfähiger Akkuzellen werden ebenso aufwendige Neutronenbeugungsexperimente durchgeführt[199].

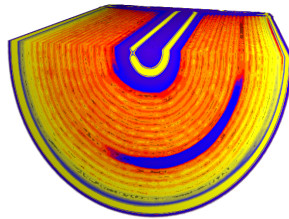
6.3.1. EDXRD-basierte Ladezustandsmessungen

Unter dem Oberbegriff Lithium-Ionen Akkumulatoren werden wiederaufladbare, elektrochemische Energiespeicher auf Lithium Basis zusammengefasst, deren Funktionsweise einer gewöhnlichen galvanischen Zelle entspricht. Als Elektrolyt werden in Lösung befindliche Lithiumsalze, wie etwa LiPF_6 , oder gelartige Polymere wie Polyvinylidenfluorid (sog. „Li-Polymer Akkumulatoren“) eingesetzt[200]. Während für die positive Elektrode unterschiedliche metallische Lithiumverbindungen, wie beispielsweise LiCoO_2 bzw. LiNiO_2 , LiNiMnCoO_2 , LiNiCoAlO_2 , LiFePO_4 oder Li_2TiO_3 mit herstellerabhängig abweichender Stöchiometrie verwendet werden, besteht die negative Elektrode der kommerziell erwerbbaaren Zellen zumeist aus Graphit[201]. Zahlreiche Faktoren wie die Kosten, die spezifische Energie- bzw. Leistungsdichte, Sicherheit, Temperaturstabilität sowie die Lebensdauer der Zelle spielen eine Rolle bei der anwendungsabhängigen Auswahl der Zellmaterialien[202]. In Bezug auf die Bauform haben sich neben den prismatischen Zellen (hergestellt aus sog. „Pouch-Bag-Zellen“) die zylindrischen Zellen durchgesetzt. Sowohl in Energiespeichersystemen als auch in Traktionsbatterien werden diese Zellen vom Typ 18650

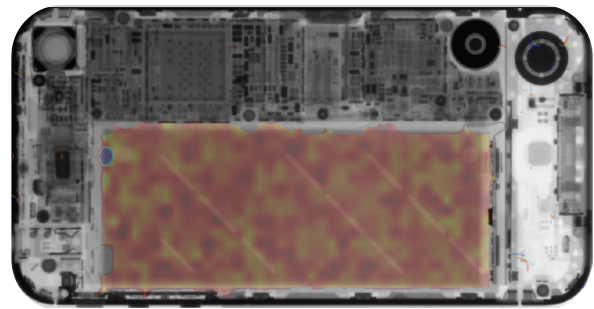
³Im Zeitraum von 2008 – 2015 ist der Preis für kommerziell erhältliche Li-Ionen Akkumulatoren um 70 % gesunken; die mittlere jährliche Preisminderung beträgt 8 %. Für das Jahr 2020 wird ein Batteriepreis von ca. 125 USD/kWh prognostiziert[192].



(a) Kommerziell erhältliche Li-Ionen Zelle vom Typ 18650.



(b) Volumenrendering: Falschfarbendarstellung der CBCT-Rekonstruktion einer 18650 Zelle.



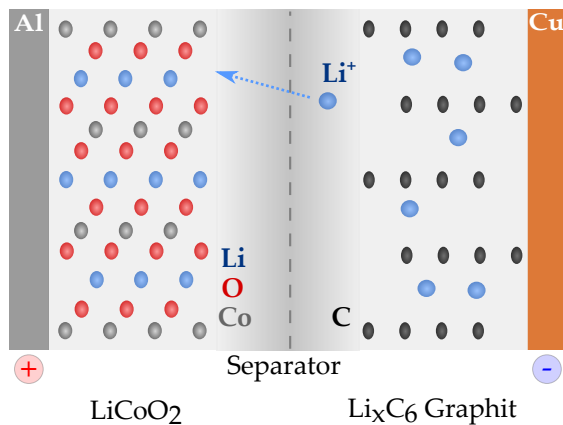
(c) Radiographiebild eines Smartphones mit farblicher Kennzeichnung des Akku-Ladezustandes.

Abbildung 85: Typische Bauformen von Li-Ionen Akkumulatorzellen: Teilabbildung a) zeigt eine kommerziell erhältliche Zelle vom Typ 18650. In b) ist die CBCT-Rekonstruktion der Zelle dargestellt. Die Falschfarbendarstellung visualisiert den gewickelten Aufbau der Elektroden. Luftschlüsse (lila) werden sichtbar. Als Vergleich ist in Teilabbildung c) eine in einem Smartphone verbaute Pouch-Bag-Zelle verdeutlicht. Der aus separat aufgenommenen EDXRD-Daten extrahierte, ortsaufgelöste Ladezustand ist im Radiographiebild überlagert dargestellt (rot entspricht entladen).

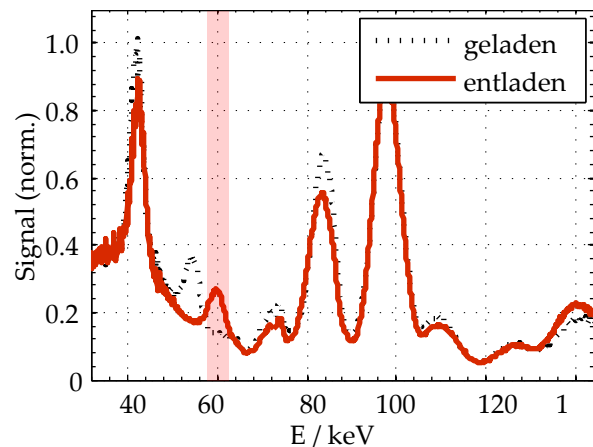
(18 mm Durchmesser, 65 mm Länge), bzw. 21700 eingesetzt. Eine zylindrische Zelle ist in Abbildung 85 a) gezeigt. Die CBCT-Rekonstruktion in Teilabbildung b) verdeutlicht die gewickelte Elektrodenstruktur mit Hilfe einer Falschfarbendarstellung. Die Pouch-Bag Bauform ist in dem aufgenommenen Radiographiebild eines Smartphones in Teil c) zu erkennen.

Da die kommerziell erhältlichen Zellen, unabhängig vom Material der positiven Elektrode, mit einer negativen Elektrode aus Graphit aufgebaut sind, wurden im Rahmen dieser Arbeit die ladezustandsabhängigen Veränderungen des Graphitgitters untersucht. Im geladenen Zustand bilden die Li-Kationen eine Interkalationsverbindung mit dem Graphit. Wie in Teil a) der Abbildung 86 dargestellt, bewegen sich während des Entladevorgangs die zuvor im Graphitgitter eingelagerten Li-Ionen durch den Elektrolyten zur positiven Elektrode. Mit der Deinterkalation der Li-Ionen geht eine Veränderung der Gitterparameter des hexagonalen Graphitgitters einher. Wie bei der Bestimmung des Phasendiagramms von Li_xC_6 in [203] beschrieben, verringert sich der Abstand der Basalebene kontinuierlich in Abhängigkeit des Ladezustandes - ähnliche Effekte lassen sich genauso an der positiven Elektrode beobachten[204]. Diese ladezustandsabhängige Veränderung des Kristallgitters wurde bei Beugungsmessungen im Rahmen der Akkumulatorforschung beobachtet und ist hinreichend bekannt[34][198][199]. Vergleicht man die im Rahmen dieser Arbeit aufgenommenen, energiedispersiven Beugungsspektren eines geladenen und eines entladenen Akkumulators miteinander, lässt sich eine Peakverschiebung des (002)-Reflexes um bis zu 10% beobachten - vgl. Abbildung 86 b). Entsprechend soll die Peakposition in den weiteren Untersuchungen als Maß für den „Grad der Entladung“ der Zelle verwendet werden.

Der in der Abbildung 86 b) rot markierte Bereich im Spektrum (bei $(1,50 \pm 0,05) / \text{nm}$) dient als Integrationsbereich, um das Maß der Peakverschiebung zu quantifizieren. Um dieses Vorgehen zu validieren, wurde die Abhängigkeit der integralen Peakintensität im genannten Energiebereich in Abhängigkeit des Ladezustandes untersucht. Dazu wurden zeitaufgelöste EDXRD-Messungen sowohl mit Pouch-Bag- als auch mit zylindrischen Zellen unterschiedlicher Hersteller durchge-



(a) Schematische Darstellung des Entladevorgangs eines Li-Ionen Akkumulators.



(b) Beugungsspektrum einer zylindrischen Li-Ionen Zelle: geladen vs. entladen.

Abbildung 86: Schematische Darstellung des Entladevorgangs eines Li-Ionen Akkumulators, vgl. a). Die einhergehende Veränderung der Gitterparameter des Graphitgitters wird in dem in Teil b) gezeigten Beugungsspektrum anhand der Verschiebung des zum (002)-Reflex korrespondierenden Beugungspeaks sichtbar.

führt. Die Zellen wurden innerhalb der VOI platziert und während des Lade- bzw. Entladevorgangs nicht verfahren. Über einen Zeitraum von 384 min wurden kontinuierlich Beugungsspektren mit jeweils einer Integrationszeit von 10 s unter Verwendung der Standardanlagenparameter aufgenommen. Dabei wurden die Akkumulatoren jeweils zweimal komplett ge- bzw. entladen.

Im Anschluss an die Datenakquisition wurde in jedem Spektrum der Peak des (002)-Graphit-Reflexes mit Hilfe einer Anpassung eine Gaußfunktion charakterisiert und zum Vergleich die Energiekanäle im Bereich von 58,9 – 62,9 keV aufsummiert (vgl. rote Markierung im Plot). Der zeitliche Verlauf der extrahierten Peakparameter ist für einen typischen Smartphone-Akkumulator (Samsung EB-B800BE (Galaxy Note 3), 3200mAh) exemplarisch in Abbildung 87 gezeigt. Bei allen Untersuchungen ließ sich die integrierte Intensität als geeignetes Maß für eine ladezustandsabhängige Größe ermitteln („Grad der Entladung“).

6.3.2. Untersuchung degradierter Akkumulatorzellen

Für den Kapazitätsverlust von Li-Ionen Akkumulatoren gibt es viele Ursachen; das Alterungsverhalten der Zellen ist Gegenstand intensiver Forschung[205][206][207]. Als eine zentrale Ursache kann die parasitäre Ausbildung der sog. SEI-Schicht („Solid Electrolyte Interphase“) ausgemacht werden. Sie besteht aus Verbindungen der Li-Salze mit Teilen des Elektrolytmaterials und bildet sich bereits während des ersten Kontakts als passivierende feste Grenzschicht an den Elektroden der Zelle aus (schützende Funktion). Diese schützende Schicht verhindert den direkten Kontakt des Elektrolyts mit der aktiven Elektrodenfläche und unterbindet damit eine weitere Zersetzung des Elektrolyts durch das Lithium und folglich eine fortlaufende Vergrößerung der Schicht[208]. Die in der SEI-Schicht gebundenen Li-Ionen können allerdings nicht mehr an der reversiblen Interkalationsreaktion teilnehmen (sog. „Lithium-Verlust“), wodurch die Kapazität der Zelle verringert wird. Bei später folgenden, z.B. temperatur- / alterungsbedingten Zersetzungsprozessen des

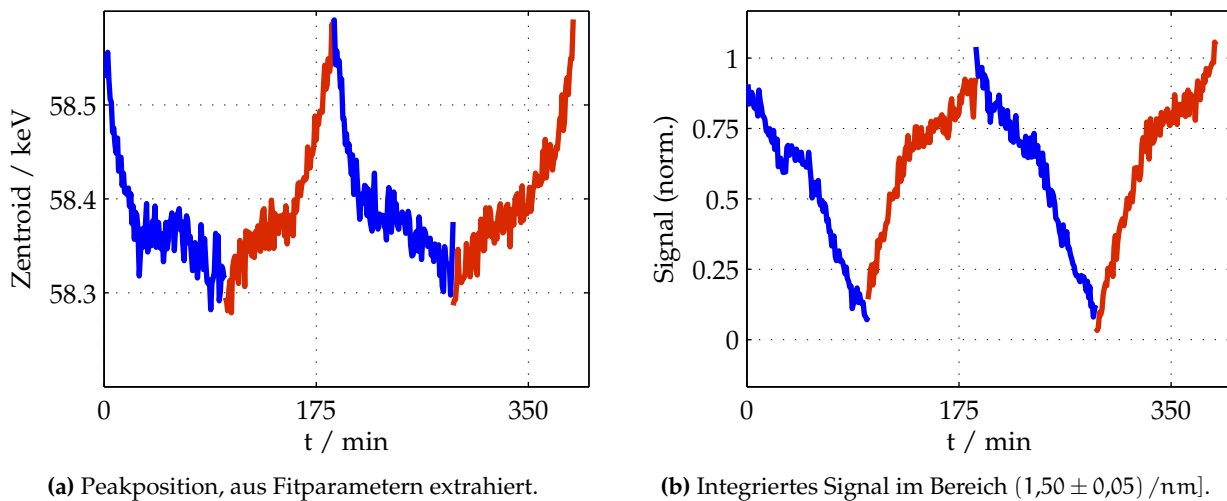


Abbildung 87: Graphische Darstellung ausgewählter Peakparameter des (002)-Graphit-Reflexes in Abhängigkeit des Ladezustandes. Der Akkumulator (Samsung EB-B800BE (Galaxy Note 3), 3200mAh) wurde zyklisch jeweils zweimal komplett geladen (blau) bzw. entladen (rot).

Elektrolyts wird die SEI-Schicht weiter ausgebaut und zusätzliches Lithium in der Schicht gebunden (parasitärer Effekt). Durch Fehlformationen der Schicht (z.B. abhängig von der Oberflächenbeschaffenheit der jeweiligen Elektrode) kann im fortschreitenden Zellalter sogar der Transport der Li-Ionen durch die SEI-Schicht unterdrückt werden[209].

Zur Untersuchung der Degradation von Li-Ionen Akkumulatoren mittels energiedispersiver Röntgenbeugung wurden EDXRD-Messungen an zylindrischen Zellen (Panasonic CGR18650DA, typ. Kapazität 2450 mAh), welche unterschiedliche Zyklenzahlen aufweisen, durchgeführt. Dabei wurden sechs Akkuzellen, welche bereits mehr als 500 Ladezyklen durchlaufen hatten (Proben A1-A6), mit baugleichen Zellen (Proben N1, N2) mit einer Zyklenzahl von < 10 verglichen. Als Referenz wurden zusätzlich weitere Zellen (Zyklenzahl < 10) mit höherer Kapazität (Panasonic NCR18650B, typ. Kapazität 3350 mAh) in den Vergleich einbezogen (Proben N3, N4). Abbildung 89 zeigt Entladekurven der neuen Zelle N1 (schwarz) und der Zelle mit der geringsten Kapazität A3 (rot). Man erkennt, dass bei Probe A3 bereits eine Degradation von 45 % stattgefunden hat. Die Kapazitäten wurden mit Hilfe eines kommerziell erhältlichen Ladegeräts ermittelt.

Für die Untersuchungen mittels energiedispersiver Röntgenbeugung wurden im ersten Schritt alle Zellen bis zur Ladeschlussspannung von 4,2 V aufgeladen. Anschließend wurde mit jeder einzelnen Zelle ein EDXRD-Rasterscan durchgeführt. Dabei wurde ein Ausschnitt von $20 \text{ mm} \times 45 \text{ mm}$ aus der Mitte der Zelle gewählt und mit einer Auflösung von $2 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ abgerastert. Jedes Spektrum wurde mit einer Integrationszeit von 10 s aufgenommen. Im Weiteren wurden die Zellen in vier Schritten über 3,5 V - 3,25 V und 3,15 V auf $< 3,0 \text{ V}$ entladen. Nach jedem Schritt wurde ein erneuter EDXRD-Rasterscan ausgeführt. Diese so ermittelten spektralen Zählraten in dem ortsaufgelösten Rasterscan werden über das im vorangegangenen Abschnitt definierte Energiefenster von 58,9 – 62,9 keV aufsummiert und in einem zweidimensionalen Bild in Abhängigkeit der Zellspannung für die unterschiedlichen Proben dargestellt.

In Abbildung 88 ist der ortsaufgelöste „Grad der Entladung“ für die ausgewählten Akkumulato-

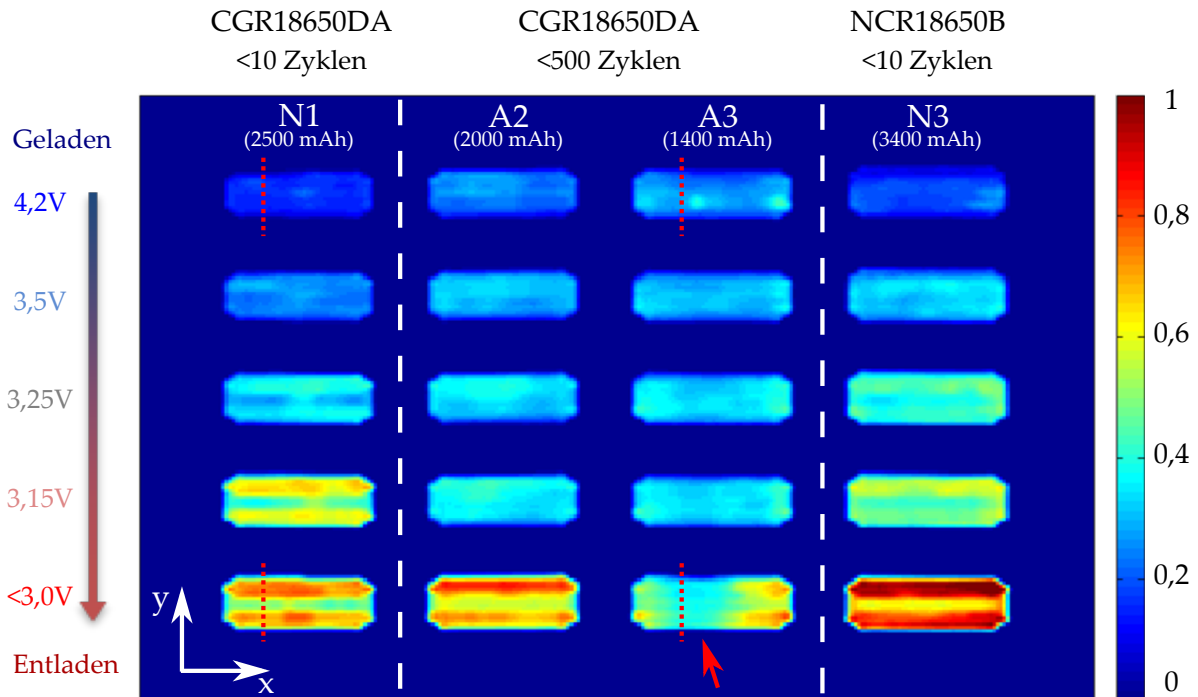
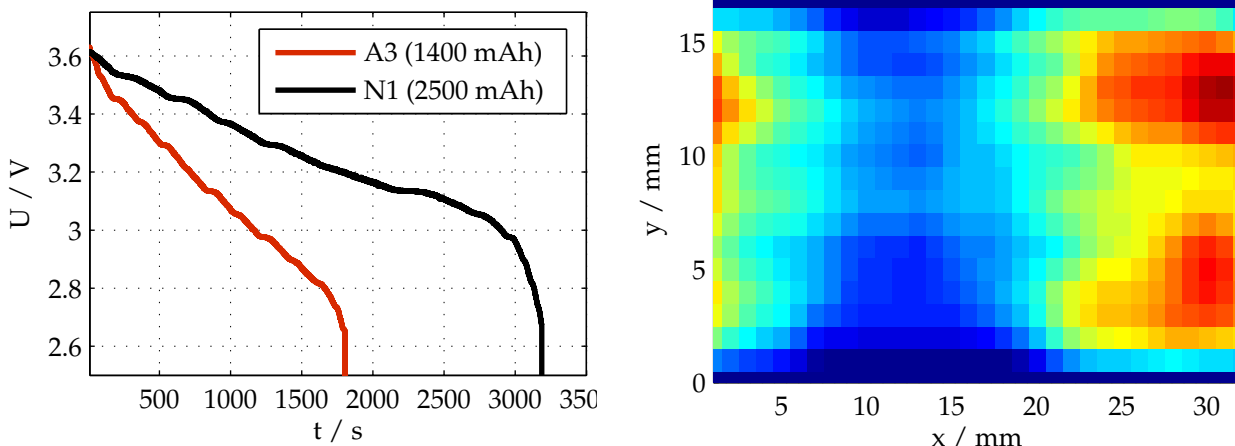


Abbildung 88: Untersuchung zur Degradation von Li-Ionen Akkumulatoren mittels EDXRD-Rasterscan: Die Abbildung zeigt den ortsaufgelösten, gemessenen „Grad der Entladung“ (Falschfarbenskala - Integration über den Energiebereich 58,9 – 62,9 keV) in Abhängigkeit der Zellspannung für verschiedene Zellen mit unterschiedlicher Zyklenzahl. Probe A3 weist nach Erreichen der Entladeschlussspannung von 3 V noch vergleichsweise großflächige Areale auf, in denen scheinbar keine Entladung stattgefunden hat. Die rot gepunkteten Markierungen kennzeichnen die für eine CSCT-Rekonstruktion verwendeten Schichten.

ren A2, A3, N1 und N3 in Abhängigkeit der Zellspannung gezeigt. Es lassen sich deutliche Unterschiede im Entladeverhalten bei den einzelnen Zellen feststellen. Es lässt sich errechnen, dass das Verhältnis der integrierten Intensitäten (bzw. der Peakpositionen des (002)-Graphit-Reflexes) im vollständig ge- und vollständig entladenen Zustand eine Proportionalität zur verfügbaren Entladekapazität der Zelle aufweist. Weitergehende Untersuchungen hierzu und mögliche Rückschlüsse auf den state-of-health der Akkumulatoren sind Gegenstand aktueller Forschung[210]. An dieser Stelle soll der Fokus jedoch auf das Entladeverhalten der degradierten Zelle A3 gelegt werden. Anhand des Streuprojektionsbildes wird bei dieser Zelle deutlich, dass großflächige Areale von mehreren Quadratmillimetern existieren, in denen die Li-Ionen nicht aus der Graphitelektrode deinterkalieren, sondern die Zelle teilweise im geladenen Zustand verbleibt. Die Ursache hierfür könnte in der Ausbildung einer parasitär vergrößerten SEI-Schicht liegen, welche lokal den Transport der Li-Ionen verhindert.

Zur weiteren Untersuchung dieser Areale wurden CSCT-basierte Messungen an den ausgewählten Zellen N1 und A3 durchgeführt. Die für die CSCT-Rekonstruktion verwendeten CBCT-Schichtbilder sind in Abbildung 91 a) bzw. b) dargestellt. Die CBCT-Aufnahmen wurden bei Röhrenparametern $U = 150 \text{ keV}$ und $I = 1 \text{ mA}$ generiert. Es wurden jeweils 3 Bilder in jeder der insgesamt 720 Projektionen aufgenommen und gemittelt. Die FDK-Rekonstruktion wurde anschließend bei einer Voxelgröße von $50 \mu\text{m}$ ausgeführt. Es lassen sich keine signifikanten Unterschiede zwischen den beiden CBCT-Bildern a) und b) erkennen. Der Elektrodenabstand beträgt lediglich ca. $300 \mu\text{m}$,



(a) Entladekurve der Akkumulatoren A3 (rot) und N1 (schwarz).

(b) Vergrößerte Darstellung des EDXRD-Rasterscans der Zelle A3 bei $< 3\text{ V}$.

Abbildung 89: Teilabbildung a) zeigt die Entladekurven der Akkumulatoren A3 und N1. Die Degradation der Zelle A3 wird bei dem Vergleich zur Zelle N1 deutlich sichtbar. In b) ist eine vergrößerte Darstellung des Rasterscans der am stärksten degradierten Zelle A3 zu sehen.

dennoch ist die gewickelte Elektrodenstruktur gut zu erkennen. Das rekonstruierte Bild eignet sich als Eingabedatensatz für die CSCT-Rekonstruktion.

Die CSCT-Sinogramme wurden mit 15 Winkelschritten bei einer Translationsschrittweite von $\delta y = 0,05\text{ mm}$ aufgenommen. Die Spektren wurden über 4 s bei einer maximal auftretenden Zählrate von $1,6 \times 10^2$ Quanten pro Sekunde (in dem rekonstruierten Energiebereich) aufgezeichnet. Rekonstruiert wurden die CSCT-Bilder im Anschluss auf einem 400×400 Pixel großen Raster im beschriebenen Energiebereich von $58,9 - 62,9\text{ keV}$ für $\kappa = 0$ bzw. $\kappa = 0,5$. Zum Vergleich wurden zusätzlich Rekonstruktionen mit einer niedrigeren Ortsauflösung auf einem 100×100 Pixel großen Raster berechnet.

Die CSCT-Rekonstruktionen der vollständig ge- bzw. vollständig entladenen Zellen N1 und A3 sind in Abbildung 90 (bzw. bei geringerer Ortsauflösung in Abbildung 91) dargestellt. Die Resultate bestätigen die Beobachtungen, die mit Hilfe des EDXRD-Rasterscans gemacht wurden. Im Vergleich zu diesem (Abbildung 88) wird bei der CSCT-Rekonstruktion jedoch der „Grad der Entladung“ innerhalb einer Schicht ortsaufgelöst dargestellt. Es lässt sich nun erkennen, dass im Vergleich zu der Rekonstruktion des Scans des intakten Akkumulators N1, die Rekonstruktion des Scans von A3 eine stark inhomogene Grauwertverteilung aufweist. Insbesondere zeigt sich, dass bei der degradierten Zelle der Interkalationsprozess der Li-Ionen im mittleren Bereich des Akkus gestört ist. Möglicherweise begünstigen hier die geringeren Biegeradien der aktiven Elektroden eine Fehlformation der SEI-Schicht[209].

Weitere Details und Ergebnisse dieser Studie sind in [211] zu finden. Es ist anzumerken, dass bei der Untersuchung lediglich der (002)-Reflex der Graphitelektrode zur Auswertung herangezogen wurde. Weitere Peaks im Beugungsspektrum der Zelle lassen sich auch zur Darstellung von relevanten Zellparametern verwenden. Abhängig von dem verwendeten Material der positiven Elektrode können hier ähnliche, ladezustandsabhängige Gitterveränderungen beobachtet werden[212][197][213][214].

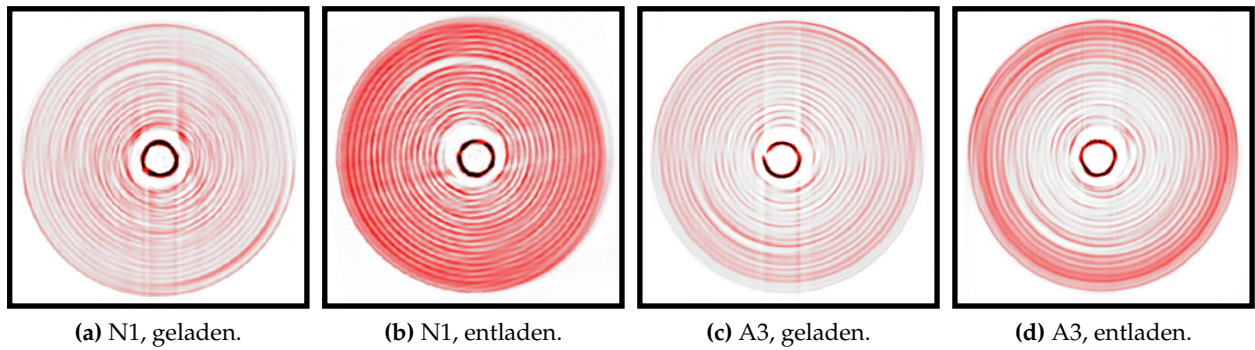


Abbildung 90: Rekonstruierte schichtaufgelöste Darstellung des „Grad der Entladung“ der vollständig geladenen Zellen N1 und A3 in den Teilabbildungen a) bzw. c) und der vollständig entladenen Zellen in b) bzw. d). Die CSCT-Rekonstruktion wurden bei $\kappa = 0,5$ durchgeführt. Die Schichtpositionen sind in Abbildung 88 markiert dargestellt.

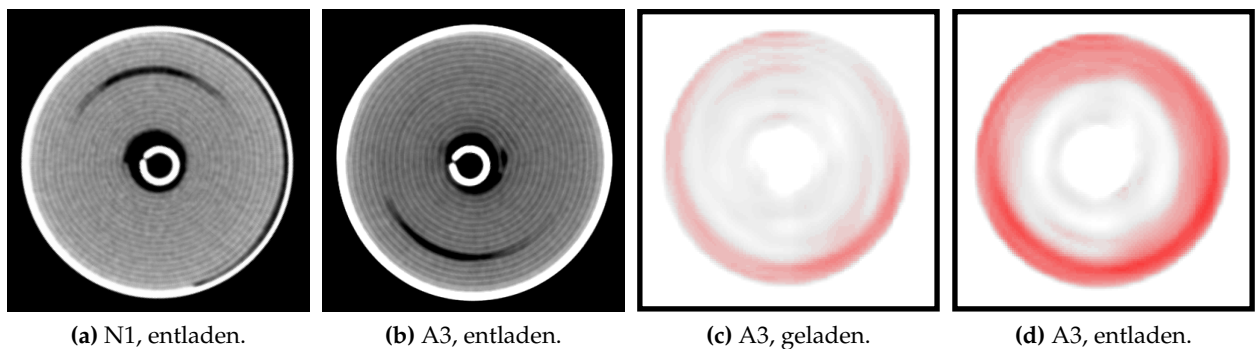


Abbildung 91: Die aus der CBCT-Rekonstruktion extrahierten Schichtbilder der Zellen N1 bzw. A3 sind in a) bzw. b) dargestellt. Teilabbildung c) und d) zeigen CSCT-Rekonstruktionen analog zu denen in Abbildung 90 c) und d), jedoch auf einem größeren Rekonstruktionsraster von 100×100 Pixeln.

ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

Mit Hilfe der energiedispersiven Röntgenbeugung wird die Verknüpfung zwischen den Bereichen der Röntgenanalytik und Röntgenbildgebung ermöglicht. Die Verwendung von Röntgenstreubildgebungsverfahren erlaubt es, neue Anwendungen, beispielsweise aus dem Bereich der Medizin, der zerstörungsfreien Prüfung oder der Flugsicherheit, zu erschließen. Nichtsdestotrotz stellen sowohl die Kosten eines XDI-Systems als auch die vergleichsweise hohe Dauer bzw. Dosis eines Scans kritische Größen dar.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde daher die Idee verfolgt, gewöhnliche CT-Anlagen durch eine Röntgenstreubildgebungsfunktion zu erweitern. Im Gegensatz zu den „klassischen“ CSCT-Systemen, bei denen eine parallele Transmissions- und Streudatenakquisition stattfindet, wird hier allerdings der Weg eines sequenziellen Scans gewählt, um die Rekonstruktionen aus der Transmissionscomputertomographie als a-priori Wissen für die CSCT-Rekonstruktion zu nutzen. Es konnte anhand simulierter und realer Messdaten gezeigt werden, dass mit der entwickelten algebraischen Rekonstruktionsmethode unter Verwendung einer l_1 -Minimierung die Anzahl der benötigten CSCT-Sinogrammdaten um bis zu 80 % reduziert werden kann.

Das in dieser Arbeit vorgestellte und entwickelte System kombiniert ein gewöhnliches Kegelstrahl-CT mit einem kohärenten Streu-CT in einer Nadelstrahlgeometrie. Hierdurch wird Streubildgebung mit einer Ortsauflösung im Milli- und Submillimeterbereich ermöglicht. Als neue Anwendungsmöglichkeit wurde die schichtaufgelöste Untersuchung des Ladungszustands von kommerziell erhältlichen zylindrischen Lithium-Ionen Akkumulatoren demonstriert. Bei Untersuchungen zur Degradation der Akkuzellen konnten Veränderungen mit Hilfe der Streubilder festgestellt werden, welche mit klassischen Bildgebungsverfahren nicht zugänglich sind. Diese Information könnte im Bereich der Akkumulatorforschung von Nutzen sein. Im Vergleich zu direkten, d.h. mit restriktiverer Kollimation messenden, XDI-Systemen wird durch die Verwendung der CT-artigen Datenakquisition in Kombination mit der Rekonstruktion eine isotrope Ortsauflösung ermöglicht. Es wurde gezeigt, dass hierdurch Anwendungen zur Identifikation unbekannter Substanzen aufgrund geringerer Teilvolumeneffekten profitieren können.

Im Hinblick auf die stetig steigende Nachfrage von medizinischen und industriellen Kegelstrahl-CT Anlagen, machen kosteneffiziente Streu-CT Erweiterungen eine Ausweitung des Anwendungsspektrums denkbar. Die aktuell noch vergleichsweise hohen Anschaffungskosten von energiedispersiven Halbleiterdetektoren samt zugehöriger Auswerteelektronik stellen dabei allerdings noch ein Hemmnis dar. Ausschlaggebend könnte hier insbesondere die aktuelle technologische Entwicklung im Bereich der medizinischen Computertomographie sein: Namhafte Firmen, wie

etwa Siemens oder Philips, haben die baldige Verfügbarkeit von multi-spektralen CTs (z.B. für die K-Kanten Bildgebung[102]) angekündigt. Vielversprechende Resultate der ersten Prototypen wurden bereits veröffentlicht[215][216]. Durch die Verwendung von photonzählenden Halbleiterdetektoren würden - abgesehen von einem Kollimator - keine zusätzlichen Komponenten für die Integration einer Beugungseinrichtung in ein derartiges System benötigt.

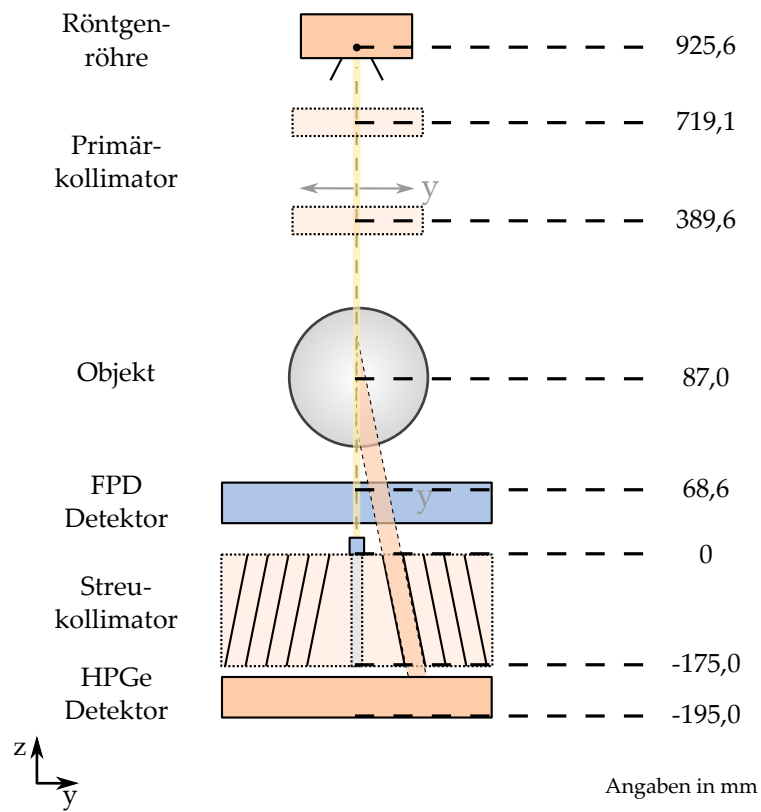
Ebenso sind weitere Anwendungen im Bereich der Flugsicherheit denkbar. Nach aktueller Ankündigung der Firma Smiths Detection[217] sind CT-basierte Handgepäckscanner auf dem Markt verfügbar und werden bereits eingesetzt. Hierdurch könne das sonst notwendige Herausnehmen von elektronischen Geräten und Flüssigkeiten aus dem Handgepäck vermieden werden. Diese Systeme ließen sich beispielsweise durch ein VOI-basiertes Aufnahme- und Rekonstruktionsverfahren, um eine XDI-Funktionalität erweitern. Die potenzielle Performance eines derartigen Zeilendetektor-Systems könnte mit der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Simulation bestimmt werden. Methoden zur Reduzierung von Metallartefakten in der klassischen Transmissionscomputertomographie stellen einen vielversprechenden Ansatz zur Verminderung texturbedingter Artefakte in einem Streu-CT-System dar.

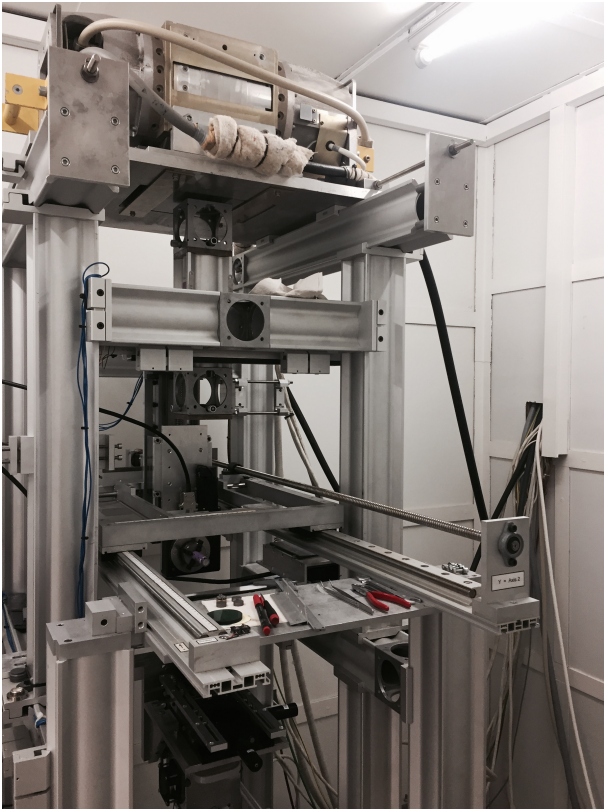
Abhängig von der konkreten Scanaufgabe kann ebenfalls eine komplett dreidimensionale Rekonstruktion Gegenstand zukünftiger Forschung sein: Es wurde in der Arbeit gezeigt, dass Rekonstruktionen, welche die spektrale Korrelation benachbarter Pixel berücksichtigen, höhere Rekonstruktionsgüten aufweisen als zweidimensionale energiekanalweise Rekonstruktionen. Durch das Einführen von „spektralen Basisfunktionen“ ist daher eine weitere Verbesserung des Signal-zu-Rausch Verhältnisses bei der Rekonstruktion zu erwarten. Häufig lassen sich die zu rekonstruierenden Spektren mit wenigen Basisfunktionen beschreiben. Als Beispiel ist hier die Untersuchung der Li-Ionen Akkumulatoren zu nennen, bei denen in der präsentierten Studie lediglich eine Peakposition von Interesse war.

Anhang

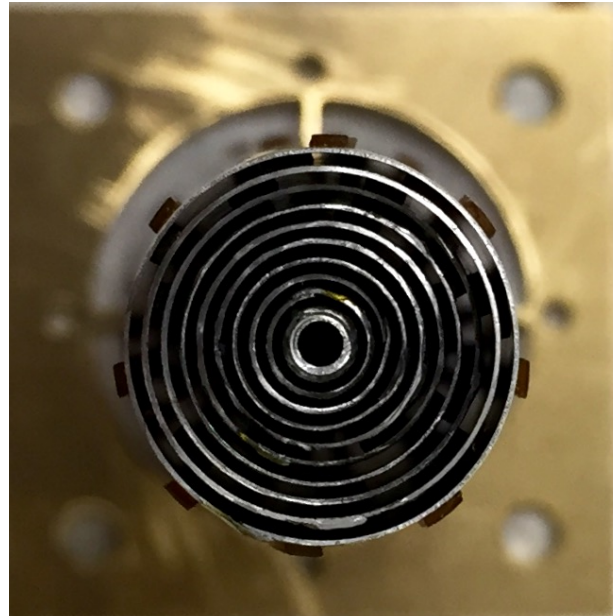
BEUGUNGSANLAGE

A.1. Geometrie





(a) Kombiniertes EDXRD-CBCT-System.



(b) Multi-Lamellen-Beugungskollimator.

Abbildung A.192: Fotos des kombinierten EDXRD-CBCT-Systems a) und des im Fertigungsprozess befindlichen Multi-Lamellen-Beugungskollimators b).

A.2. Materialien (GATE)

Name	Dichte / g cm ³	Zusammensetzung
Blei	11,4	Pb
Cadmiumtellurid	5,85	CdTe
Eisen	7,87	Fe
Germanium	5,32	Ge
Luft	$1,29 \times 10^{-3}$	75,5 %H - 23,2 %O - 1,3 %Ar
Kapton	1,42	H ₁₀ C ₂ N ₂ O ₅
Wolfram	19,3	W

Tabelle A.24: Übersicht der in der GATE Simulation definierten Materialien

Literaturverzeichnis

- [1] G. N. Hounsfield: *Computerized transverse axial scanning (tomography). 1. Description of system.* The British journal of radiology, 46(552):1016–1022, 1973.
- [2] T. G. Flohr, C. H. McCollough, H. Bruder, M. Petersilka, K. Gruber, C. Suss, M. Grasruck, K. Stierstorfer, B. Krauss, R. Raupach, A. N. Primak, A. Kuttner, S. Achenbach, C. Becker, A. Kopp und B. M. Ohnesorge: *First performance evaluation of a dual-source CT (DSCT) system.* European radiology, 16(2):256–268, 2006.
- [3] W. C. Scarfe und A. G. Farman: *What is cone-beam CT and how does it work?* Dental clinics of North America, 52(4):707–730, 2008.
- [4] L. de Chiffre, S. Carmignato, J. P. Kruth, R. Schmitt und A. Weckenmann: *Industrial applications of computed tomography.* CIRP Annals - Manufacturing Technology, 63(2):655–677, 2014.
- [5] V. Cnudde und M. N. Boone: *High-resolution X-ray computed tomography in geosciences: A review of the current technology and applications.* Earth-Science Reviews, 123:1–17, 2013.
- [6] F. H. Chung und D. K. Smith: *Industrial applications of X-ray diffraction.* Marcel Dekker, New York, 2000.
- [7] G. Hildebrandt: *The Discovery of the Diffraction of X-rays in Crystals — A Historical Review.* Crystal Research and Technology, 28(6):747–766, 1993.
- [8] B. C. Giessen und G. E. Gordon: *X-ray diffraction: new high-speed technique based on x-ray spectrography.* Science (New York, N.Y.), 159(3818):973–975, 1968.
- [9] B. Buras: *Fixed Angle Scattering (FAS) Method for X-ray Crystal Structure Analysis.* Report - Institute of Nuclear Research. Institute of Nuclear Research, 1968.
- [10] A. M. Cuevas, F. Bernardini, A. Gianoncelli und C. Tuniz: *Energy dispersive X-ray diffraction and fluorescence portable system for cultural heritage applications.* X-Ray Spectrometry, 44(3):105–115, 2015.
- [11] G. Harding, M. Newton und J. Kosanetzky: *Energy-dispersive X-ray diffraction tomography.* Physics in Medicine and Biology, 35(1):33–41, 1990.
- [12] G. J. Royle und R. D. Speller: *Low angle X-ray scattering for bone analysis.* Physics in Medicine and Biology, 36(3):383–389, 1991.
- [13] G. Kidane, R. D. Speller, G. J. Royle und A. M. Hanby: *X-ray scatter signatures for normal and neoplastic breast tissues.* Physics in Medicine and Biology, 44(7):1791–1802, 1999.
- [14] E. Cook, R. Fong, J. Horrocks, D. Wilkinson und R. Speller: *Energy dispersive X-ray diffraction as a means to identify illicit materials: a preliminary optimisation study.* Applied radiation and isotopes : including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine, 65(8):959–967, 2007.

- [15] H. Strecker, G. L. Harding, H. Bomsdorf, J. Kanzenbach, R. Linde und G. Martens: *Detection of explosives in airport baggage using coherent x-ray scatter*. Proc. SPIE 2092, Substance Detection Systems, Seiten 399–410, 1994.
- [16] R. D. Speller, J. A. Horrocks und R. J. Lacey: *X-ray scattering signatures for material identification*. Proc. SPIE 2092, Substance Detection Systems, Seiten 366–377, 1994.
- [17] J. S. Iwanczyk, B. E. Patt, Y. J. Wang, M. Croft, Z. Kalmar und W. Mayo: *Mercuric iodide detector systems for identifying substances by X-ray energy dispersive diffraction*. IEEE Transactions on Nuclear Science, 42(4):606–610, 1995.
- [18] G. Harding: *X-ray diffraction imaging—a multi-generational perspective*. Applied radiation and isotopes : including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine, 67(2):287–295, 2009.
- [19] G. Harding, H. Fleckenstein, D. Kosciesza, S. Olesinski, H. Strecker, T. Theedt und G. Ziernert: *X-ray diffraction imaging with the Multiple Inverse Fan Beam topology: principles, performance and potential for security screening*. Applied radiation and isotopes : including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine, 70(7):1228–1237, 2012.
- [20] J. Delfs und J. P. Schlomka: *Energy-dispersive coherent scatter computed tomography*. Applied Physics Letters, 88(24):243506, 2006.
- [21] S. Pani, E. J. Cook, J. A. Horrocks, J. L. Jones und R. D. Speller: *Characterization of breast tissue using energy-dispersive X-ray diffraction computed tomography*. Applied radiation and isotopes : including data, instrumentation and methods for use in agriculture, industry and medicine, 68(10):1980–1987, 2010.
- [22] A. Thran, H. Barschdorf, G. Martens, U. van Stevendaal und J. P. Schlomka: *Performance Improvements of Energy-Resolved Fan-Beam Coherent Scatter Computed Tomography*. Proc. SPIE 6318, Developments in X-Ray Tomography V, 2006.
- [23] A. Harding: *Feasibility Study of Fan-beam Coherent Scatter Computed Tomography*. Doctoral thesis, University of Surrey, 2004.
- [24] D. P. Finegan, M. Scheel, J. B. Robinson, B. Tjaden, I. Hunt, T. J. Mason, J. Millichamp, M. Di Michiel, G. J. Offer, G. Hinds, D. J. L. Brett und P. R. Shearing: *In-operando high-speed tomography of lithium-ion batteries during thermal runaway*. Nature communications, 6:6924, 2015.
- [25] J. B. Robinson, J. A. Darr, D. S. Eastwood, G. Hinds, P. D. Lee, P. R. Shearing, O. O. Taiwo und D. J. L. Brett: *Non-uniform temperature distribution in Li-ion batteries during discharge – A combined thermal imaging, X-ray micro-tomography and electrochemical impedance approach*. Journal of Power Sources, 252:51–57, 2014.
- [26] S. Komini B., A. I. Mohamed, J. F. Whitacre und S. Litster: *Multiple imaging mode X-ray computed tomography for distinguishing active and inactive phases in lithium-ion battery cathodes*. Journal of Power Sources, 283:314–319, 2015.
- [27] J. A. Inzana, D. Olvera, S. M. Fuller, J. P. Kelly, O. A. Graeve, E. M. Schwarz, S. L. Kates und H. A. Awad: *3D printing of composite calcium phosphate and collagen scaffolds for bone regeneration*. Biomaterials, 35(13):4026–4034, 2014.

- [28] W. Xu, M. Brandt, S. Sun, J. Elambasseril, Q. Liu, K. Latham, K. Xia und M. Qian: *Additive manufacturing of strong and ductile Ti–6Al–4V by selective laser melting via in situ martensite decomposition*. *Acta Materialia*, 85:74–84, 2015.
- [29] B. Vrancken, L. Thijs, J. P. Kruth und J. van Humbeeck: *Microstructure and mechanical properties of a novel β titanium metallic composite by selective laser melting*. *Acta Materialia*, 68:150–158, 2014.
- [30] H. Einarsdóttir, M. J. Emerson, L. H. Clemmensen, K. Scherer, K. Willer, M. Bech, R. Larsen, B. K. Ersbøll und F. Pfeiffer: *Novelty detection of foreign objects in food using multi-modal X-ray imaging*. *Food Control*, 67:39–47, 2016.
- [31] Martin Vester-Christensen, Soren G. H. Erbou, Mads F. Hansen, Eli V. Olsen, Lars B. Christensen, Marchen Hviid, Bjarne K. Ersboll und Rasmus Larsen: *Virtual dissection of pig carcasses*. *Meat science*, 81(4):699–704, 2009.
- [32] D. W. Sun: *Computer vision technology for food quality evaluation*. *Food science and technology international series*. Elsevier / Academic Press, Amsterdam and Boston, 2nd edition Auflage, 2016, ISBN 0128025999.
- [33] H. He, C. Huang, C. W. Luo, J. J. Liu und Z. S. Chao: *Dynamic study of Li intercalation into graphite by in situ high energy synchrotron XRD*. *Electrochimica Acta*, 92:148–152, 2013.
- [34] R. E. Johnsen und P. Norby: *Capillary-based micro-battery cell for in situ X-ray powder diffraction studies of working batteries: A study of the initial intercalation and deintercalation of lithium into graphite*. *Journal of Applied Crystallography*, 46(6):1537–1543, 2013.
- [35] L. E. Murr, S. M. Gaytan, D. A. Ramirez, E. Martinez, J. Hernandez, K. N. Amato, P. W. Shindo, F. R. Medina und R. B. Wicker: *Metal Fabrication by Additive Manufacturing Using Laser and Electron Beam Melting Technologies*. *Journal of Materials Science & Technology*, 28(1):1–14, 2012.
- [36] J. Gibmeier, E. Held, J. Altenkirch, A. Kromm, Th. Kannengiesser und Th. Buslaps: *Real time monitoring of phase transformation and strain evolution in LTT weld filler material using EDXRD*. *Journal of Materials Processing Technology*, 214(11):2739–2747, 2014.
- [37] A. Tartari: *Molecular differential cross sections for low angle photon scattering in tissues*. *Radiation Physics and Chemistry*, 56(1-2):205–211, 1999.
- [38] D. E. Peplow und K. Verghese: *Measured molecular coherent scattering form factors of animal tissues, plastics and human breast tissue*. *Physics in Medicine and Biology*, 43(9):2431–2452, 1998.
- [39] D. W. Townsend: *Multimodality imaging of structure and function*. *Physics in medicine and biology*, 53(4):R1–R39, 2008.
- [40] R. D. Evans: *The Atomic Nucleus*. McGraw-Hill, 1955.
- [41] J. H. Hubbell und S. M. Seltzer: *Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients (version 1.4)*, <http://physics.nist.gov/xaamdi>, 2004, geprüft am 04.01.2017.
- [42] W. Heitler: *The Quantum Theory of Radiation*. Oxford University Press, 3. Auflage, 1954.
- [43] G. F. Knoll: *Radiation Detection and Measurement*. John Wiley & Sons, Inc, 3. Auflage, 2000.

- [44] D. L. Bailey, J. L. Humm, Todd-Pokropek A. und Aswegen van A.: *Nuclear medicine physics : a handbook for students and teachers*. International Atomic Energy Agency, Wien, 2014.
- [45] M. J. Berger, J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, J. Chang, J. S. Coursey, R. Sukumar, D. S. Zucker und K. Olsen: *XCOM: Photon Cross Section Database (version 1.5)*, <http://physics.nist.gov/xcom>, 2010, geprüft am 05.01.2017.
- [46] J. H. Hubbell, Wm. J. Veigele, E. A. Briggs, R. T. Brown, D. T. Cromer und R. J. Hower-ton: *Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections*. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 4(3):471–538, 1975.
- [47] J. H. Hubbell: *Summary of existing information on the incoherent scattering of photons, particularly on the validity of the use of the incoherent scattering function*. Radiation Physics and Chemistry, 50(1):113–124, 1997, ISSN 0969806X.
- [48] B. Beckhoff, B. Kanngießer, N. Langhoff, R. Wedell und H. Wolff: *Practical X-Ray Fluorescence Analysis*. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [49] A. C. Thompson et al.: *X-Ray Data Booklet*. Lawrence Berkeley National Laboratory, 3. Auflage, 2009.
- [50] A. Guinier: *X-ray diffraction in crystals, imperfect crystals, and amorphous bodies*. Dover Books on Physics, New York, 1994.
- [51] B. E. Warren: *X-ray diffraction*. Dover Books on Physics, New York, 1990.
- [52] D. W. L. Hukins: *X-ray diffraction by disordered and ordered systems: Covering X-ray diffraction by gases, liquids, and solids and indicating how the theory of diffraction by these different states of matter is related and how it can be used to solve structural problems*. Pergamon Press, Oxford und New York, 1. Auflage, 1981.
- [53] C. Guse, A. Simionescu, B. Schunemann, R. Hentschke und H. Bomsdorf: *Temperature-dependent structure of liquid water investigated by means of energy-dispersive x-ray diffraction and molecular dynamics simulations*. Journal of physics. Condensed matter : an Institute of Physics journal, 22(32):325105, 2010.
- [54] G. Harding und J. Delfs: *Liquids identification with x-ray diffraction*. Proc. SPIE 6707, Penetrating Radiation Systems and Applications VIII, Seite 67070T, 2007.
- [55] A. Monshi, M. R. Foroughi und M. R. Monshi: *Modified Scherrer Equation to Estimate More Accurately Nano-Crystallite Size Using XRD*. World Journal of Nano Science and Engineering, 02(03):154–160, 2012, ISSN 2161-4954.
- [56] G. Harding: *The design of direct tomographic energy-dispersive x-ray diffraction imaging (XDI) systems*. Proc. SPIE 5923, Penetrating Radiation Systems and Applications VII, Seite 59230R, 2005.
- [57] D. E. Cox: *Handbook on Synchrotron Radiation, Volume 3, Chapter 5*. North-Holland, 1. Auflage, 1991.
- [58] G. Harding, H. Strecker, D. Kosciesza und J. Gordon: *Detector considerations relevant to x-ray diffraction imaging for security screening applications*. Proc. SPIE 7306, Optics and Photonics in Global Homeland Security V and Biometric Technology for Human Identification VI, Seite 730619, 2009.
- [59] J. Delfs: *Inverse fan beam X-ray diffraction imaging with applications in liquids identification*. Cu-villier, 1. auflage Auflage, 2013, ISBN 978-3-954044-42-9.

- [60] B. Ghammraoui, V. Rebuffel, J. Tabary, C. Paulus, L. Verger und Ph. Duvauchelle: *Effect of grain size on stability of X-ray diffraction patterns used for threat detection*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 683:1–7, 2012.
- [61] H. Bomsdorf, T. Müller und J. Kosanetzky: *Quantitative Material Inspection with Coherent X-Ray Scattering*. 15th World Conference on Non-Destructive Testing, 2000.
- [62] H. Bomsdorf: *Coherent X-Ray Scatter for Non-Destructive Testing of Works of Art*. 6th World Conference on NDT and Microanalysis in Diagnostics and Conservation of Cultural Environmental Heritage, Rome, Seiten 941–955, 1999.
- [63] G. Martens, H. Bomsdorf, G. Harding, J. Kanzenbach und R. Linde: *Coherent x-ray scatter imaging for foodstuff contamination detection*. Proc. SPIE 2092, Substance Detection Systems, Seiten 387–398, 1993.
- [64] M. D. Wilson, L. Dummott, D. D. Duarte, F. H. Green, S. Pani, A. Schneider, J. W. Scuffham, P. Seller und M. C. Veale: *A 10 cm x 10 cm CdTe Spectroscopic Imaging Detector based on the HEXITEC ASIC*. Journal of Instrumentation, 10(10):P10011, 2015.
- [65] C. K. Egan, S. D. M. Jacques, M. D. Wilson, M. C. Veale, P. Seller, P. J. Withers und R. J. Cernik: *Full-field energy-dispersive powder diffraction imaging using laboratory X-rays*. Journal of Applied Crystallography, 48(1):269–272, 2015.
- [66] P. Seller, S. Bell, R. J. Cernik, C. Christodoulou, C. K. Egan, J. A. Gaskin, S. Jacques, S. Pani, B. D. Ramsey, C. Reid, P. J. Sellin, J. W. Scuffham, R. D. Speller, M. D. Wilson und M. C. Veale: *Pixellated Cd(Zn)Te high-energy X-ray instrument*. Journal of instrumentation: an IOP and SISSA journal, 6(12), 2011.
- [67] S. Pang, Z. Zhu, G. Wang und W. Cong: *Small-angle scatter tomography with a photon-counting detector array*. Physics in medicine and biology, 61(10):3734–3748, 2016.
- [68] D. O’Flynn, C. Crews, I. Drakos, C. Christodoulou, M. D. Wilson, M. C. Veale, P. Seller und R. D. Speller: *Materials identification using a small-scale pixellated x-ray diffraction system*. Journal of Physics D: Applied Physics, 49(17):175304, 2016.
- [69] S. Schlesinger und H. Bomsdorf: *A deconvolution approach for the enhancement of spatial resolution in energy dispersive x-ray diffraction and related imaging methods*. Measurement Science and Technology, 24(7):074015, 2013.
- [70] F. Soulez, C. Crespy, V. Kaftandjian, P. Duvauchelle, A. Peterzol und P. Ponard: *Spatial super-resolution for line parallel imaging in energy dispersive X-ray diffraction*. Proc. 10th European Conf. on Non-Destructive Testing, 2010.
- [71] U. van Stevendaal, J. P. Schlomka, A. Thran, J. Delfs und H. Barschdorf: *A new reconstruction algorithm for energy-resolved coherent scatter computed tomography*. Proc. SPIE 5747, Medical Imaging 2005: Image Processing, 2083, Seiten 2083–2093, 2005.
- [72] S. Nassyr: *Analysis and correction of image and reconstruction artifacts in coherent-scatter computed tomography*. Master Thesis, Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Deutschland, 2016.
- [73] G. Harding und J. Kosanetzky: *Elastic scatter computed tomography*. Physics in Medicine and Biology, 30(2):183–186, 1985.

- [74] B. Ghammraoui, A. Badal und L. M. Popescu: *Maximum-likelihood estimation of scatter components algorithm for x-ray coherent scatter computed tomography of the breast*. *Physics in medicine and biology*, 61(8):3164–3179, 2016.
- [75] M. N. Lakshmanan, B. P. Harrawood, E. Samei und A. J. Kapadia: *Volumetric x-ray coherent scatter imaging of cancer in resected breast tissue: a Monte Carlo study using virtual anthropomorphic phantoms*. *Physics in medicine and biology*, 60(16):6355–6370, 2015.
- [76] F. Marticke, G. Montémont, C. Paulus, J. Mars, O. Olivier Michel und L. Verger: *Energy Dispersive X-Ray Diffraction System as a Promising Virtual Biopsy in Mammography*. *IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference*, 2015.
- [77] *ALERT, Awareness and Localization of Explosives-Related Threats*. <http://www.northeastern.edu/alert/project/r1-c3/>. Stand: 26.04.2017.
- [78] K. Chen: *Reconstruction algorithms for multispectral diffraction imaging*. Dissertation, Boston University, Boston MA, USA, 2014.
- [79] Ke Chen und David A. Castañón: *A regularized iterative reconstruction algorithm for x-ray diffraction tomography*. *Proc. SPIE 8374, Next-Generation Spectroscopic Technologies V*, Seite 83740D, 2012.
- [80] David J. Brady, Daniel L. Marks, Kenneth P. MacCabe und Joseph A. O’Sullivan: *Coded apertures for x-ray scatter imaging*. *Appl. Opt.*, 52(32):7745–7754, 2013.
- [81] K. MacCabe, K. Krishnamurthy, A. Chawla, D. Marks, E. Samei und D. Brady: *Pencil beam coded aperture x-ray scatter imaging*. *Optics Express*, 20(15):16310, 2012.
- [82] K. P. MacCabe, A. D. Holmgren, M. P. Tornai und D. J. Brady: *Snapshot 2D tomography via coded aperture x-ray scatter imaging*. *Applied optics*, 52(19):4582–4589, 2013.
- [83] A. D. Holmgren, I. Odinaka, J. A. Greenberg und D. J. Brady: *Multi-view coded aperture coherent scatter tomography*. *Proc. SPIE 9847, Anomaly Detection and Imaging with X-Rays (ADIX)*, Seiten 98470A–8, 2016.
- [84] I. Odinaka, Y. Kaganovsky, J. A. O’Sullivan, D. G. Politte, A. D. Holmgren, J. A. Greenberg, L. Carin und D. J. Brady: *Domain and range decomposition methods for coded aperture x-ray coherent scatter imaging*. *Proc. SPIE 9847, Anomaly Detection and Imaging with X-Rays (ADIX)*, Seite 98470R, 2016.
- [85] M. Hassan, J. A. Greenberg, I. Odinaka und D. J. Brady: *Snapshot fan beam coded aperture coherent scatter tomography*. *Optics express*, 24(16):18277–18289, 2016.
- [86] A. Holmgren: *Coding Strategies for X-ray Tomography*. Dissertation, Duke University, Durham NC, USA, 2016.
- [87] Z. Sun, G. H. Choo und K. H. Ng: *Coronary CT angiography: Current status and continuing challenges*. *The British journal of radiology*, 85(1013):495–510, 2012.
- [88] W. A. Kalender: *X-ray computed tomography*. *Physics in Medicine and Biology*, 51(13):R29–43, 2006.
- [89] X. Pan, E. Y. Sidky und M. Vannier: *Why do commercial CT scanners still employ traditional, filtered back-projection for image reconstruction?* *Inverse problems*, 25(12):1230009, 2009.
- [90] A. C. Kak und M. Slaney: *Principles of Computerized Tomographic Imaging*. *Classics in Applied Mathematics (Book 33)*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001.

- [91] A. Katsevich: *An improved exact filtered backprojection algorithm for spiral computed tomography*. Advances in Applied Mathematics, 32(4):681–697, 2004.
- [92] Y. Ye, S. Zhao, H. Yu und G. Wang: *A general exact reconstruction for cone-beam CT via backprojection-filtration*. IEEE transactions on medical imaging, 24(9):1190–1198, 2005.
- [93] M. Beister, D. Kolditz und W. A. Kalender: *Iterative reconstruction methods in X-ray CT*. Physica Medica, 28(2):94–108, 2012.
- [94] T. M. Buzug: *Computed Tomography: From Pion Statistics to Modern Cone-Beam CT*. Springer Berlin Heidelberg, 1. Auflage, 2008.
- [95] A. H. Andersen und A. C. Kak: *Simultaneous algebraic reconstruction technique (SART): a superior implementation of the art algorithm*. Ultrasonic Imaging, 6(1):81–94, 1984.
- [96] H. M. Hudson und R. S. Larkin: *Accelerated image reconstruction using ordered subsets of projection data*. IEEE transactions on medical imaging, 13(4):601–609, 1994.
- [97] L. A. Shepp und Y. Vardi: *Maximum likelihood reconstruction for emission tomography*. IEEE transactions on Medical Imaging, 1(2):113–122, 1982.
- [98] Lucas L. Geyer, U. Joseph Schoepf, Felix G. Meinel, John W. Nance, JR, Gorka Bastarrrika, Jonathon A. Leipsic, Narinder S. Paul, Marco Rengo, Andrea Laghi und Carlo N. de Cecco: *State of the Art: Iterative CT Reconstruction Techniques*. Radiology, 276(2):339–357, 2015.
- [99] C. Becker, R. Loose, O. Meissner und M. Reiser: *C-Bogen-CT - ein Meilenstein der interventio-nellen Bildgebung*. Der Radiologe, 49(9):810, 2009.
- [100] D. Marin, D. T. Boll, A. Mileto und R. C. Nelson: *State of the art: Dual-energy CT of the abdomen*. Radiology, 271(2):327–342, 2014.
- [101] I. Danad, Z. A. Fayad, M. J. Willemink und J. K. Min: *New Applications of Cardiac Computed Tomography: Dual-Energy, Spectral, and Molecular CT Imaging*. JACC. Cardiovascular imaging, 8(6):710–723, 2015.
- [102] J. P. Schlomka, E. Roessl, R. Dorscheid, S. Dill, G. Martens, T. Istel, C. Baumer, C. Herrmann, R. Steadman, G. Zeitler, A. Livne und R. Proksa: *Experimental feasibility of multi-energy photon-counting K-edge imaging in pre-clinical computed tomography*. Physics in Medicine and Biology, 53(15):4031–4047, 2008.
- [103] K. Muller, S. Datta, M. Ahmad, J H Choi, T. Moore, L. Pung, C. Niebler, G. E. Gold, A. Maier und R. Fahrig: *Interventional dual-energy imaging-Feasibility of rapid kV-switching on a C-arm CT system*. Medical Physics, 43(10):5537, 2016.
- [104] M. Boone, T. Bultreys, Bert. Masschaele, D. Van Loo, L. Van Hoorebeke und V. Cnudde: *In-situ, real time micro-CT imaging of pore scale processes, the next frontier for laboratory based micro-CT scanning*. 30th International symposium of the Society of Core Analysts, Society of Core Analysts (SCA), 2016.
- [105] H. K. Tuy: *An Inversion Formula for Cone-Beam Reconstruction*. SIAM Journal on Applied Mathematics, 43(3):546–552, 1983.
- [106] L. A. Feldkamp, L. C. Davis und J. W. Kress: *Practical cone-beam algorithm*. Journal of the Optical Society of America A, 1(6):612–619, 1984.
- [107] F. Noo, J. Pack und D. Heuscher: *Exact helical reconstruction using native cone-beam geometries*. Physics in Medicine and Biology, 48(23):3787–3818, 2003.

- [108] U. Neitzel, J. Kosanetzky und G. Harding: *Coherent scatter in radiographic imaging: A Monte Carlo simulation study*. *Physics in Medicine and Biology*, 30(12):1289–1296, 1985.
- [109] H. Bomsdorf, T. Müller und H. Strecker: *Quantitative simulation of coherent X-ray scatter measurements on bulk objects*. *Journal of X-Ray Science and Technology*, 12:83–96, 2004.
- [110] S. Pani, E. Cook, J. Horrocks, L. George, S. Hardwick und R. Speller: *Modelling an Energy-Dispersive X-Ray Diffraction System for Drug Detection*. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 56(3):1238–1241, 2009.
- [111] B. Ghammraoui, J. Tabary, S. Pouget, C. Paulus, V. Moulin, L. Verger und Ph. Duvauchelle: *New software to model energy dispersive X-ray diffraction in polycrystalline materials*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 664(1):324–331, 2012.
- [112] J. Allison et al.: *Recent developments in Geant4*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 835:186–225, 2016.
- [113] A. J. Kapadia, M. N. Lakshmanan, K. Krishnamurthy, P. Sahbaee, A. Chawla, S. Wolter, K. Maccabe, D. Brady und E. Samei: *Monte-Carlo simulations of a coded-aperture x-ray scatter imaging system for molecular imaging*. *Proc. SPIE 8668, Physics of Medical Imaging*, Seite 86680B, 2013.
- [114] B. de Man, S. Basu, N. Chandra, B. Dunham, P. Edic, M. Iatrou, S. McOlash, P. Sainath, C. Shaughnessy, B. Tower und E. Williams: *CatSim: a new computer assisted tomography simulation environment*. *Proc. SPIE 6510, Physics of Medical Imaging*, Seite 65102G, 2007.
- [115] C. Cozzini, G. Harding, P. Edic, D. Beque, D. Kosciesza, Y. Du und H. Strecker: *Energy dispersive X-ray diffraction spectral resolution considerations for security screening applications*. *IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record (NSS/MIC)*, Seiten 3873–3876, 2010.
- [116] B. Ghammraoui und A. Badal: *Monte Carlo simulation of novel breast imaging modalities based on coherent x-ray scattering*. *Physics in Medicine and Biology*, 59(13):3501–3516, 2014.
- [117] J. Baró, J. Sempau, J. M. Fernández-Varea und F. Salvat: *PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 100(1):31–46, 1995.
- [118] H. Hirayama, Y. Namito, A. F. Bielajew, S. J. Wilderman und W. R. Nelson: *The EGS5 code system*. SLAC-R-730, KEK-2005-8, KEK-REPORT-2005-8, 2005.
- [119] K. G. Lewis: *Coherent Scatter Computed Tomography (CSCT) - A Monte Carlo Simulation Study*. Dissertation, Vanderbilt University, Nashville TN, USA, 2013.
- [120] O. N. Vassiliev: *Monte Carlo Methods for Radiation Transport: Fundamentals and Advanced Topics*. Springer International Publishing, 2016, ISBN 9783319441412.
- [121] Iván Lux und László Koblinger: *Monte Carlo particle transport methods: neutron and photon calculations*. CRC Press, Boca Raton u.a., 1. Auflage, 1991, ISBN 9780849360749.
- [122] Q. Min und M. Duan: *A successive order of scattering model for solving vector radiative transfer in the atmosphere*. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 87(3-4):243–259, 2004.

- [123] J. T. Kajiya: *The Rendering Equation*. Proceedings of the 13th annual conference on Computer graphics and interactive techniques (SIGGRAPH), Seiten 143–150, 1986.
- [124] A. Thran, U. van Stevendaal und J. P. Schlomka: *Multiple scatter correction in coherent scatter computed tomography*. Proc. SPIE 5923, Penetrating Radiation Systems and Applications VII, Seite 59230P, 2005.
- [125] S. Jan, D. Benoit, E. Becheva, T. Carlier, F. Cassol, P. Descourt, T. Frisson, L. Grevillot, L. Guigues, L. Maigne, C. Morel, Y. Perrot, N. Rehfeld, D. Sarrut, D. R. Schaart, S. Stute, U. Pietrzyk, D. Visvikis, N. Zahra und I. Buvat: *GATE V6: a major enhancement of the GATE simulation platform enabling modelling of CT and radiotherapy*. Physics in Medicine and Biology, 56(4):881–901, 2011.
- [126] G. Poludniowski, P. M. Evans, V. N. Hansen und S. Webb: *An efficient Monte Carlo-based algorithm for scatter correction in keV cone-beam CT*. Physics in Medicine and Biology, 54(12):3847–3864, 2009.
- [127] A. P. Colijn und F. J. Beekman: *Accelerated Simulation of Cone Beam X-Ray Scatter Projections*. IEEE Transactions on Medical Imaging, 23(5):584–590, 2004.
- [128] INDC International Nuclear Data Committee: *Phase-Space Database for External Beam Radiotherapy*. Summary Report of a Consultants Meeting, 2005. <https://www-nds.iaea.org/phsp/>.
- [129] T. B. Fawcett, J. Faber, S. Kabbekodu, F. McClune und D. Rafaja: *PDF-4+, the material identification database*. Microstructure Analysis in Material Science, 2005.
- [130] C. L. Lawson und R. J. Hanson: *Solving Least-Squares Problems*. Classics in Applied Mathematics, SIAM, Seite 161, 1974.
- [131] E. Weidling: *Aufbau und Erprobung einer Röntgenanlage hoher Leistung zur orts aufgelösten Röntgendiffraktometrie*. Diplomarbeit, Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Deutschland, 2005.
- [132] V. A. Izhevskiy, L. A. Genova, J. C. Bressiani und A. H. A. Bressiani: *Review article: Silicon carbide. Structure, properties and processing*. Cerâmica, 46(297):4–13, 2000, ISSN 0366-6913.
- [133] S. Schlesinger und H. Bomsdorf: *Simulation based collimator design for X-ray diffraction imaging using the GATE toolkit*. IEEE International Conference Acoustics, Speech, and Signal Processing - Proceedings ICASSP99, Seiten 303–307, 2014.
- [134] S. Hintz: *Zerstörungsfreie Analytik an antiken Keramiken mittels orts aufgelöster Röntgendiffraktometrie und Computertomographie*. Bachelorarbeit, Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Deutschland, 2013.
- [135] E. J. Candes und T. Tao: *Decoding by Linear Programming*. IEEE Transactions on Information Theory, 51(12):4203–4215, 2005.
- [136] M. A. Davenport: *Random Observations on Random Observations: Sparse Signal Acquisition and Processing*. Dissertation, Rice University, Houston TX, USA, 2010.
- [137] E. J. Candès: *The restricted isometry property and its implications for compressed sensing*. Comptes Rendus Mathématique, 346(9-10):589–592, 2008.
- [138] D. L. Donoho und J. Tanner: *Neighborliness of randomly projected simplices in high dimensions*. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 102(27):9452–9457, 2005.

- [139] Y. Tsaig und D. L. Donoho: *Breakdown of equivalence between the minimal ℓ_1 -norm solution and the sparsest solution*. *Signal Processing*, 86(3):533–548, 2006.
- [140] S. Petra und C. Schnörr: *Average case recovery analysis of tomographic compressive sensing*. *Linear Algebra and its Applications*, 441:168–198, 2014.
- [141] J. S. Jorgensen und E. Y. Sidky: *How little data is enough? Phase-diagram analysis of sparsity-regularized X-ray computed tomography*. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, 373(2043), 2015.
- [142] M. Elad und M. Aharon: *Image Denoising Via Sparse and Redundant Representations Over Learned Dictionaries*. *IEEE Transactions on Image Processing*, 15(12):3736–3745, 2006, ISSN 1057-7149.
- [143] M. J. Fadili, J. L. Starck und F. Murtagh: *Inpainting and Zooming Using Sparse Representations*. *The Computer Journal*, 52(1):64–79, 2009, ISSN 0010-4620.
- [144] G. K. Wallace: *The JPEG still picture compression standard*. *IEEE Transactions on Consumer Electronics*, 38(1):xviii–xxxiv, 1992.
- [145] A. Skodras, C. Christopoulos und T. Ebrahimi: *The JPEG 2000 still image compression standard*. *IEEE Signal Processing Magazine*, 18(5):36–58, 2001.
- [146] A. M. Bruckstein, D. L. Donoho und M. Elad: *From Sparse Solutions of Systems of Equations to Sparse Modeling of Signals and Images*. *SIAM Review*, 51(1):34–81, 2009.
- [147] E. Candès, L. Demanet, D. Donoho und L. Ying: *Fast Discrete Curvelet Transforms*. *Multiscale Modeling & Simulation*, 5(3):861–899, 2006.
- [148] M. N. Do und M. Vetterli: *The contourlet transform: An efficient directional multiresolution image representation*. *IEEE Transactions on Image Processing*, 14(12):2091–2106, 2005.
- [149] E. Le Pennec und S. Mallat: *Sparse geometric image representations with bandelets*. *IEEE Transactions on Image Processing*, 14(4):423–438, 2005.
- [150] S. Mallat: *Geometrical grouplets*. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 26(2):161–180, 2009.
- [151] J. Mairal, F. Bach, J. Ponce und G. Sapiro: *Online dictionary learning for sparse coding*. *Proceedings of the 26th Annual International Conference on Machine Learning*, Seiten 689–696, 2009.
- [152] K. Engan, S. O. Aase und J. Hakon Husoy: *Method of optimal directions for frame design*. *IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing - Proceedings ICASSP99*, Seiten 2443–2446 vol.5, 1999.
- [153] M. Aharon: *Overcomplete Dictionaries for Sparse Representation of Signals*. *Dissertation, Technion, Haifa, Israel*, 2006.
- [154] J. A. Hartigan und M. A. Wong: *Algorithm AS 136: A K-Means Clustering Algorithm*. *Applied Statistics*, 28(1):100, 1979.
- [155] M. Aharon, M. Elad und A. Bruckstein: *K-SVD: An Algorithm for Designing Overcomplete Dictionaries for Sparse Representation*. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 54(11):4311–4322, 2006.
- [156] S. G. Mallat und Z. Zhang: *Matching pursuits with time-frequency dictionaries*. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 41(12):3397–3415, 1993.

- [157] Y. C. Pati, R. Rezaifar und P. S. Krishnaprasad: *Orthogonal matching pursuit: recursive function approximation with applications to wavelet decomposition*. IEEE Conference record of the Twenty-seventh Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers, Seiten 40–44, 1993.
- [158] S. S. Chen, D. L. Donoho und M. A. Saunders: *Atomic Decomposition by Basis Pursuit*. SIAM Journal on Scientific Computing, 20(1):33–61, 1998.
- [159] E. van den Berg und M. P. Friedlander: *Probing the Pareto Frontier for Basis Pursuit Solutions*. SIAM Journal on Scientific Computing, 31(2):890–912, 2009.
- [160] A. Y. Yang, Z. Zhou, S. S. Balasubramanian, A. G. and Sastry und Y. Ma: *Fast l_1 -minimization algorithms for robust face recognition*. IEEE transactions on image processing: a publication of the IEEE Signal Processing Society, 22(8):3234–3246, 2013.
- [161] A. Beck und M. Teboulle: *A Fast Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm for Linear Inverse Problems*. SIAM Journal on Imaging Sciences, 2(1):183–202, 2009.
- [162] Ignace Loris: *On the performance of algorithms for the minimization of ℓ_1 -penalized functionals*. Inverse problems, 25(3):035008, 2009.
- [163] M. A. T. Figueiredo, R. D. Nowak und S. J. Wright: *Gradient Projection for Sparse Reconstruction: Application to Compressed Sensing and Other Inverse Problems*. IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing, 1(4):586–597, 2007.
- [164] B. Efron, T. Hastie, I. Johnstone und R. Tibshirani: *Least angle regression*. The Annals of Statistics, 32(2):407–499, 2004.
- [165] E. T. Hale, W. Yin und Y. Zhang: *Fixed-Point Continuation for ℓ_1 -Minimization: Methodology and Convergence*. SIAM Journal on Optimization, 19(3):1107–1130, 2008.
- [166] G. H. Golub, P. C. Hansen und D. P. O’Leary: *Tikhonov Regularization and Total Least Squares*. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 21(1):185–194, 1999.
- [167] J. B. T. M. Roerdink und A. Meijster: *The Watershed Transform: Definitions, Algorithms and Parallelization Strategies*. Fundamenta Informaticae, 41(1,2):187–228, 2000.
- [168] J. Kaipio und E. Somersalo: *Statistical inverse problems: Discretization, model reduction and inverse crimes*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 198(2):493–504, 2007.
- [169] R. N. Bracewell: *Two-Dimensional imaging*. Prentice-Hall signal processing series. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1995.
- [170] M. F. Duarte, M. A. Davenport, D. Takhar, J. N. Laska, T. Sun, K. F. Kelly und R. G. Baraniuk: *Single-pixel imaging via compressive sampling*. IEEE Signal Processing Magazine, 25(2):83–91, 2008.
- [171] A. Savitzky und M. J. E. Golay: *Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures*. Analytical Chemistry, 36(8):1627–1639, 1964.
- [172] O. G. Guleryuz: *Nonlinear approximation based image recovery using adaptive sparse reconstructions and iterated denoising-part II: Adaptive algorithms*. IEEE Transactions on Image Processing, 15(3):555–571, 2006.
- [173] O. Lazzari, C. K. Egan, S. D. M. Jacques, T. Sochi, M. Di Michiel, R. J. Cernik und P. Barnes: *A new approach to synchrotron energy-dispersive X-ray diffraction computed tomography*. Journal of synchrotron radiation, 19(4):471–477, 2012.

- [174] G. Harding: *X-ray scatter tomography for explosives detection*. Radiation Physics and Chemistry, 71(3-4):869–881, 2004.
- [175] A. K. Louis: *Inverse und schlecht gestellte Probleme*. Mathematische Methoden in der Technik. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 1989, ISBN 3322848086.
- [176] T. Elfving, P. C. Hansen und T. Nikazad: *Semi-convergence properties of Kaczmarz's method*. Inverse problems, 30(5):055007, 2014, ISSN 0266-5611.
- [177] J. F. Barrett und N. Keat: *Artifacts in CT: Recognition and avoidance*. Radiographics : a review publication of the Radiological Society of North America, Inc, 24(6):1679–1691, 2004.
- [178] N. Kucuk, M. Cakir und N. A. Isitman: *Mass attenuation coefficients, effective atomic numbers and effective electron densities for some polymers*. Radiation protection dosimetry, 153(1):127–134, 2013.
- [179] K. Jonuleit: *Aufbau und Erprobung eines Computertomographen in einer energiedispersiven Röntgenbeugungsanlage*. Bachelorarbeit, Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Deutschland, 2014.
- [180] B. Wingerath: *Entwicklung und Erprobung einer Steuerungssoftware für ein CT-System*. Bachelorarbeit, Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Deutschland, 2014.
- [181] G. C. Sharp, N. Kandasamy, H. Singh und M. Folkert: *GPU-based streaming architectures for fast cone-beam CT image reconstruction and demons deformable registration*. Physics in medicine and biology, 52(19):5771–5783, 2007.
- [182] R. Rubinstein, M. Zibulevsky und M. Elad: *Efficient Implementation of the K-SVD Algorithm using Batch Orthogonal Matching Pursuit*. Technischer Bericht, Technion, Israel Institute of Technology, August 2008. <http://www.cs.technion.ac.il/users/wwwb/cgi-bin/tr-get.cgi/2008/CS/CS-2008-08.revised.pdf>.
- [183] G. Harding: *Effective density and atomic number determined from diffraction profiles*. Proc. SPIE 6319, Hard X-Ray and Gamma-Ray Detector Physics and Penetrating Radiation Systems VIII, Seite 63191O, 2006.
- [184] F. E. Boas und D. Fleischmann: *Computed tomography artifacts: Causes and reduction techniques*. Imaging in Medicine, 4(2):229–240, 2012.
- [185] V. Schoß: *Martensitische Umwandlung und Ermüdung austenitischer Edelstähle, Gefügeveränderungen und Möglichkeiten der Früherkennung von Ermüdungsschädigungen*. Dissertation, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Sachsen, Germany, 2001.
- [186] E. M. A. Anas, J. G. Kim, S. Y. Lee und K. Hasan: *Comparison of ring artifact removal methods using flat panel detector based CT images*. Biomedical engineering online, 10(1):72–96, 2011.
- [187] E. M. Abu Anas, S. Y. Lee und M. K. Hasan: *Removal of ring artifacts in CT imaging through detection and correction of stripes in the sinogram*. Physics in medicine and biology, 55(22):6911–6930, 2010.
- [188] H. Hu: *Texture of Metals*. Texture, 1(4):233–258, 1974.
- [189] C. Constantinou, F. H. Attix und B. R. Paliwal: *A solid water phantom material for radiotherapy x-ray and gamma-ray beam calibrations*. Medical physics, 9(3):436–441, 1982.
- [190] E. J. Cook, S. Pani, L. George, S. Hardwick, J. A. Horrocks und R. D. Speller: *Multivariate Data Analysis for Drug Identification Using Energy-Dispersive X-Ray Diffraction*. IEEE Transactions on Nuclear Science, 56(3):1459–1464, 2009.

- [191] Josef Köhler, Rudolf Meyer und Axel Homburg: *Explosivstoffe*. Wiley - VCH, 10., vollst. überarb. Aufl. Auflage, 2008, ISBN 3527320091.
- [192] J. Li, Z. Du, R. E. Ruther, S. J. An, L. A. David, K. Hays, M. Wood, N. D. Phillip, Y. Sheng, C. Mao, S. Kalnaus, C. Daniel und D. L. Wood: *Toward Low-Cost, High-Energy Density, and High-Power Density Lithium-Ion Batteries*. JOM, 69(9):1484–1496, 2017.
- [193] IEA Publications: *Global EV Outlook 2017*. Technischer Bericht, International Energy Agency, Juni 2017. <https://www.iea.org/publications/freepublications/publication/GlobalEVOutlook2017.pdf>.
- [194] L. Ahmadi, S. B. Young, M. Fowler, R. A. Fraser und M. A. Achachlouei: *A cascaded life cycle: Reuse of electric vehicle lithium-ion battery packs in energy storage systems*. The International Journal of Life Cycle Assessment, 22(1):111–124, 2017.
- [195] S Fischhaber, A. Regett, S. F. Schuster und H. Hesse: *Studie: Second-Life-Konzepte für Lithium-Ionen-Batterien aus Elektrofahrzeugen. Analyse von Nachnutzungsanwendungen, ökonomischen und ökologischen Potenzialen*. Technischer Bericht, Begleit- und Wirkungsforschung Schaulenster Elektromobilität (BuW), 2016.
- [196] V. Yufit, P. Shearing, R. W. Hamilton, P. D. Lee, M. Wu und N. P. Brandon: *Investigation of lithium-ion polymer battery cell failure using X-ray computed tomography*. Electrochemistry Communications, 13(6):608–610, 2011.
- [197] H. Murayama, K. Kitada, K. Fukuda, A. Mitsui, K. Ohara, H. Arai, Y. Uchimoto, Z. Ogumi und E. Matsubara: *Spectroscopic X-ray Diffraction for Microfocus Inspection of Li-Ion Batteries*. The Journal of Physical Chemistry C, 118(36):20750–20755, 2014.
- [198] H. He, B. Liu, A. Abouimrane, Y. Ren, Y. Liu, Q. Liu und Z. S. Chao: *Dynamic Lithium Intercalation/Deintercalation in 18650 Lithium Ion Battery by Time-Resolved High Energy Synchrotron X-Ray Diffraction*. Journal of The Electrochemical Society, 162(10):A2195–A2200, 2015.
- [199] N. S. Nazer, V. A. Yartys, T. Azib, M. Latroche, F. Cuevas, S. Forseth, P.J.S. Vie, R. V. Denys, M. H. Sørby, B. C. Hauback, L. Arnberg und P. F. Henry: *In operando neutron diffraction study of a commercial graphite/(Ni, Mn, Co) oxide-based multi-component lithium ion battery*. Journal of Power Sources, 326:93–103, 2016.
- [200] B. Scrosati und J. Garche: *Lithium batteries: Status, prospects and future*. Journal of Power Sources, 195(9):2419–2430, 2010.
- [201] N. Nitta, F. Wu, J. T. Lee und G. Yushin: *Li-ion battery materials: Present and future*. Materials Today, 18(5):252–264, 2015.
- [202] A. Dinger, M. Ripley, X. Mosquet, M. Rabl, D. Rizoulis, M. Russo und G. Sticher: *Batteries for Electric Cars*. Technischer Bericht, The Boston Consulting Group, 2010. <https://www.bcg.com/documents/file36615.pdf>.
- [203] J. R. Dahn: *Phase diagram of Li_xC₆*. Physical Review B, 44(17):9170–9177, 1991.
- [204] W. Wi, J. Reimers und J. Dahn: *In situ x-ray diffraction and electrochemical studies of Li_{1-x}NiO₂*. Solid State Ionics, 67(1-2):123–130, 1993.
- [205] J. Vetter, P. Novák, M. R. Wagner, C. Veit, K. C. Möller, J. O. Besenhard, M. Winter, M. Wohlfahrt-Mehrens, C. Vogler und A. Hammouche: *Ageing mechanisms in lithium-ion batteries*. Journal of Power Sources, 147(1-2):269–281, 2005.

- [206] H. Gabrisch, Y. Ozawa und R. Yazami: *Crystal structure studies of thermally aged LiCoO₂ and LiMn₂O₄ cathodes*. *Electrochimica Acta*, 52(4):1499–1506, 2006, ISSN 00134686.
- [207] E. Peled und S. Menkin: *Review—SEI: Past, Present and Future*. *Journal of The Electrochemical Society*, 164(7):A1703–A1719, 2017.
- [208] M. B. Pinson und M. Z. Bazant: *Theory of SEI Formation in Rechargeable Batteries: Capacity Fade, Accelerated Aging and Lifetime Prediction*. *Journal of The Electrochemical Society*, 160(2):A243–A250, 2012.
- [209] S. J. An, J. Li, C. Daniel, D. Mohanty, S. Nagpure und D. L. Wood: *The state of understanding of the lithium-ion-battery graphite solid electrolyte interphase (SEI) and its relationship to formation cycling*. *Carbon*, 105:52–76, 2016.
- [210] K. Benning: *Untersuchungen zur kontaktlosen Messung des state-of-health von Li-Ionen-Akkumulatoren mit Hilfe von Röntgenmethoden*. Bachelorarbeit, Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Deutschland, 2017.
- [211] Schlesinger S. und H. Bomsdorf: *Non-destructive X-ray Diffraction Tomography with Cone-Beam CT Systems - Visualizing the Local Charge Distribution of Li-ion Batteries -*. 7th Conference on Industrial Computed Tomography, Leuven, Belgium, 2017.
- [212] K. M. Nikolowski: *In situ Strukturuntersuchungen an Li(Ni,Co)O₂ als Kathodenmaterial für Lithiumionenbatterien*. Dissertation, TU Darmstadt, Darmstadt, Deutschland, 2007.
- [213] R. Hausbrand, G. Cherkashinin, H. Ehrenberg, M. Gröting, K. Albe, C. Hess und W. Jaegermann: *Fundamental degradation mechanisms of layered oxide Li-ion battery cathode materials: Methodology, insights and novel approaches*. *Materials Science and Engineering: B*, 192:3–25, 2015.
- [214] P. Kalyani und N. Kalaiselvi: *Various aspects of LiNiO₂ chemistry: A review*. *Science and Technology of Advanced Materials*, 6(6):689–703, 2016.
- [215] D. P. Cormode, S. Si-Mohamed, D. Bar-Ness, M. Sigovan, P. C. Naha, J. Balegamire, F. Lavenne, P. Coulon, E. Roessl, M. Bartels, M. Rokni, I. Blevis, L. Bousset und P. Douek: *Multicolor spectral photon-counting computed tomography: In vivo dual contrast imaging with a high count rate scanner*. *Scientific reports*, 7(1):4784, 2017.
- [216] A. Pourmorteza, R. Symons, V. Sandfort, M. Mallek, M. K. Fuld, G. Henderson, E. C. Jones, A. A. Malayeri, L. R. Folio und D. A. Bluemke: *Abdominal Imaging with Contrast-enhanced Photon-counting CT: First Human Experience*. *Radiology*, 279(1):239–245, 2016.
- [217] Smiths Detection: *Smiths Detection takes checkpoint security to a new level*. Technischer Bericht, Pressemitteilung, 2017. https://www.smithsdetection.com/index.php?option=com_k2&view=item&id=619:smiths-detection-takes-checkpoint-security-to-a-new-level&Itemid=136#.WjbgZd_iaUk.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungskommission vorgelegt und auch nicht veröffentlicht.

Wuppertal, den 22.12.2017

Simon Schlesinger

