



Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg
Hamburg University of Applied Sciences

Bachelorthesis

Nils Mosch

Software zur Berechnung von Röntgenspektren
mit beliebiger Spannung und Vorfilterung auf
Basis von Rohdaten

Nils Mosch

Software zur Berechnung von Röntgenspektren mit
beliebiger Spannung und Vorfilterung auf Basis von
Rohdaten

Bachelorthesis eingereicht im Rahmen der Bachelorprüfung
im Studiengang Informations- und Elektrotechnik
am Department Informations- und Elektrotechnik
der Fakultät Technik und Informatik
der Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg

Betreuender Prüfer : Prof. Dr. Robert Heß
Zweitgutachterin : Prof. Dr. Heike Neumann

Abgegeben am 24. September 2018

Nils Mosch

Thema der Bachelorthesis

Software zur Berechnung von Röntgenspektren mit beliebiger Spannung und Vorfilterung auf Basis von Rohdaten

Stichworte

Röntgenspektrum, TASMICS, Simulation von Röntgenspektren

Kurzzusammenfassung

In dieser Thesis wird eine Software in der Programmiersprache C++ geschrieben, die Röntgenspektren mit beliebiger Spannung und Vorfilterung berechnet. Grundlage für die Berechnung der Spektren sind hierbei die Rohdaten des TASMICS Modells. Unter der Verwendung des Lambert-Beerschen Gesetzes werden die Röntgenspektren gefiltert. Abschließend wird die Software zur Röntgenspektrenerzeugung in die bereits bestehende Software CT-Simulation eingebaut.

Nils Mosch

Title of the paper

Software for calculating X-ray spectra with arbitrary voltage and prefiltering based on raw data

Keywords

X-Ray spectrum, TASMICS, simulation of X-Ray spectra

Abstract

This thesis involves writing software in the C++ programming language, which calculates x-ray spectra with any voltage and prefiltering. Here, the calculation of the spectra is based on the raw data of the TASMICS model. The x-ray spectra are filtered using the Lambert-Beer law. Finally, the software for producing x-ray spectra is incorporated into the existing CT-Simulation software.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	7
2. Grundlagen	8
2.1. Aufbau und Funktionsweise einer Röntgenröhre	8
2.2. Photonen und Röntgenstrahlung	9
2.3. Grundprinzip der Erzeugung von Röntgenstrahlung	12
2.3.1. Bremsstrahlung	13
2.3.2. Charakteristische Strahlung	14
2.3.3. Augereffekt	16
2.3.4. Röntgenspektrum	17
2.4. Abschwächung der Röntgenstrahlung durch Materie	19
2.4.1. Photoeffekt	21
2.4.2. Compton-Streuung	22
2.4.3. Rayleigh-Streuung	23
2.4.4. Paarbildung	24
2.4.5. Triplettbildung	24
2.5. Raumwinkel	24
2.6. Monte-Carlo-Simulation	25
2.7. Tungsten anode spectral model using interpolating cubic splines	27
2.8. Tungsten anode spectral model interpolating polynomials	29
2.9. Theorie zur Röntgenspektrenerzeugung von Birch und Marshall	30
2.10. Bestimmtheitsmaß	31
2.10.1. Allgemeines	31
2.10.2. Verwendung in dieser Thesis	31
2.11. Einführung in die Software CT-Simulation	32
3. Anforderungen	35
3.1. Funktionale Anforderungen	35
3.2. Nicht funktionale Anforderungen	36
3.3. Softwareanforderungen an die CT-Simulation-Software	37
4. Design	38
4.1. Entscheidung für ein Röntgenspektrenmodell	38

4.2. High Level Design	40
4.2.1. Aufteilung der Aufgabe in einzelne Komponenten	41
4.2.2. TASMICS Rohdaten auslesen und speichern	41
4.2.3. Interpolation zwischen den TASMICS Spektren	42
4.2.4. Filterung des Röntgenspektrums	43
4.3. Programmablauf der Software zur Röntgenspektrenerzeugung	46
4.4. Einbau des Programmcodes in die Software CT-Simulation	48
4.4.1. Ausgangsversion der Röntgenspektrumssimulation	48
4.4.2. Anpassungen der Software CT-Simulation	49
4.4.3. Anpassungen der Software zur Röntgenspektrens simulation	49
5. Implementierung	50
5.1. TASMICS Rohdaten auslesen und speichern	50
5.2. Interpolation zwischen den TASMICS Spektren	51
5.3. Filterung des Röntgenspektrums	55
5.4. Einbau des Programmcodes in die Software CT-Simulation	56
5.4.1. Anpassungen der Software CT-Simulation	56
5.4.2. Anpassungen der Software zur Röntgenspektrens simulation	58
6. Test	59
6.1. Test der einzelnen Klassen	59
6.1.1. TASMICS Rohdaten auslesen und speichern	60
6.1.2. Interpolation zwischen den TASMICS Spektren	60
6.1.3. Filterung des Röntgenspektrums	61
6.2. Darstellung der Ergebnisse	63
6.2.1. Röntgenspektren mit unterschiedlichen Röhrenspannungen	63
6.2.2. Röntgenspektren mit Aluminiumfilterung unterschiedlicher Dicke	65
6.2.3. Röntgenspektren mit Filterung von unterschiedlichen Materialien	66
6.2.4. Lineares Ende des Röntgenspektrums	67
6.3. Vergleich mit anderen Simulationstools	68
6.3.1. Vergleich mit dem TASMICS Excel Sheet von John M. Boone	68
6.3.2. Vergleich mit einem Simulationstool basierend auf Birch und Marshall	70
6.4. Test der Software CT-Simulation	73
7. Fazit	75
7.1. Zusammenfassung	75
7.2. Ausblick	76
Tabellenverzeichnis	77
Abbildungsverzeichnis	78

Literaturverzeichnis	80
A. Anhang	82
A.1. CD-Struktur	82
A.2. Ausführung des Programms	83
A.2.1. Benötigte Software	83
A.3. Erweiterte Einstellungen	83

1. Einleitung

Aufgrund des demographischen Wandels wird der Anteil der über 65-jährigen an der Gesamtbevölkerung in den nächsten Jahren stark anwachsen. Da die Anfälligkeit für Krankheiten bei dieser Bevölkerungsgruppe besonders groß ist, wird es einen erhöhten Bedarf an verbesserten bildgebenden Systemen zur Unterstützung der Diagnose und Heilung dieser Krankheiten geben. Mit diesen Systemen ist es möglich, die inneren Organe und Knochen des Menschen in zwei- oder dreidimensionalen Aufnahmen darzustellen. Bei vielen bildgebenden Systemen kommt Röntgenstrahlung zur Anwendung. Röntgenstrahlung stellt für den Patienten und für die behandelnden Ärzte ein Gesundheitsrisiko dar. Deshalb lautet die Maxime der Forschung im Röntgenbereich, kontrastreiche Bilder bei möglichst geringer Strahlendosis zu erzeugen. Um dieses Ziel zu erreichen werden Tools eingesetzt, die gesamte Röntgensysteme simulieren können.

In dieser Arbeit soll eine Software entwickelt werden, die Röntgenspektren simuliert. Diese Software soll Röntgenspektren mit beliebiger Röhrenspannung zwischen 10 kV und 150 kV berechnen. Die Spektren sollen mit einem durch die Wissenschaft anerkannten Simulationsmodell berechnet werden, welches möglichst genaue Ergebnisse liefert. Dazu werden verschiedene Röntgenspektrumssimulationsmodelle miteinander verglichen und es wird ermittelt, welches am geeignetsten ist. Außerdem soll die Software in der Lage sein, diese Röntgenspektren mit verschiedenen Materialien zu filtern. Die simulierten Röntgenspektren werden mit Spektren aus anderen Simulationstools verglichen. Danach werden die Ergebnisse dieses Vergleichs diskutiert. Abschließend wird die Software, die in dieser Thesis entwickelt wurde, in die bereits bestehende Software CT-Simulation integriert. Die Änderungen, die bei der Integration vorgenommen wurden, werden in dieser Bachelorthesis dokumentiert.

2. Grundlagen

2.1. Aufbau und Funktionsweise einer Röntgenröhre

Seit ihrer Entdeckung durch Wilhelm Conrad Röntgen im Jahre 1895 wird die Röntgenstrahlung im diagnostischen Bereich eingesetzt. Sie ist eines der am häufigsten angewandten Verfahren in der medizinischen Bildgebung. Dabei wird der Patient mit der durch die Röntgenröhre (siehe Abbildung 2.1) erzeugten Strahlung durchleuchtet. Eine Röntgenröhre besteht im Wesentlichen aus einer Anode und einer beheizbaren Kathode, die sich im Vakuum befinden. Die Kathode stellt eine punktförmige Elektronenquelle dar. Ihre Glühwendel bestehen meistens aus Wolframdraht. Sie werden auf ca. 2600°C erhitzt, wodurch Elektronen aus der Kathode freigesetzt werden.

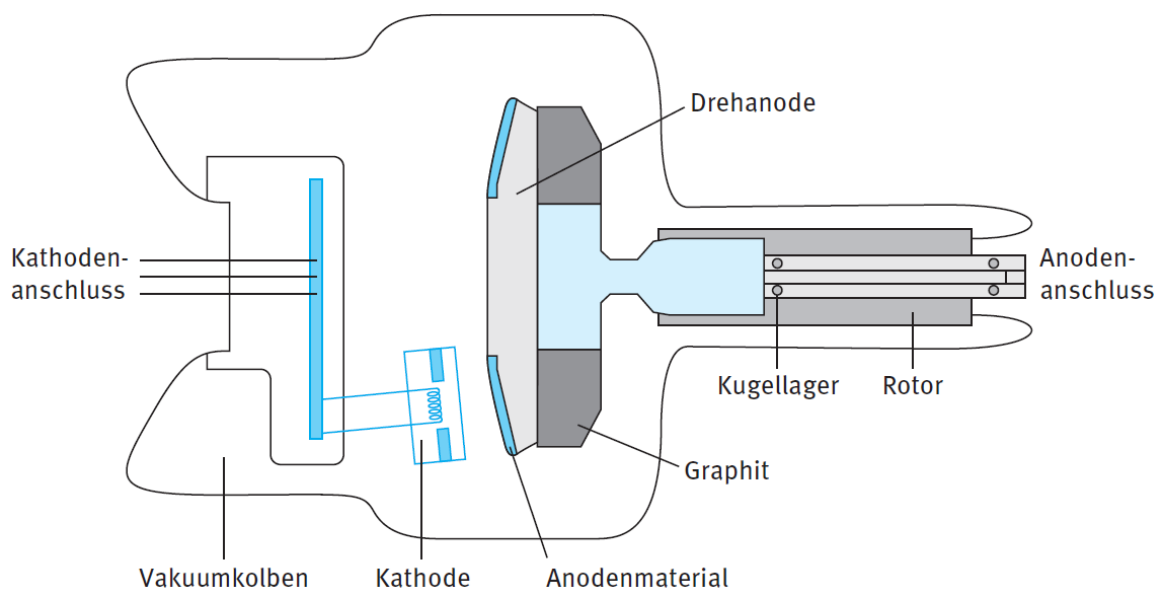


Abbildung 2.1.: Schematische Darstellung einer Röntgenröhre mit Drehanode [4]

Die freigesetzten Elektronen aus der Kathode werden dann mit der Anodenspannung, die zwischen Kathode und Anode angelegt ist, zur Anode hin beschleunigt (siehe Abbildung 2.2).

Die Beschleunigungsspannung liegt dabei zwischen 20 kV und 150 kV. Abhängig von der Größe des Heizstromes können sich Anodenstromstärken zwischen einigen Milliampere und 1,5 Ampere ergeben. Die meisten freigesetzten Elektronen der Kathode treffen dabei auf die Elektronen der Atome des Anodenmaterials und werden dadurch abgebremst. Durch Wechselwirkungen, die durch das Abbremsen der Elektronen verursacht werden, entsteht Röntgenstrahlung. Die Wechselwirkungen werden in dem Abschnitt 2.3 näher erläutert. Bei diesen Kollisionen wird ca. 99 % der freiwerdenden Energie in Wärme umgewandelt. Die sehr geringe Restenergie wird in Röntgenstrahlung umgesetzt. Um die entstehende Wärme abzuführen, rotiert der Anodenteller sehr schnell. Außerdem ist die Anode etwas schräg gestellt, wodurch die Wärme auf eine große Fläche verteilt wird. Durch die Verwendung von Kühlflüssigkeit wird zusätzlich Wärme abgeführt. [4, 11]

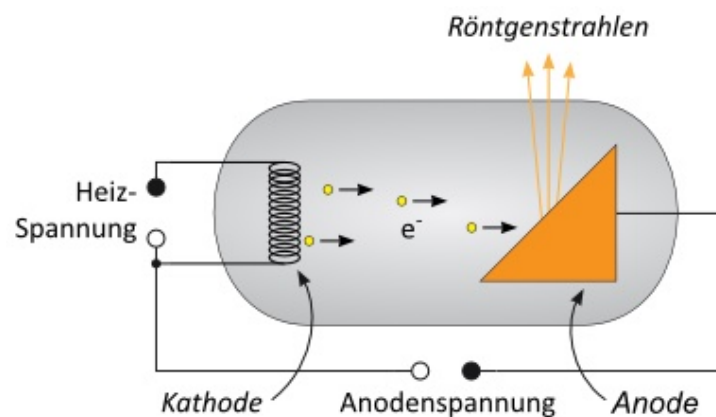


Abbildung 2.2.: Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre¹

2.2. Photonen und Röntgenstrahlung

Röntgenstrahlen sind elektromagnetische Wellen. Zu den elektromagnetischen Wellen gehören neben den Röntgenstrahlen auch die technischen Wechselströme, die Wärmestrahlung (Infrarot), das sichtbare Licht und die ultraviolette Strahlung. Sie werden nach ihrem Gebrauch oder ihrer Herkunft unterschieden (siehe Tabelle 2.1).

Eine Welle ist eine sich räumlich ausbreitende und von der Zeit abhängige periodische Schwingung, bei der Energie in Ausbreitungsrichtung transportiert wird.

¹Quelle <https://lp.uni-goettingen.de/get/text/5351> aufgerufen am 28.03.2018

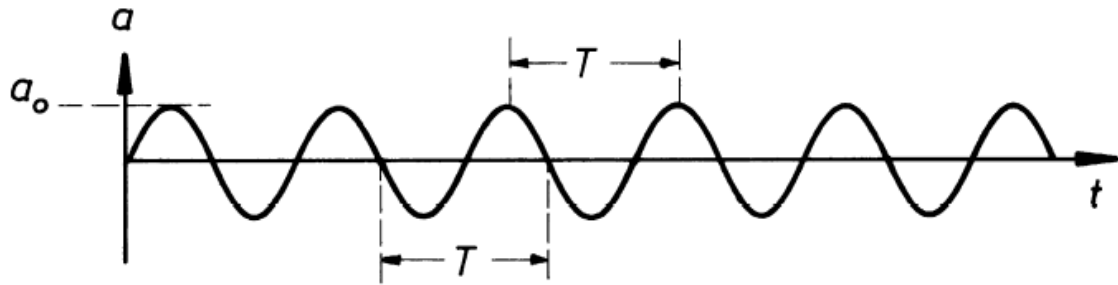


Abbildung 2.3.: Darstellung des Zeitverlaufs einer sinusförmigen Welle (T : Schwingungsdauer, a : Auslenkung, a_0 : Amplitude) [10]

Dabei wird die Welle um eine bestimmte Ruhelage in vertikaler Richtung ausgelenkt. Diese Auslenkung der Welle wird als Amplitude a_0 bezeichnet. Zwei weitere charakteristische Größen einer Welle sind die Schwingungsdauer T und die Frequenz f . Die Schwingungsdauer drückt den zeitlichen Abstand zwischen zwei benachbarten Schwingungszuständen aus, die den gleichen Wert der Auslenkung und die gleiche Schwingungsrichtung haben. Die Schwingungsdauer und die Frequenz können über den Zusammenhang

$$f = \frac{1}{T} \quad (2.1)$$

in einander umgerechnet werden. Dabei wird die Frequenz in Schwingungen pro Sekunde ($\text{Hz} = \text{s}^{-1}$) angegeben. Die Wellenlänge λ ist genau die Strecke, die die Welle während einer Schwingungsdauer T zurückgelegt hat. Dadurch kann die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle v über den Zusammenhang

$$v = \lambda \cdot f = \frac{\lambda}{T} \quad (2.2)$$

berechnet werden. Sie ist im Vakuum unabhängig von der Wellenlänge, der Frequenz oder von der Schwingungsdauer der Welle. Die Welle breitet sich mit Lichtgeschwindigkeit $c = 2,997\,924\,58 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$ aus. Im Gegensatz zu Schallwellen, können sich elektromagnetische Wellen auch im Vakuum ausbreiten. Das heißt, sie benötigen kein Transportmedium, um sich auszubreiten. Ein elektrisches und ein magnetisches Feld erzeugen sich wechselseitig. Sie sind Träger der elektromagnetischen Energie und transportieren diese in Ausbreitungsrichtung der Welle. Dabei stehen die elektrische Feldstärke \vec{E} und die magnetische Kraftflussdichte \vec{B} senkrecht aufeinander. Die beiden Schwingungen sind räumlich und zeitlich periodisch, unterscheiden sich in ihrer Phase jedoch um 90° .

Gelangen elektrische Ladungen q in den Wirkungsbereich von elektromagnetischen Wellen, wird auf die Ladungen eine durch die elektrische Feldstärke \vec{E} erzeugte Kraft \vec{F} ausgeübt.

$$\vec{F} = q \cdot \vec{E} \quad (2.3)$$

In der Realität sind elektromagnetische Wellen räumlich und zeitlich begrenzt, haben eine bestimmte Energieunschärfe und eine Ortsunbestimmtheit. Sie treten also in Wellenpaketen mit variabler Wellenlänge auf (siehe Abbildung 2.4).

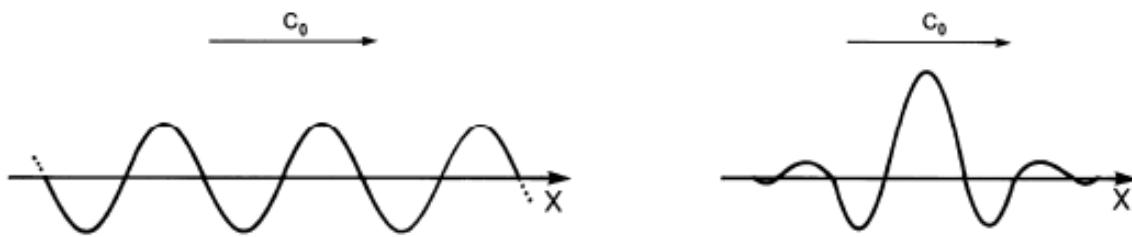


Abbildung 2.4.: Schematische Darstellung einer kontinuierlichen elektromagnetischen Welle (links) und ein Wellenpaket (Quant oder Photon) mit variabler Wellenlänge (rechts)

Solche Wellenpakete werden auch Quanten oder Photonen genannt. Gemäß ihrer Herkunft, werden sie in Licht-, Gamma-, oder Röntgenquanten unterteilt. Die Energie eines Photons E_γ setzt sich aus dem Produkt der Frequenz f und dem Planckschem Wirkungsquantum $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \approx 4,136 \cdot 10^{-15} \text{ eV s}$ zusammen.

$$E_\gamma = h \cdot f \quad (2.4)$$

Wie bei Photonen gibt es bei klassischen Wellen einen Zusammenhang zwischen Ausbreitungsgeschwindigkeit, Wellenlänge und Frequenz. Dabei entspricht die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Photonen genau der Lichtgeschwindigkeit, da Photonen nur bei Lichtgeschwindigkeit existieren können. Aus dieser Erkenntnis und Gleichung (2.2) folgt:

$$c = \lambda \cdot f = \frac{\lambda}{T} \quad (2.5)$$

In der modernen Physik werden Photonen im Rahmen der Quantentheorie beschrieben. Der Grund dafür ist, dass Photonen sowohl Eigenschaften von Wellen (wie z.B. Frequenz und Wellenlänge), als auch Teilcheneigenschaften (wie eine relativistische Masse) besitzen. Außerdem unterliegen Photonen einer zeitlichen und räumlichen Begrenzung. Dieses wird als Teilchen-Wellen-Dualismus bezeichnet.

Werden die Einsteinsche Massen-Energie-Beziehung

$$E = m \cdot c^2 \quad (2.6)$$

und die Gleichung 2.4 auf Photonen angewendet, so kann die Masse eines Photons über den Zusammenhang

$$m_{ph} = \frac{h \cdot f}{c^2} = \frac{h}{c \cdot \lambda} \quad (2.7)$$

berechnet werden. [10]

Bezeichnung der Welle	Frequenz in Hz	Wellenlänge	Energie in eV
Techn. Wechselströme	$50 - 3 \cdot 10^3$	6000 - 1000 km	$2 \cdot 10^{-13} - 10^{-11}$
Telegrafiewellen	$3 \cdot 10^2 - 3 \cdot 10^3$	1000 - 100 km	$10^{-12} - 10^{-11}$
Langwellen	$3 \cdot 10^4 - 3 \cdot 10^5$	10 - 1 km	$10^{-10} - 10^{-9}$
Mittelwellen	$3 \cdot 10^5 - 3 \cdot 10^6$	1000 - 100 m	$10^{-9} - 10^{-8}$
Kurzwellen	$3 \cdot 10^6 - 3 \cdot 10^7$	100 - 10 m	$10^{-8} - 10^{-7}$
Ultrakurzwellen	$3 \cdot 10^7 - 3 \cdot 10^8$	10 - 1 m	$10^{-7} - 10^{-6}$
Dezimeterwellen	$3 \cdot 10^8 - 3 \cdot 10^9$	1 - 0,1 m	$10^{-6} - 10^{-5}$
Zentimeterwellen	$3 \cdot 10^9 - 3 \cdot 10^{10}$	10 - 1 cm	$10^{-5} - 10^{-4}$
Millimeterwellen	$3 \cdot 10^{10} - 3 \cdot 10^{11}$	10 - 1 mm	$10^{-4} - 10^{-3}$
Wärmestrahlung	$3 \cdot 10^{11} - 3 \cdot 10^{14}$	1,5 mm - 800 nm	$10^{-3} - 2$
Sichtbares Licht	$4 \cdot 10^{14} - 7 \cdot 10^{14}$	800 nm - 400 nm	2 - 3,1
Ultraviolett	$7,5 \cdot 10^{14} - 10^{16}$	400 - 3 nm	3,1 - 40
Röntgen-, Gammastrl.	$10^{15} - 5 \cdot 10^{24}$	$3 \cdot 10^{-8} - 6 \cdot 10^{-17}$ m	$4 - 2 \cdot 10^{10}$
Extrem weich	$10^{15} - 10^{18}$	$3 \cdot 10^{-8} - 3 \cdot 10^{-10}$ m	$4 - 4 \cdot 10^{-3}$
Weich	$10^{18} - 5 \cdot 10^{18}$	$3 \cdot 10^{-10} - 6 \cdot 10^{-11}$ m	$4 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^4$
Mittel	$5 \cdot 10^{18} - 3 \cdot 10^{19}$	$6 \cdot 10^{-11} - 10^{-11}$ m	$2 \cdot 10^4 - 10^5$
Hart	$3 \cdot 10^{19} - 10^{20}$	$1 \cdot 10^{-11} - 3 \cdot 10^{-12}$ m	$10^5 - 4 \cdot 10^5$
Extrem hart	$10^{20} - 5 \cdot 10^{20}$	$3 \cdot 10^{-12} - 6 \cdot 10^{-17}$ m	$4 \cdot 10^5 - 2 \cdot 10^{10}$

Tabelle 2.1.: Spektrum elektromagnetischer Wellen (erstellt mit Daten aus [10])

2.3. Grundprinzip der Erzeugung von Röntgenstrahlung

Röntgenstrahlung im medizintechnischen Bereich wird mit Hilfe von Röntgenröhren durch das Abbremsen von beschleunigten Elektronen erzeugt. In diesem Abschnitt werden die verschiedenen Arten der Röntgenstrahlungserzeugung erklärt.

Wie die Elektronen in einer Röntgenröhre beschleunigt und auf das Anodenmaterial gelenkt werden, ist im Abschnitt 2.1 beschrieben. Die meisten der beschleunigten Elektronen treten dabei in das Anodenmaterial ein und treffen auf die Elektronen in den Atomhüllen.

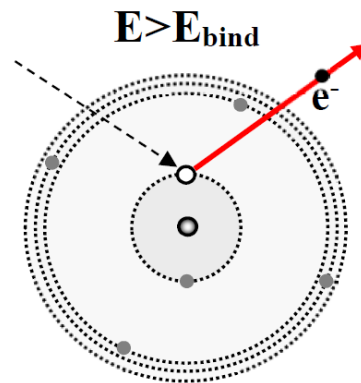


Abbildung 2.5.: Ionisation eines Hüllenelektron am Beispiel eines Kohlenstoffatoms

Sobald die Energie des auftreffenden Elektrons die Bindungsenergie des Elektrons aus der Atomhülle übersteigt, kann es aus der Atomhülle entfernt werden. Bei diesem Vorgang wird von Ionisation gesprochen (siehe Abbildung 2.5). In der Schale, aus der das Elektron herausgeschlagen wurde, entsteht ein sogenanntes Elektronenloch. [4, 10]

In den folgenden Unterabschnitten 2.3.1, 2.3.2 und 2.3.3 werden die verschiedenen Arten der Röntgenstrahlung erklärt.

2.3.1. Bremsstrahlung

Eine sehr geringe Anzahl der beschleunigten Elektronen schafft es, in die Nähe des Atomkerns des Anodenmaterials durchzudringen. Dabei werden die Elektronen von dem elektrischen Feld des Atomkerns verlangsamt und verändern ihre Flugrichtung. Je nach dem in welchem Abstand das Elektron an dem Atomkern vorbeifliegt, wird es unterschiedlich stark abgebremst. Ein großer Abstand zum Atomkern bedeutet eine geringe Abbremsung und Ablenkung des Elektrons. Durch diesen Abbrems- und Ablenkvorgang verlieren die Elektronen an kinetischer Energie, die wiederum in Form von Bremsstrahlung umgesetzt wird (siehe Abbildung 2.6 (a)). Die Energie des dabei entstehenden Photons E_γ entspricht der Differenz der Energie des Elektrons vor und nach der Wechselwirkung mit dem elektrischen Feld des Atomkerns:

$$E_\gamma = E_{vor} - E_{nach} \quad (2.8)$$

Auf diese Weise entsteht der größte Teil der Bremsstrahlung. Der restliche Teil der Bremsstrahlung entsteht, wenn ein Elektron direkt auf den Atomkern trifft. Dabei hat das Elektron die kinetische Energie, die sich aus dem Produkt der Elementarladung $e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ A s}$ und der Anodenspannung U_A zusammensetzt:

$$E_{kin} = e \cdot U_A \quad (2.9)$$

Bei dem Aufprall auf den Atomkern gibt es die gesamte kinetische Energie E_{kin} in Form von Bremsstrahlung ab (siehe Abbildung 2.6 (b)). Da bei der Abbremsung durch das elektrische Feld des Atomkerns nicht die volle kinetische Energie in Form von Bremsstrahlung umgesetzt wird, ist Bremsstrahlung nicht monoenergetisch. Vielmehr besteht sie aus einem breiten Spektrum von Röntgenphotonen mit unterschiedlichen Energien, wobei die maximale Energie durch E_{kin} begrenzt wird. [4, 10]

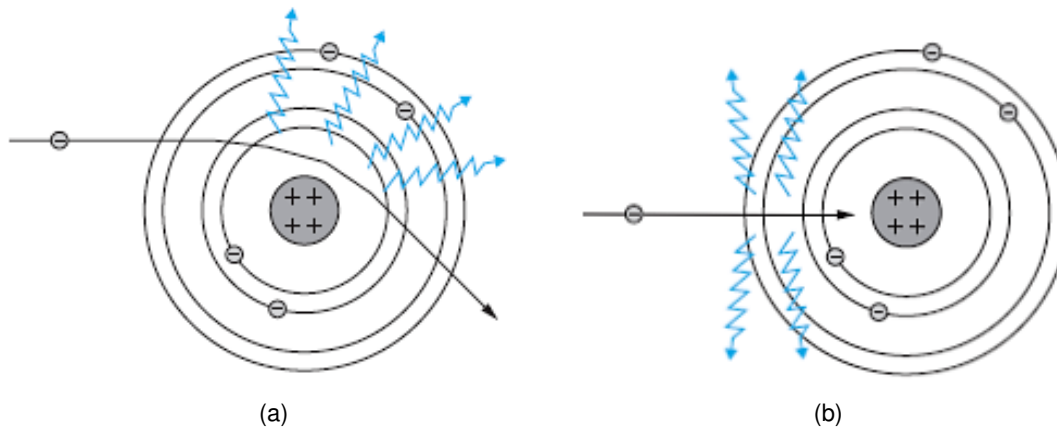


Abbildung 2.6.: Entstehung von Bremsstrahlung durch Ablenkung und Abbremsung eines einfallenden Elektrons im elektrischen Feld eines Atomkerns (a) und bei direkter Kollision mit einem Atomkern (b). [4]

2.3.2. Charakteristische Strahlung

Wenn das Atom des Anodenmaterials durch die beschleunigten Elektronen ionisiert wird, entsteht in der Atomhülle ein sogenanntes Elektronenloch. Der freigewordene Platz in dem Elektronenloch wird durch Elektronen der nächst höheren Schale sofort wieder eingenommen, da sich das Atom in einem energetisch schlechten Zustand befindet (siehe Abbildung 2.7). Dadurch entsteht in der weiter außen liegenden Schale ein neues Elektronenloch, welches durch erneutes Auffüllen von einem Elektron der nächst höheren Schale geschlossen wird. Dieser Vorgang wird so lange wiederholt, bis das Elektronenloch in die äußerste Schale gewandert ist. Dies ist der energetisch beste Zustand einer ionisierten Atomhülle. Dabei wird die Differenz der Bindungsenergien der involvierten Elektronenzustände aus der Atomhülle als elektromagnetische Welle abgestrahlt (siehe Abbildung 2.7).

Sollte die durch die Abstrahlung resultierende Photonenstrahlung genügend energiereich sein, wird sie als charakteristische Röntgenstrahlung bezeichnet. Dies geschieht bei den kernnahen Übergängen der K- und L-Schalen, da diese hohe Bindungsenergien besitzen.

Die Energiedifferenzen zwischen den einzelnen Schalen sind für jedes Anodenmaterial charakteristisch. Sie sind als diskrete Linien im Röntgenspektrum sichtbar.

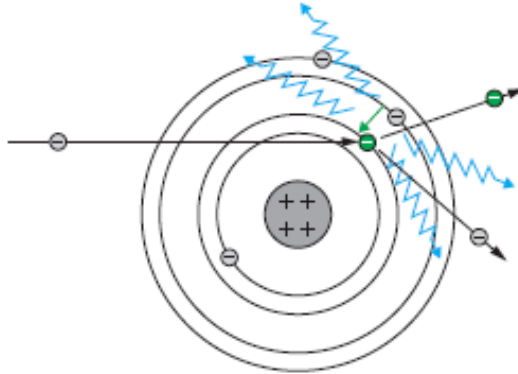


Abbildung 2.7.: Entstehung von charakteristischer Strahlung durch Herauslösen eines Elektrons einer inneren Schale und wieder Auffüllen dieses Elektronenlochs durch Elektronen höherer Schalen [4]

Charakteristische Photonen werden nach der Schale benannt, in der das Elektronenloch erzeugt wurde, welches dann wieder von den höheren Schalen aufgefüllt wird. Die sogenannte K-Strahlung ist die Strahlung, bei der ein Elektronenloch in der K-Schale durch Elektronen in höheren Schalen geschlossen wird. Bei L-Strahlung und M-Strahlung befindet sich das Elektronenloch in der L-Schale bzw. in der M-Schale.

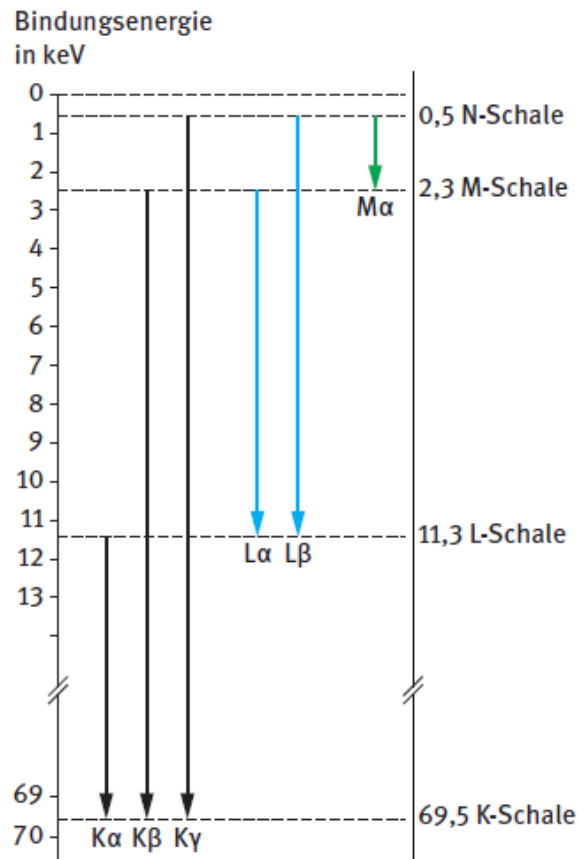


Abbildung 2.8.: Darstellung der verschiedenen Bindungsenergien für Wolfram [4]

Die Herkunft der Strahlung, das heißt, von welcher Schale das Elektron in das Elektronenloch zurückfällt, spielt bei der Namensgebung der Röntgenstrahlung ebenfalls eine Rolle. Es werden Übergänge aus der nächst höheren Schale mit dem griechischen Buchstaben α , Übergänge aus der übernächsten Schale mit β usw. gekennzeichnet. So wird Strahlung, die durch ein Elektronenloch in der K-Schale entstanden ist, das dann durch ein Elektron aus der L-Schale aufgefüllt wird, als K_{α} -Strahlung bezeichnet (siehe Abbildung 2.8). [4, 10]

2.3.3. Augereffekt

Der Augereffekt wurde nach Pierre Auger benannt, der den Effekt 1925 entdeckt hat. Voraussetzung für den Augereffekt ist, ebenso wie bei der charakteristischen Strahlung, die Ionisation eines Atoms. Die Ionisation kann beispielsweise durch Wechselwirkungen mit Photonen oder Elektronen entstehen, die eine genügend hohe Energie besitzen, um ein Elektronenloch in dem Atom zu erzeugen.

Dieses Elektronenloch wird dann wieder von einer höheren Schale aufgefüllt. Hier wird, anders als bei der charakteristischen Strahlung, die dabei freiwerdende Energie auf ein weiteres Elektron in einer Schale des ionisierten Atoms übertragen. Dieses wird dann aus der Schale herausgeschlagen, sobald die Energie die Bindungsenergie des Elektrons in der Atomhülle überschreitet. Das dabei emittierte Elektron wird als Auger-Elektron bezeichnet (siehe Abbildung 2.9. Damit steht der Auger-Effekt in Konkurrenz zu der charakteristischen Strahlung. [10, 15]

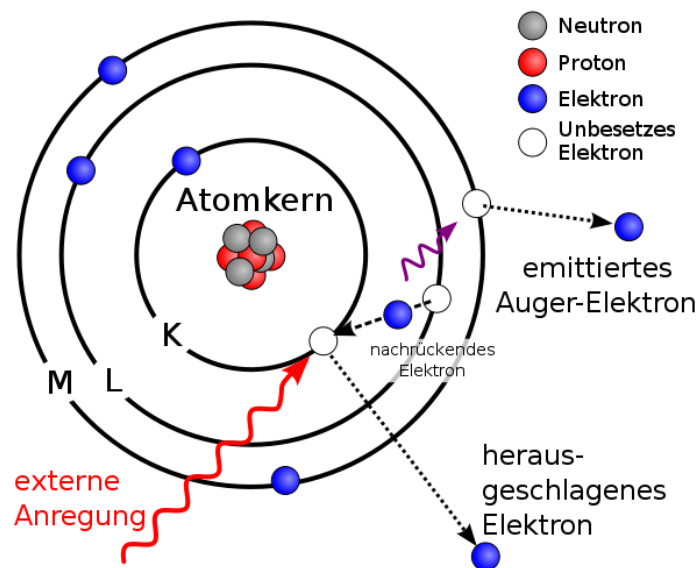


Abbildung 2.9.: Schematische Darstellung des Augereffekts²

2.3.4. Röntgenspektrum

Bei der Erzeugung von Röntgenstrahlung entsteht ein Röntgenspektrum. Dieses Spektrum setzt sich aus der Überlagerung vom Bremspektrum und dem charakteristischen Linienspektrum zusammen (siehe Abbildung 2.10). Das Bremspektrum entsteht im Zuge der Bremsstrahlungserzeugung (vgl. Unterabschnitt 2.3.1) und stellt den kontinuierlichen Teil des gesamten Röntgenspektrums dar.

²Quelle: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Atom_model_for_Auger_process_DE.svg aufgerufen am 12.04.2018

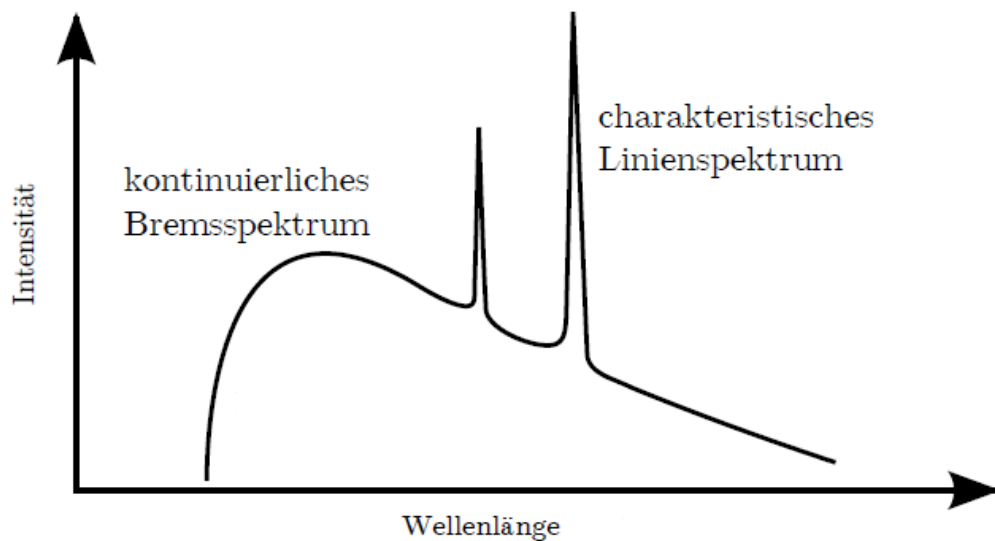


Abbildung 2.10.: Schematische Darstellung eines Röntgenspektrums bestehend aus Bremspektrum und charakteristischem Linienspektrum [9]

Das charakteristische Linienspektrum resultiert, wie der Name schon andeutet, aus der charakteristischen Strahlung (siehe Unterabschnitt 2.3.2). Bei der charakteristischen Strahlung werden bei ionisierten Atomen die Elektronenlöcher durch ein Elektron aus einer höheren Schale wieder aufgefüllt. Die verschiedenen Schalen haben unterschiedliche Energieniveaus. Dabei wird die Differenz der Bindungsenergien der betreffenden Schalen als elektromagnetische Welle abgegeben. Genau diese speziellen Energien der elektromagnetischen Wellen äußern sich im charakteristischen Linienspektrum als Piks.

Röntgenspektren werden üblicherweise in Abhängigkeit der Wellenlänge oder der Energie dargestellt. Dabei wird die maximale Photonenenergie, die im Röntgenspektrum sichtbar ist, durch die kinetische Energie der Elektronen (vgl. Gleichung (2.9)) begrenzt. [9]

Um ein Röntgenspektrum zu erzeugen, müssen generell drei Schritte durchgeführt werden:

1. Erstellung des Geschwindigkeitsprofils von Photonen in der Tiefe eines Materials
2. Berechnung, wie viele Photonen in dieser Tiefe des Materials erzeugt werden
3. Energieabsorption in der Anode

Der erste und der dritte Schritt können mit der Monte-Carlo-Methode (siehe Abschnitt 2.6) simuliert werden. Die Energieabsorption in der Anode kann außerdem über die Einbeziehung von Absorptionskoeffizienten (siehe [1]) berechnet werden. Wie viele Photonen in der Tiefe eines Materials entstehen, ist in Tabellen aufgelistet.

2.4. Abschwächung der Röntgenstrahlung durch Materie

Sobald Röntgenstrahlung auf Materie trifft, kommt es zu Wechselwirkungen zwischen Strahlung und Materie. Dabei kann die Röntgenstrahlung zum Teil oder vollständig absorbiert werden. Außerdem ist es möglich, dass die Materie eine Streuung der Photonen verursacht. Eine Abschwächung von diagnostischer Röntgenstrahlung wird vor allem vom Photoeffekt, der Compton-Streuung und der Rayleigh-Streuung verursacht. Der Absorptionskoeffizient des Photoeffekts wird als μ_p , der Compton-Streuung als μ_c und der Rayleigh-Streuung als μ_r bezeichnet. Die Summe aus μ_p , μ_c und μ_r ergibt den gesamten Absorptionskoeffizienten (siehe Abbildung 2.11).

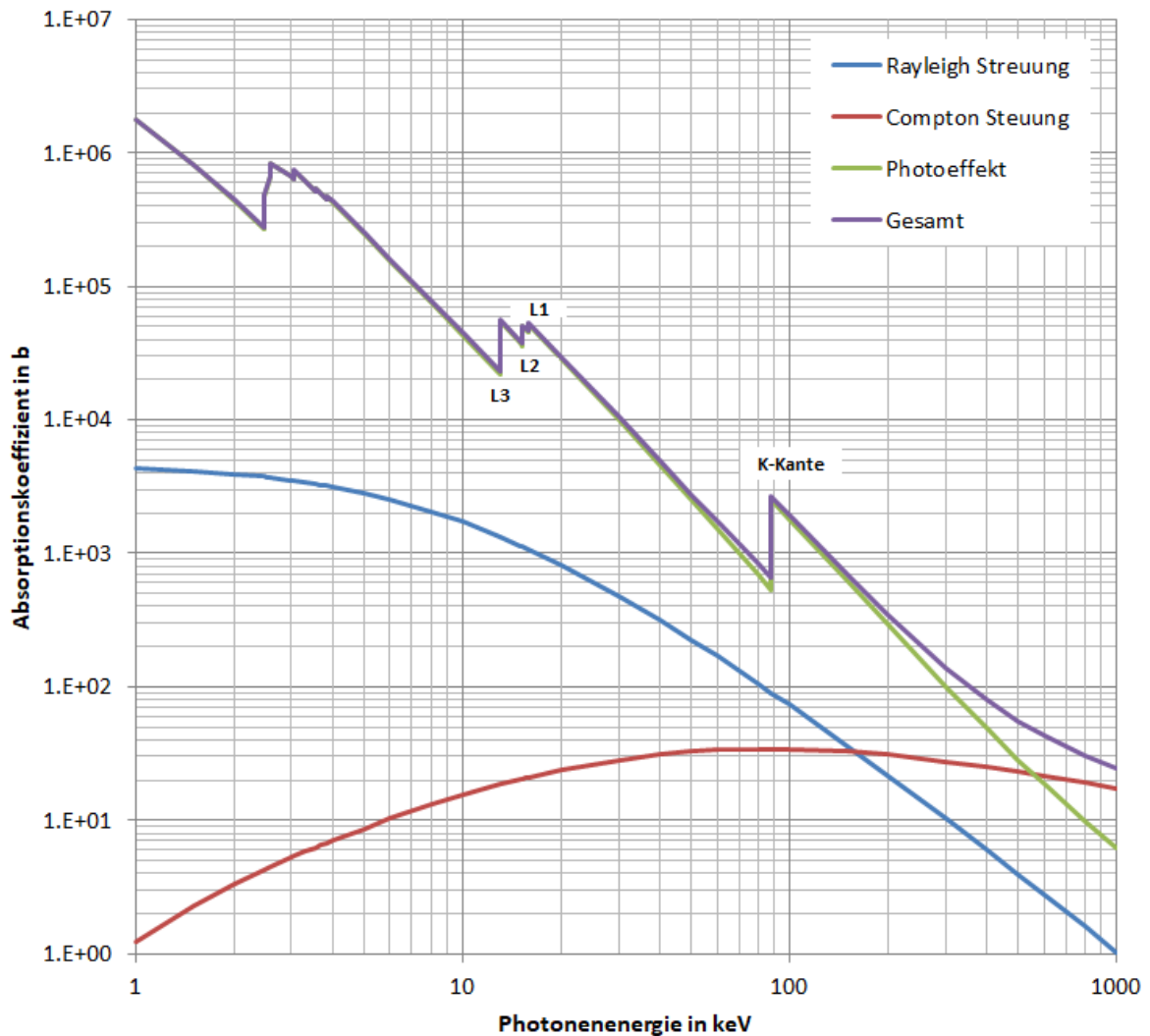


Abbildung 2.11.: Darstellung der Zusammensetzung des Gesamtabsorptionskoeffizienten und der Abhängigkeit der Abschwächung von Photonenergie am Beispiel von Blei (erstellt mit Hilfe der Daten von [1])

Wie im oberen Teil dieses Abschnitts ausgeführt wurde, wird Röntgenstrahlung beim Durchdringen von Materie abgeschwächt. Diese Abschwächung der Strahlungsintensität kann über das Lambert-Beersche Gesetz

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu x} \quad (2.10)$$

ermittelt werden. Dabei stellt x die Dicke des Materials dar, I ist die Strahlungsintensität der Materie nach der Absorption, I_0 diejenige vor der Absorption und μ steht für den Absorptionskoeffizienten.

Um für ein Material, welches aus mehreren Elementen bestehen kann, den Absorptionskoeffizienten zu bestimmen, wird die folgende Formel

$$\mu = \rho N_A \frac{\sum_k \sigma_k f_k}{\sum_k A_k f_k} \quad (2.11)$$

verwendet. Dabei steht ρ für die Dichte des Elements,

$$N_A = 6,022\,140\,857 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} \quad (2.12)$$

für die Avogadro Konstante, σ für den Wirkungsquerschnitt, f für den Anteil des jeweiligen Elements am Material und A für die atomare Masse. Besteht ein Filter nicht nur aus einem, sondern aus n verschiedenen Materialien mit unterschiedlichen Dicken x , werden die einzelnen $e^{-\mu x}$ -Terme (aus der Gleichung (2.10)), der verschiedenen Elemente miteinander multipliziert. [4, 6, 8]

2.4.1. Photoeffekt

Beim Photoeffekt, auch Photoionisation genannt, wird ein Elektron von einem Photon aus einer der inneren Schalen eines Atoms gestoßen. Das einfallende Photon überträgt bei dieser Kollision seine gesamte Energie auf das Elektron, welches sich in der K-, L- oder M-Schale befindet. Die Bewegungsenergie des losgelösten Elektrons ist die Differenz von der Energie des Photons E_γ und der Elektronenbindungsenergie E_b . Dabei muss die Photonenenergie größer sein als die Bindungsenergie des Elektrons.

$$E_{kin} = E_\gamma - E_b(K, L, M, \dots) > 0 \quad (2.13)$$

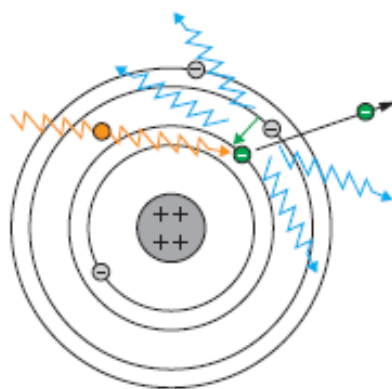


Abbildung 2.12.: Schematische Darstellung des Photoeffekts [4]

Das Photon wird dabei komplett absorbiert. Das durch die Kollision in der Schale entstandene Loch wird wieder aufgefüllt. Dabei kann es passieren, dass das Elektron durch weitere Wechselwirkungen Bremsstrahlung erzeugt oder andere Atome ionisiert werden.

Bei dem in der Abbildung 2.11 dargestellten Verlauf des Absorptionskoeffizienten des Photoeffekts (grüne Linie) lässt sich eine gewisse Proportionalität feststellen. Diese wird über den Zusammenhang

$$\mu_p \sim \frac{Z^k}{E_\gamma^3} \quad 3 < k < 4 \quad (2.14)$$

beschrieben. Dabei stellt Z die Ordnungszahl des Elements dar und E_γ steht für die Energie der Strahlung. Allerdings wird die Proportionalität durch Sprünge unterbrochen. Sobald die Energie des einfallenden Photons die Bindungsenergie der jeweiligen Schale übersteigt, erhöht sich die Wahrscheinlichkeit, dass das Photon mit den Elektronen der jeweiligen Schale wechselwirkt. Dadurch steigt der Absorptionskoeffizient μ_p sprunghaft an. Diese sprunghafte Erhöhung des Absorptionskoeffizienten bei der Bindungsenergie der K-Schale wird auch K-Absorptionskante oder K-Kante genannt (siehe Abbildung 2.11 K-Kante bei ca. 90 keV). [4, 6, 10]

2.4.2. Compton-Streuung

Bei der Compton-Streuung schlägt ein Photon ein sehr schwach gebundenes Elektron aus der äußeren Schale eines Atoms heraus. Das Atom wird einfach ionisiert. Da dieses Elektron, aufgrund seiner Position in einer äußeren Schale, nur eine sehr geringe Bindungsenergie besitzt, wird nur ein kleiner Teil der Energie des Photons an das Elektron übertragen. Das Photon fliegt mit reduzierter Energie weiter (siehe Abbildung 2.13). Allerdings wird es von seiner ursprünglichen Bahn abgelenkt und damit gestreut. Außerdem ist die Frequenz des Photons vor und nach dem Streuvorgang unterschiedlich. Diese Art der Streuung wird auch als inkohärente Streuung bezeichnet.

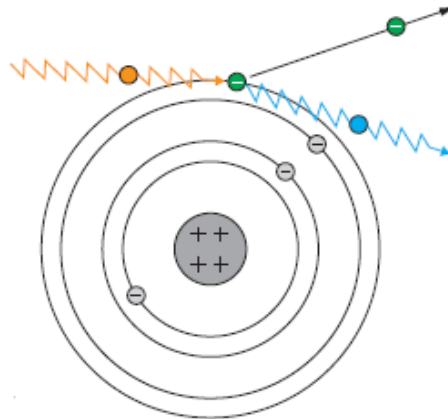


Abbildung 2.13.: Schematische Darstellung der Compton-Streuung [4]

Je nachdem mit welchem Winkel ϑ das Photon nach der Kollision mit dem Elektron gestreut wird, verändert sich die Energie E_C des weiterfliegenden Photons. Dabei nimmt die kinetische Energie des Photons E_C mit steigendem Streuwinkel ab. Die Abhängigkeit des Streuwinkels zur Energie des Photons E_γ ist in der Klein-Nishina-Gleichung beschrieben:

$$E_C = \frac{E_\gamma}{1 + \alpha (1 - \cos \vartheta)} \quad \text{mit } \alpha = \frac{E_\gamma}{511 \text{ keV}} \quad (2.15)$$

Die geringste Energie, die das Photon nach der Streuung annehmen kann, tritt bei einem Streuwinkel von $\vartheta = 180^\circ$ auf. In diesem Fall wird von einer Rückwärtsstreuung gesprochen. [4, 10]

2.4.3. Rayleigh-Streuung

Die Rayleigh-Streuung entsteht, wenn ein Photon elastisch auf ein Atom trifft. Dabei wird es abgelenkt, überträgt allerdings - anders als bei der Compton-Streuung - keine Energie auf das Atom und ionisiert dieses auch nicht (siehe Abbildung 2.14). Ein weiterer Unterschied von der Rayleigh-Streuung zur Compton-Streuung ist, dass das Photon vor und nach dem Aufprall auf das Atom mit der gleichen Frequenz weiterfliegt. Deshalb wird die Rayleigh-Streuung auch kohärente Streuung genannt. [4]

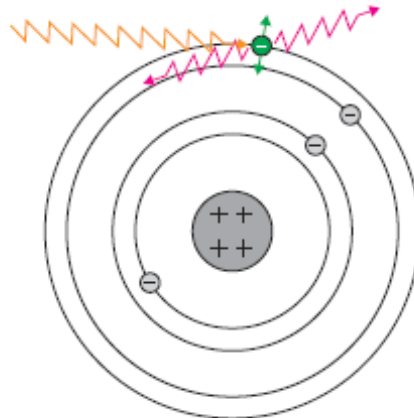


Abbildung 2.14.: Schematische Darstellung der Rayleigh-Streuung [4]

2.4.4. Paarbildung

Bei der Paarbildung wird im elektrischen Feld des Atomkerns ein Photon in ein Teilchen-/Antiteilchenpaar (Elektron-Positron) umgewandelt. Das Photon verschwindet dabei und das Elektron-Positron-Paar kann in der Folge Bremsstrahlung erzeugen oder dafür sorgen, dass Atome ionisiert werden. Das Positron zerstrahlt mit einem weiteren Elektron. Dabei entsteht die sogenannte Vernichtungsstrahlung. [10]

2.4.5. Triplettbildung

Bei der Triplettbildung verwandelt sich ein Photon in ein Teilchen-/Antiteilchenpaar (Elektron-Positron) im elektrischen Feld eines Hüllenelektrons. Dabei wird das Hüllenelektron aus dem Atom gelöst. Die zwei Elektronen und das eine Positron können Bremsstrahlung erzeugen und Atome ionisieren. Wie bei der Paarbildung wird das Positron mit einem weiteren Elektron zerstrahlt. Es entsteht Vernichtungsstrahlung. [10]

2.5. Raumwinkel

Der Raumwinkel ist definiert als eine Fläche A , die ein Teilstück einer Kugeloberfläche ist, dividiert durch das Quadrat des Kugelradiuses r .

Als SI-Einheit wird für den Raumwinkel der Steradian ($1 \text{ sr} = 1 \frac{\text{m}^2}{\text{m}^2}$) verwendet.

$$\Omega = \frac{A}{r^2} \Omega_0 \quad (2.16)$$

Dabei ist $\Omega_0 = 1 \text{ sr}$. Der maximale Raumwinkel beträgt $4\pi \text{ sr}$. Das ist genau dann der Fall, wenn die Teilfläche A gleich der Kugeloberfläche ist. [6]

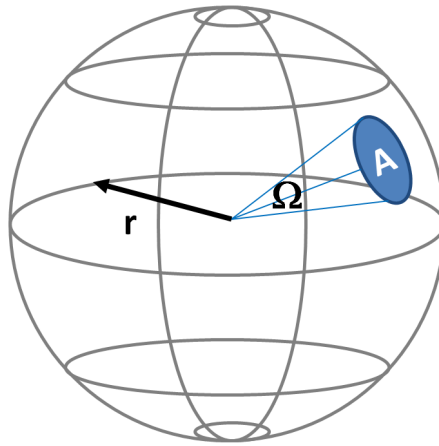


Abbildung 2.15.: Darstellung des Raumwinkels³

2.6. Monte-Carlo-Simulation

Monte-Carlo-Simulationen sind Algorithmen, die auf einer großen Menge von Zufallszahlen beruhen. Die Methode entstand zur Zeit des Zweiten Weltkrieges im Zuge eines geheimen Projektes im Los Angeles Scientific Laboratory. Es waren die namenhaften Personen Enrico Fermi, Stanislaw Ulam und John von Neumann an diesem Projekt beteiligt. Ziel dieses Projektes war es, die Neutronenbewegung in Materie zu untersuchen. Der Name des Geheimprojekts „Monte-Carlo“ war ein Vorschlag von John von Neumann in Anlehnung an die Spielbank Monte-Carlo in Monaco.

Monte-Carlo-Simulationen werden bei verschiedenen Problemstellungen der diskreten und kontinuierlichen Mathematik verwendet und haben somit ein breites Anwendungsspektrum. Außerdem liefern Berechnungen mit den Monte-Carlo-Simulationen bei diesen Problem- bzw. Fragestellungen bessere Ergebnisse als deterministische Verfahren.

³Quelle: <https://mhf-e-wiki.desy.de/Raumwinkel> aufgerufen am 14.04.2018

Beispiele für dieses breite Anwendungsspektrum sind unter anderem die Bestimmung der Kreiszahl π , die Bestimmung von Schätzfunktionen über Abweichung von Daten und die Erstellung von Wetter- und Klimamodellen. Außerdem findet die Monte-Carlo-Simulation bei der Bewegungssimulation von ungeladenen Teilchen (Neutronen und Photonen) in Materie Verwendung, was in dieser Bachelorarbeit von Bedeutung ist.

Nachstehend wird anhand eines stark vereinfachten Beispiels gezeigt, wie mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation bestimmt wird, wie vielen Neutronen es gelingt, einen Bleimantel mit einer bestimmten Dicke zu durchdringen. In die Wand eines Bleibehälters dringen Neutronen ein und kollidieren dabei mit den Bleiatomen. Dieses Modell geht der Einfachheit halber davon aus, dass die Neutronen immer senkrecht auf die Bleiwand treffen und immer einen Abstand $a = 1$ zurücklegen, bevor sie mit einem Bleiatom zusammenstoßen können. In der Abbildung 2.16 wird dieser Vorgang dargestellt.

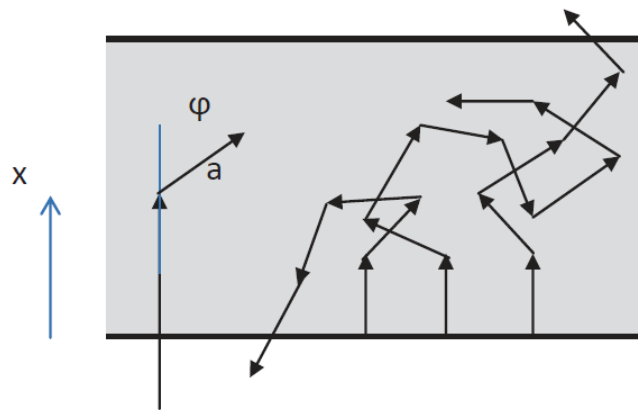


Abbildung 2.16.: Darstellung der Neutronenbewegung in einer Wand [13]

In dem mathematischen Modell wird die Wegänderung eines auf ein Bleiatom treffendes Neutron beschrieben. Dabei kann das Neutron seine Bahn um den Winkel φ ändern. Er wird durch eine Zufallsgröße bestimmt, die Werte im Bereich von 0 bis 2π annehmen kann. Die neue Position des Neutrons wird dabei über den Zusammenhang

$$x = x + a \cdot \cos \varphi \quad (2.17)$$

beschrieben. Wenn $x \leq 0$ ist, wird das Neutron von der Bleiwand reflektiert. Eine weitere Annahme dieses Modells ist, dass die Wanddicke ein n -Faches von a ist. Das Neutron verliert bei jedem Zusammenstoß an Energie. Das führt dazu, dass es nach k Kollisionen vollständig absorbiert ist. Mit diesen Angaben und Annahmen ist das Modell vorgegeben. Es kann implementiert und die Parameter mit Hilfe von Pseudo-Zufallszahlen simuliert werden. [13, 14]

In diesem einfachen Beispiel sind sehr viele Annahmen getroffen und Vereinfachungen durchgeführt worden. Die Neutronenbewegung zu analysieren ist in der Realität wesentlich komplexer. Dabei muss unter anderem die Art der Kollision (ohne Energieänderung, Streuung oder Absorption), die zurückgelegte Strecke des Neutrons ohne Kollision mit einem Atom in dem Material, die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Streurichtung nach einer Kollision und vieles mehr mit in die Berechnung einbezogen werden. Diese aufwändigen Verfahren werden in dieser Arbeit nicht genauer dargestellt. Eine detaillierte Beschreibung der Neutronenbewegung in Materie ist in dem Buch „Monte Carlo-Algorithmen“ [13] zu finden. Mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation können die Wahrscheinlichkeiten einer Absorption eines Neutrons, die Durchdringung eines Neutrons von einem Material mit einer bestimmten Dicke und die Reflexion eines Neutrons an der Eintrittsseite bestimmt werden.

2.7. Tungsten anode spectral model using interpolating cubic splines

In diesem Abschnitt wird das Modell zur Röntgenspektrenerzeugung Tungsten anode spectral model using interpolating cubic splines (kurz: TASMICS) vorgestellt. Mit den Rohdaten der Röntgenspektren des TASMICS Modells wurde in dieser Thesis gearbeitet. Im folgenden Abschnitt wird auf die genaue Berechnung der Spektren verzichtet, da diese den Rahmen der Thesis überschreiten würde. Weiterführende Informationen sind in dem Artikel von Medical Physics [7] zu finden.

Das TASMICS Modell wurde von den Ingenieuren John M. Boone und Andrew M. Hernandez entwickelt. Bei der Modellierung der Röntgenröhre wurde ein herkömmliches Röntgendesign mit einem Anodenwinkel von 12° verwendet. Dabei besteht die Anode, gemessen an ihrem Gewicht, zu 95 % aus Wolfram und zu 5 % aus Rhenium. Der Abstand der Röhre zum Detektor beträgt bei der Modellierung von TASMICS 1000 mm (vgl. Abbildung 2.17).

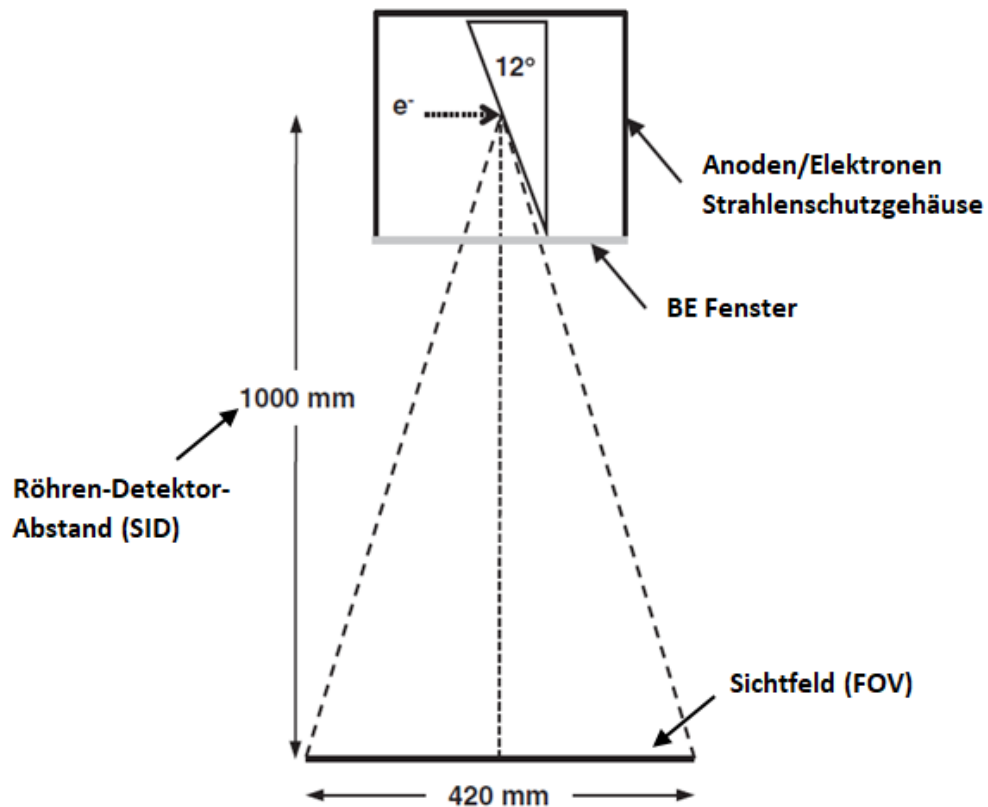


Abbildung 2.17.: Zweidimensionale Darstellung des Aufbaus, der in der Monte-Carlo-Simulation für die Modellierung der Röntgenröhre genutzt wurde [7]

Um die Spektren zu simulieren, wurde der Monte Carlo N-Particle eXtended radiation transport code MCNPX 2.6.0 verwendet. Dabei entstanden 35 Basisspektren im Röhrenspannungsbereich von 20 kV bis 640 kV. Mit Hilfe dieser Basisspektren und der kubischen Spline-Interpolation aus MATLAB wurden dann 621 hochauflösende Röntgenspektren in 1 keV Schritten erzeugt. Dabei sind die Röntgenspektren minimal mit einer 0,8 mm starken Berylliumschicht gefiltert, die Bestandteil der simulierten Röntgenröhre ist (siehe Abbildung 2.17).

Die erzeugten Spektren sind mit verschiedenen Elementen filterbar. Für die unterschiedlichen Filter wurden die Absorptionskoeffizienten aus der NIST XCOM: Photon Cross Section Database verwendet.

Das TASMICS Modell zur Röntgenspektrenberechnung ist durch seine geringe innere Filtrierung gut geeignet für Mammographie- und Tomosyntheseanwendungen⁴, deren Röntgensysteme eine Wolframanode besitzen. Außerdem kann es für Anwendungen außerhalb der medizinischen Bildgebung genutzt werden, die eine höhere Röntgenspannung benötigen.

Vergleiche mit bestehenden Modellen wie TASMIP (siehe Abschnitt 2.8), dem Modell zur Röntgenspektrenenerzeugung von Birch und Marshall und dem Modell von Poludniowski (wird nicht in dieser Thesis behandelt) zeigen, dass diese Modelle und TASMICS weitgehend äquivalent sind. Die genauen Gegenüberstellungen der einzelnen Modelle sind in dem Artikel des Medical Physics [7] nachzulesen. [7]

Mit dem Excel Sheet *TASMICS_v1.4.xlsx* (siehe CD im Anhang im Ordner „Modelle“) ist es möglich, Röntgenspektren mit verschiedenen Röhrenspannungen und Vorfilterungen zu simulieren.

2.8. Tungsten anode spectral model interpolating polynomials

Dieser Abschnitt behandelt das Tungsten anode spectral model interpolation polynomials (kurz: TASMIP) Modell zur Röntgenspektrenenerzeugung. Es wurde von John M. Boone und J. Anthony Seibert entwickelt. TASMIP ist ein vollständig empirisches Modell und beruht auf den physikalisch gemessenen Daten von Thomas Fewell. Nachfolgend wird lediglich ein kurzer Überblick über das TASMIP Modell gegeben. Weiterführende Informationen zu TASMIP sind in den Artikeln des Medical Physics [3, 7] enthalten.

Das TASMIP Modell ist für Röntgenröhren mit einer Wolframanode ausgelegt und liefert Spektren im Spannungsbereich von 30 keV bis 140 keV. Dabei hat es eine spektrale Auflösung von 1 keV. Die im Rahmen des Modells TASMIP Modells simulierte Wolframanode besteht, gemessen an ihrem Gewicht, zu 90 % aus Wolfram und zu 10 % aus Rhenium. Der Abstand zwischen Röhre und Detektor beträgt bei der Modellierung von TASMIP 1 m.

⁴Tomosyntheseanwendungen: Verfahren zur Brustkrebsdiagnostik, in der die Brust in 3D dargestellt wird

Die Photonen Fluenz ϕ kann zu jedem 1 keV Energiebereich E über den Zusammenhang

$$\phi(E) = a_0 [E] + a_1 [E] \cdot kV + a_2 [E] \cdot kV^2 + a_3 [E] \cdot kV^3 \quad (2.18)$$

beschrieben werden. Dabei stellen $a_1 [E]$ bis $a_3 [E]$ die vorbestimmten Koeffizienten zum entsprechenden Energiebereich E dar. Sie werden aus den Messdaten von Thomas Fewell abgeleitet. Die Variable kV stellt die jeweilige Röhrenspannung des zu berechnenden Spektrums dar. Die Spektren, die mit dem TASMIP Modell berechnet wurden sind nicht durch hinzugefügte Filter abgeschwächt. Allerdings sind sie anlagebedingt mit einer 1,6 mm starken Aluminiumschicht gefiltert.

2.9. Theorie zur Röntgenspektrenerzeugung von Birch und Marshall

Dieser Abschnitt gibt einen kurzen Überblick über die Theorie zur Röntgenspektrenerzeugung von R. Birch und M. Marshall. Sie wurde in den späten 1970er Jahren mit dem Ziel entwickelt, Röntgenspektren mit verschiedenen Röhrenspannungen, Filtrierungen und Anodenwinkeln theoretisch zu berechnen. Diese sollten mit tatsächlich gemessenen Spektren übereinstimmen. Detailliertere Informationen zu den Berechnungen sind in dem Artikel des Physics in Medicine and Biology [2] zu finden.

Mit der Theorie von Birch und Marshall können Spektren zwischen den Röhrenspannungen von 30 kV und 150 kV berechnet werden. Der Abstand zwischen Röntgenröhre und Detektor beträgt bei der Modellierung von Birch und Marshall 2 m. Es können Anodenwinkel zwischen 10° und 30° simuliert werden. Es handelt sich dabei um ein semiempirisches Modell. Zu der Bremsstrahlung wurde die charakteristische Strahlung mit einer empirischen Beziehung hinzugefügt, um die Werte des Modells an experimentell gemessene Daten anzupassen.

Mit Hilfe des Gesetzes von Thomson-Whiddington wurde das Eindringen der Elektronen in Materie beschrieben. Dabei sollten die Energien der Elektronen beschrieben werden, die die Elektronen nach dem Eintritt in Materie in unterschiedlichen Tiefen haben. Um die Eigenfilterung der Röhre und die Filterung durch den Luftweg zu berücksichtigen, wurden die berechneten Spektren nach einer Methode von Marshall abgeschwächt. [2, 7]

2.10. Bestimmtheitsmaß

2.10.1. Allgemeines

Das Bestimmtheitsmaß R^2 ist eine Größe, die die Anpassungsgüte der linearen Regression beschreibt. Dabei soll die Schwankungen einer abhängigen Variable y mit Hilfe einer unabhängigen Variable x erklärt werden. R^2 kann Werte zwischen 0 und 1 annehmen. Je größer der R^2 -Wert ist, desto besser lassen sich die Schwankungen der Variable y durch die Variable x erklären.

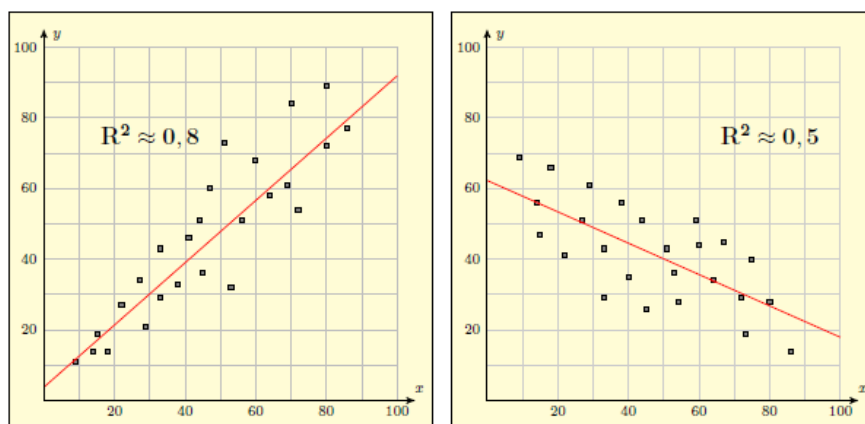


Abbildung 2.18.: Beispieldatensätze mit unterschiedlichem R^2 -Wert [12]

In der Abbildung 2.18 sind Beispieldatensätze mit unterschiedlichem R^2 -Wert dargestellt. Es ist erkennbar, dass bei der linken Graphik die einzelnen Datenpunkte dichter an der Regressionsgerade liegen als bei der rechten Graphik. [12]

2.10.2. Verwendung in dieser Thesis

In dieser Thesis wird das Bestimmtheitsmaß zum Vergleich zweier Röntgenspektren herangezogen. Dabei stellt der Datensatz des einen Spektrums die x -Werte und der Datensatz des anderen Spektrums die y -Werte dar. Außerdem wird die Steigung der Regressionsgeraden bestimmt. Stimmen die Werte der beiden Röntgenspektren gut überein, ist $R^2 \approx 1$ und eine Steigung der Regressionsgeraden ist ebenfalls ≈ 1 . In den Tabellen zum Vergleich der Röntgenspektren der unterschiedlichen Simulationstools wird R^2 und die Steigung der Regressionsgeraden dargestellt.

2.11. Einführung in die Software CT-Simulation

Dieses Unterkapitel gibt einen kurzen Überblick über die Software CT-Simulation. Dabei werden der Programmablauf kurz erläutert und Screenshots von der Benutzeroberfläche gezeigt. Weitere Informationen zur Software CT-Simulation sind in der Bachelorthesis von Alexei Figueroa zu finden [5].

Die Software CT-Simulation ist eine Graphical User Interface (GUI) Anwendung, es ermöglicht, den Workflow des gesamten Simulationsprozesses eines Computertomographen zu unterstützen. In der Abbildung 2.19 ist der Workflow der Simulation von CT-Bildern in einem Aktivitätsdiagramm dargestellt.



Abbildung 2.19.: Aktivitätsdiagramm des Workflows der Simulation von CT-Bildern

Diese Software soll in weiteren Forschungsarbeiten dazu genutzt werden den Kontrast von medizinischen Bildern zu optimieren und dabei gleichzeitig die Patientendosis zu reduzieren. Die ursprüngliche Konsolenanwendung wurde von Prof. Dr. Robert Heß geschrieben. Alexei Figueroa hat, basierend auf dem Programmcode der Konsolenanwendung, die GUI Anwendung CT-Simulation entwickelt. In den Abbildungen 2.20 und 2.21 sind Screenshots der GUI Anwendung dargestellt.

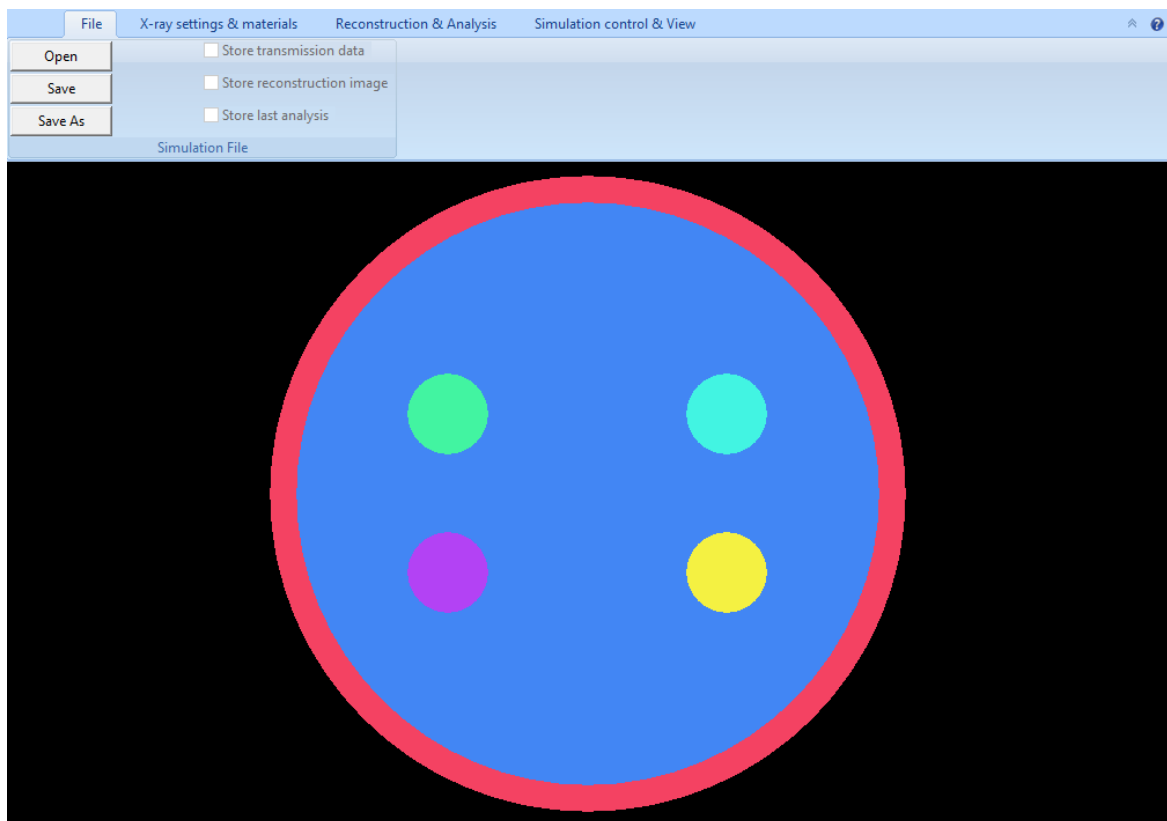


Abbildung 2.20.: Screenshot des Startbildes der Software CT-Simulation

Die Abbildung 2.20 zeigt das Startbild, das beim Öffnen der Anwendung gezeigt wird. Dargestellt ist ein Kopfphantom, in dem verschiedene Region of Interest, kurz ROI, dargestellt sind (verschiedenfarbige Kreise). In den vier Reitern können unterschiedliche Einstellung an Simulationsparametern vorgenommen werden.

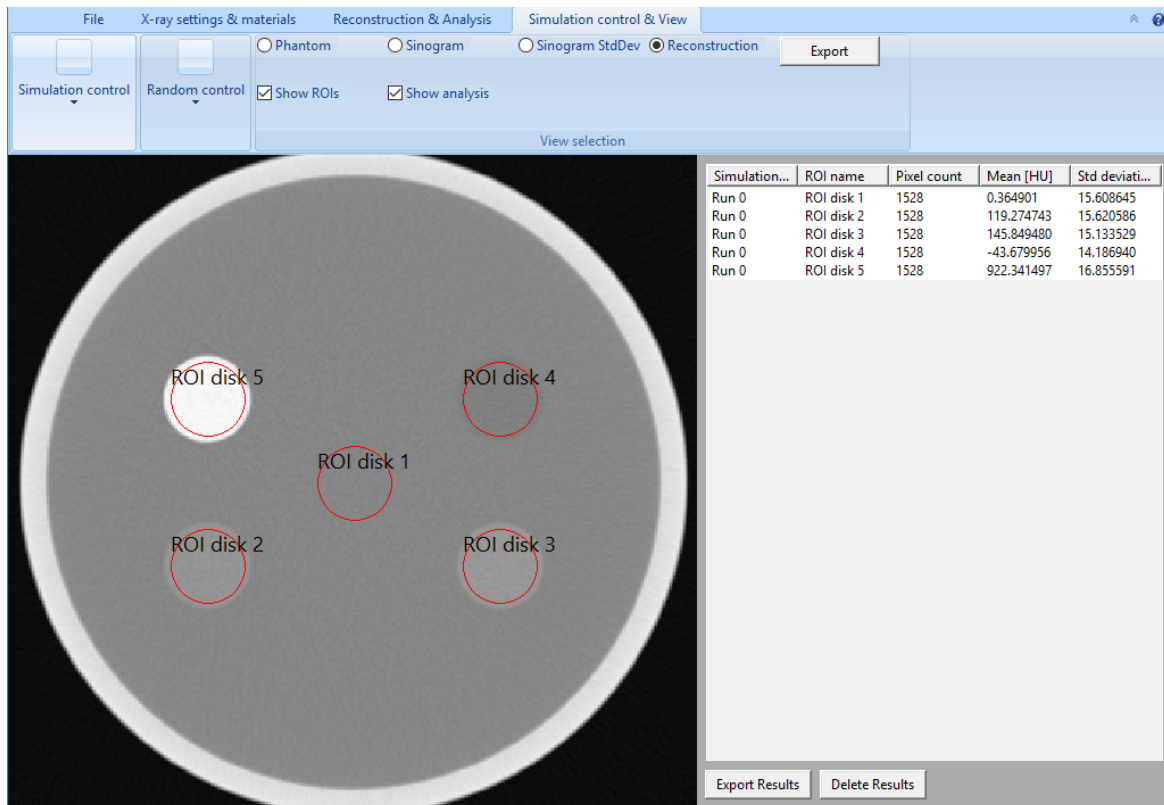


Abbildung 2.21.: Screenshot des Simulationsergebnisses der Software CT-Simulation

In der Abbildung 2.21 ist das Simulationsergebnis der Software CT-Simulation dargestellt. Dabei werden für jede ROI die Pixel gezählt, der Mittelwert der Graustufen angegeben und die Standardabweichung bestimmt.

3. Anforderungen

In diesem Kapitel werden zunächst die funktionalen und nicht funktionalen Anforderungen an die Software zur Röntgenspektrenerzeugung festgelegt. Anschließend wird die Software in den Gesamtkontext der Software CT-Simulation eingeordnet. Danach werden die funktionalen und nicht funktionalen Anforderungen ermittelt, die an die Software CT-Simulation gestellt werden.

3.1. Funktionale Anforderungen

Dieser Abschnitt beschreibt die funktionalen Anforderungen an die Software zur Röntgenspektrenerzeugung. Die verschiedenen Anforderungen werden dabei in die Gruppen Spektrumserzeugung, Filterung, Speicherung und Ausgabe aufgeteilt.

Spektrumserzeugung

1. Eingabe der Röhrenspannung in kV
2. Eingabe der Anfangsenergie in keV
3. Eingabe der Endenergie in keV
4. Eingabe der Energieschritte
5. Angabe des Spektrums in Abhängigkeit des Raumwinkels

Filterung

1. Es besteht die Möglichkeit, das Spektrum mit einem oder beliebig vielen Materialien zu filtern.
2. Ein Material ist charakterisiert durch:
 - seinen Namen

- seine Zusammensetzung aus einem oder mehreren Elementen der ersten 100 Elemente des Periodensystems, mit deren jeweiligen Anteilen am Material
- seine Dicke in mm
- seine Dichte in $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$

Speicherung

1. Materialien werden bei ihrer Eingabe gespeichert, wenn sie noch nicht in der Materialliste vorhanden sind.
2. Dabei werden die Dichte der Materialien, die Zusammenstellung der Elemente und deren Anteile am Material gespeichert.
3. Es soll möglich sein, eine Filterung mit den gespeicherten Materialien durchzuführen. Dazu muss die Dicke des Materials erneut eingegeben werden.

Ausgabe

1. Das Programm berechnet zu einer bestimmten Energie und einer bestimmten Röhrenspannung die jeweilige gefilterte Intensität.
2. Das Programm berechnet mit Hilfe der oben genannten Eingaben ein gefiltertes Röntgenspektrum.

3.2. Nicht funktionale Anforderungen

1. Die Programmierung muss in C++ erfolgen.
2. Dokumentation des Programms in Form von Kommentaren im Quellcode.
3. Funktionen und Kommentare im Programm müssen in englischer Sprache geschrieben werden.
4. Es soll ein modernes Modell zur Röntgenspektrumssimulation genutzt werden.
5. Dieses Modell soll möglichst genaue Spektren liefern.
6. Eingabefehler erkennen bei einer:
 - Röhrenspannungsangabe kleiner 10 kV oder größer 150 kV
 - Energieeingabe kleiner 10 keV oder größer 150 keV

- Dichte kleiner als $0,000\,000\,1 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ oder größer als $22,6 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$
- Dicke des Materials kleiner als 0 mm oder größer als 300 mm

3.3. Softwareanforderungen an die CT-Simulation-Software

In diesem Abschnitt werden die Anforderungen an die Software CT-Simulation definiert, die sie nach der Implementierung der Berechnung von beliebigen Röntgenspektren vorweisen soll. Dabei werden nur die Anforderung aufgelistet, die sich auf die Röntgenspektrumssimulation auswirken.

1. Es soll ein Röntgenspektrum mit beliebiger Röhrenspannung zwischen 20 kV und 640 kV berechnet werden können
2. Die Eingabe der Röhrenspannung erfolgt in einem Texteingabefeld
3. Die Anfangsenergie jedes zu berechnenden Spektrums beträgt 10 keV
4. Die Endenergie jedes zu berechnenden Spektrums ist gleich dem Wert der Röhrenspannung zu setzen
5. Bei der Berechnung des Spektrums werden immer 100 Energieschritte durchgeführt

4. Design

In diesem Teil der Thesis wird die Aufgabenstellung, eine Software zur Röntgenspektrenerzeugung zu schreiben, in einzelne Arbeitspakete aufgeteilt. Dazu wird als erstes entschieden, welches Modell zur Röntgenspektrenerzeugung sich am besten eignet. Zum Schluss wird noch dargestellt, wie die Software zur Röntgenspektrenerzeugung in die GUI Anwendung CT-Simulation integriert wurde.

4.1. Entscheidung für ein Röntgenspektrenmodell

Mit Hilfe von Nutzwertanalysen (siehe Tabelle 4.1 und 4.2) wird entsprechend den vorgegebenen Anforderungen zunächst das am besten geeignete Simulationsmodell ermittelt. Hierzu werden die Modelle TASMICS, TASMIP und das Modell von Birch und Marshall untersucht. Die Modelle sind im Kapitel 2 Grundlagen genauer beschrieben.

Zunächst werden die wichtigsten Kriterien, die das Simulationsmodell erfüllen soll, aufgelistet (vgl. Tabelle 4.1 und Tabelle 4.2 Spalte 1) und gewichtet (0 unwichtig, 1 sehr wichtig). Die Summe aller Gewichtungen ergibt 1. Pro Simulationsmodell wird dann für jedes Kriterium eine Wirkung eingetragen. Die Wirkung drückt aus, wie gut das jeweilige Kriterium von dem Simulationsmodell erfüllt wurde. Dabei steht die Zahl 0 für nicht erfüllt und die Zahl 10 für voll erfüllt. Das am besten geeignete Modell ist das Modell, bei dem die Summe aller Produkte aus Gewicht und Wirkung am größten ist.

Als Erstes werden die beiden Modelle TASMICS und Birch und Marshall mit Hilfe der Nutzwertanalyse verglichen. Das Ergebnis dieses Vergleichs ist in der Tabelle 4.1 dargestellt.

Nr.	Kriterien	Gewicht	TASMICS		Birch und Marshall	
			Wertung (max. 10)	gewichtete Wertung	Wirkung (max. 10)	gewichtete Wertung
1.	Modernes Modell	0,15	10	1,5	4	0,6
2.	Hohe Genauigkeit	0,35	9	3,15	9	3,15
3.	Röhrensparnungen von 10 kV bis 150 kV	0,1	9	0,9	8	0,8
4.	Energien von 10 keV bis 150 keV	0,1	10	1,0	10	1,0
5.	Einfache Implementie- rung	0,1	8	0,8	2	0,2
6.	Hohe Spektrale Auflö- sung	0,05	6	0,3	6	0,3
7.	Variable Einstellung des Anodenwinkels	0,1	1	0,1	8	0,8
8.	Geringere anlagebeding- te Filterung	0,05	6	0,3	6	0,3
Gesamt				8,05		7,15

Tabelle 4.1.: Nutzwertanalyse der Simulationsmodelle zur Röntgenspektrenerzeugung
TASMICS und Birch und Marshall

Die Nutzwertanalyse aus der Tabelle 4.1 ergibt, dass das TASMICS Modell das geeignetere ist, da es mit 8,05 zu 7,15 einen höheren Gesamtwert als das Modell von Birch und Marshall hat. Ausschlaggebend dafür ist, dass das TASMICS Modell einfacher implementiert werden kann als das von Birch und Marshall. Außerdem ist das TASMICS Modell ein neues Modell, welches sowohl einen großen Spannungsbereich als auch einen großen Energiebereich abdeckt.

Als nächstes werden die Modelle TASMICS und TASMIP in der Nutzwertanalyse gegenübergestellt. Das Ergebnis ist in der Tabelle 4.2 dargestellt.

Nr.	Kriterien	Gewicht	TASMICS		TASMIP	
			Wertung (max. 10)	gewichtete Wertung	Wirkung (max. 10)	gewichtete Wertung
1.	Modernes Modell	0,15	10	1,5	6	0,9
2.	Hohe Genauigkeit	0,35	9	3,15	8	2,8
3.	Röhrensparnungen von 10 kV bis 150 kV	0,1	9	0,9	8	0,8
4.	Energien von 10 keV bis 150 keV	0,1	10	1,0	10	1,0
5.	Einfache Implementie- rung	0,1	8	0,8	8	0,8
6.	Hohe Spektrale Auflö- sung	0,05	6	0,3	6	0,3
7.	Variable Einstellung des Anodenwinkels	0,1	1	0,1	1	0,1
8.	Geringere anlagebeding- te Filterung	0,05	6	0,3	3	0,15
Gesamt				8,05		6,85

Tabelle 4.2.: Nutzwertanalyse der Simulationsmodelle zur Röntgenspektrenerzeugung TASMICS und TASMIP

Die Nutzwertanalyse in Tabelle 4.2 zeigt, dass das TASMICS Modell besser als Grundlage für diese Thesis geeignet ist als das TASMIP Modell. Der Vergleich zwischen den beiden Modellen zur Röntgenspektrenerzeugung ergibt, dass die Spektren, die das TASMICS Modell liefert, nicht so stark anlagebedingt gefiltert sind wie die des TASMIP Modells. Ein weiterer Vorteil ist, dass mit dem TASMICS Modell Röntgenspektren mit höheren Röhrensparnungen simuliert werden können als mit dem TASMIP Modell.

Aus den beiden Nutzwertanalysen (vgl. Tabelle 4.1 und 4.2) geht hervor, dass das TASMICS Simulationsmodell zur Röntgenspektrenerzeugung das geeignetste ist.

4.2. High Level Design

Im High Level Design wird der Themenkomplex zur Röntgenspektrenerzeugung aufgebrochen und einzelne Teilaufgaben verpackt.

4.2.1. Aufteilung der Aufgabe in einzelne Komponenten

Da nun das Simulationsmodell zur Röntgenspektrenerzeugung gefunden wurde, wird die Implementierung in ihre Hauptkomponenten aufgeteilt. Wie schon in den Grundlagen im Unterkapitel 2.3.4 beschrieben, sind für die Röntgenspektrenerzeugung die folgenden drei Schritte durchzuführen:

1. Erstellung des Geschwindigkeitsprofils von Photonen in der Tiefe eines Materials
2. Berechnung, wie viele Photonen in dieser Tiefe des Materials erzeugt werden
3. Energieabsorption in der Anode

In dieser Bachelorarbeit werden die Rohdaten des TASMICS Modells verwendet. Diese Rohdaten stellen verschiedene Spektren zu diskreten Spannungen und Energien dar und decken somit die ersten beiden Schritte der Röntgenspektrenerzeugung ab. Das Auslesen der Rohdaten wird in dem Unterabschnitt 4.2.2 näher beschrieben.

Da in den Anforderungen (vgl. Kapitel 3) festgehalten wurde, dass ein Spektrum von beliebiger Spannung und Energie berechnet werden kann, muss noch eine Interpolation zwischen den einzelnen Spektren erfolgen. In dem Unterabschnitt 4.2.3 wird die Interpolation zwischen den einzelnen Spektren genauer erläutert.

Zusätzlich soll, wie in den Anforderungen (vgl. Kapitel 3) erläutert, eine Filterung der Röntgenstrahlen implementiert werden. Die Filterung wird unter der Verwendung von Materialien durchgeführt, die aus einem oder beliebig vielen der ersten 100 Elemente des Periodensystems bestehen. Einzelheiten zur Filterung der Röntgenspektren sind im Unterkapitel 4.2.4 dargestellt.

4.2.2. TASMICS Rohdaten auslesen und speichern

Die Rohdaten der Spektren des TASMICS Modells befinden sich in der CSV-Datei *TASMCIS_Rohdaten.csv*, die auf der CD im Anhang A dieser Bachelorarbeit zu finden ist. In der CSV-Datei sind die Röntgenspektren in der Einheit

$$\frac{\text{Photonen}}{\text{mm}^2 \mu\text{sr}}$$

angegeben. Dabei werden die Spektren zu den jeweiligen Röhrensparnungen in Abhängigkeit der Energien dargestellt.

Um die Röntgenspektren im weiteren Programm verwenden zu können, muss die CSV-Datei mit den TASMICS Rohdaten zunächst ausgelesen und die darin enthaltenen Daten gespeichert werden. Für diese Aufgaben wird die Klasse `cReadAndStoreTasmicsData` erstellt. Der grobe Ablauf des Auslesens und Speicherns der Daten aus der CSV-Datei ist in Form eines Aktivitätsdiagramms in der Abbildung 4.1 dargestellt.

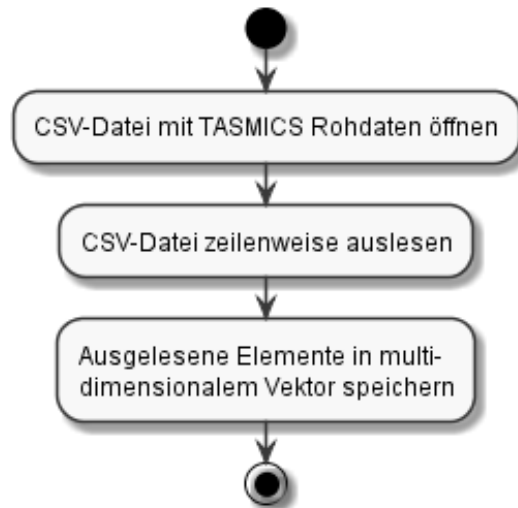


Abbildung 4.1.: Darstellung des Auslesens und Speicherns der TASMICS Rohdaten in Form eines Aktivitätsdiagramms

4.2.3. Interpolation zwischen den TASMICS Spektren

Da in den TASMICS Rohdaten nur Spektren von diskreten Röhrensparnungen enthalten sind, wird zwischen den einzelnen Röntgenspektren interpoliert, um einen fließenden Übergang der Spektren zu bekommen.

Es muss darauf geachtet werden, dass ein Spektrum keinen Beitrag bei den Energien hat, die größer oder gleich der angelegten Röhrensparnung ist. Das heißt, ein Röntgenspektrum mit der Röhrensparnung von 100 kV hat bei Energien, die ≥ 100 keV sind eine Photonen Fluenz von $0 \frac{\text{Photonen}}{\text{mm}^2 \mu\text{s}}$.

Des Weiteren ist zu beachten, dass das Ende jedes Spektrums linear gegen $0 \frac{\text{Photonen}}{\text{mm}^2 \mu\text{s}}$ verläuft und diesen Wert genau bei der angelegten Röhrensparnung erreicht.

In der Abbildung 4.2 ist in einem Aktivitätsdiagramm dargestellt, wie die Interpolation durchgeführt wird.

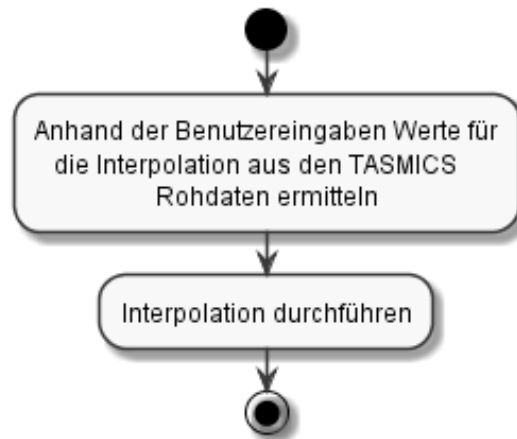


Abbildung 4.2.: Aktivitätsdiagramm für die grobe Darstellung der Interpolation zwischen den diskreten Röntgenspektren aus den TASMICS Rohdaten

4.2.4. Filterung des Röntgenspektrums

Nachdem es nun möglich ist ein Spektrum aus den TASMICS Rohdaten zu berechnen, beschäftigt sich dieser Unterabschnitt mit der Filterung dieses Spektrums durch Materialien.

Ein Material wird charakterisiert durch seinen Namen, seine Zusammensetzung aus einem oder mehreren Elementen der ersten 100 Elemente des Periodensystems, mit deren jeweiligen Anteilen am Material (vgl. Kapitel 3).

Zunächst erfolgt die Berechnung des Wirkungsquerschnittes eines Elements. In der Binärdatei *totalCrossSection.dat* sind die Wirkungsquerschnitte $\sigma_1 \dots \sigma_n$ der einzelnen Elemente für Photonenenergien $E_1 \dots E_n$ zwischen 1 keV und 1000 keV in der Einheit barn ($1 \text{ b} = 10^{-28} \text{ m}^2$) gespeichert. Der Wirkungsquerschnitt aus der Binärdatei setzt sich aus der Summe der Wirkungsquerschnitte des Photoeffekts, der Compton-Streuung und der Rayleigh-Streuung zusammen. In der Datei *totalCrossSection.dat* sind neben den Wirkungsquerschnitten auch die Ordnungszahl und das Gewicht in $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$ des jeweiligen Elements hinterlegt. In der Abbildung 4.3 wird das Aktivitätsdiagramm dargestellt, welches das Auslesen der Binärdatei und der Abspeicherung der darin enthaltenen Informationen für ein Element zeigt.

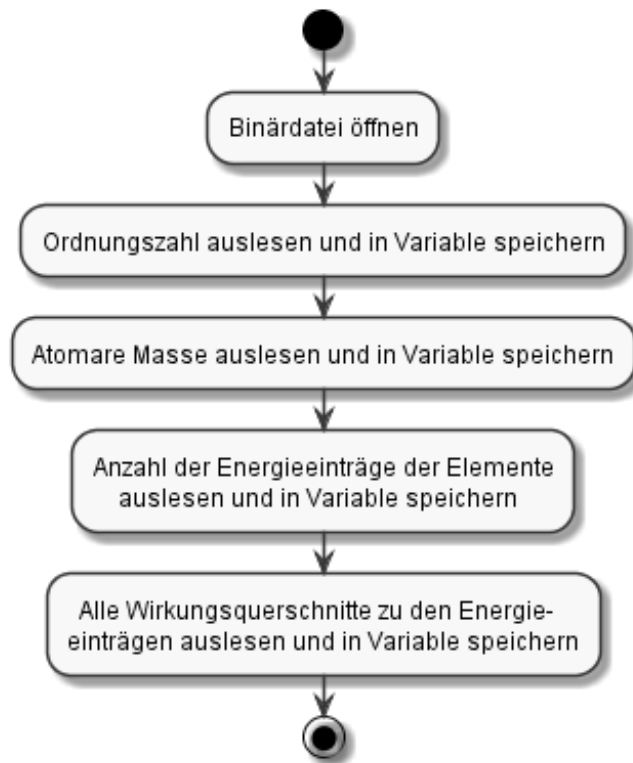


Abbildung 4.3.: Aktivitätsdiagramm für das Auslesen und Abspeichern der Informationen aus der Binärdatei für ein Element

Da auch hier die Wirkungsquerschnitte nur zu diskreten Energien vorliegen, muss eine Interpolation durchgeführt werden, um zu jeder möglichen Energie einen Wirkungsquerschnitt bestimmen zu können. Um die Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte von den Energien graphisch darzustellen, wird sowohl die Abszisse als auch die Ordinate logarithmisch unterteilt. Deshalb ist es sinnvoll eine Interpolation auf der Log-Log-Skalierung durchzuführen. Auf die Formel für die Berechnung einer linearen Interpolation

$$\sigma(E) = \sigma_k + (\sigma_{k+1} - \sigma_k) \cdot \frac{E - E_k}{E_{k+1} - E_k} \quad (4.1)$$

wird sowohl auf einzelnen Termen der Wirkungsquerschnitte als auch auf die der Energien der Logarithmus Naturalis angewandt.

Wird anschließend auf das daraus resultierende Gesamtergebnis die Exponentialfunktion angewandt, so ergibt sich

$$\begin{aligned}\sigma(E) &= \exp\left(\ln(\sigma_k) + (\ln(\sigma_{k+1}) - \ln(\sigma_k)) \cdot \frac{\ln(E) - \ln(E_k)}{\ln(E_{k+1}) - \ln(E_k)}\right) \\ &= \sigma_k \exp\left(\ln\left(\frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k}\right) \cdot \frac{\ln\left(\frac{E}{E_k}\right)}{\ln\left(\frac{E_{k+1}}{E_k}\right)}\right)\end{aligned}\quad (4.2)$$

als Formel für die Interpolation in der Log-Log-Skalierung. Somit ist es möglich zu jeder beliebigen Energie den entsprechenden Wirkungsquerschnitt zu berechnen. In der Abbildung 4.4 ist noch einmal in einem Aktivitätsdiagramm vereinfacht dargestellt, wie der Wirkungsquerschnitt eines Elements in der Klasse cElement bestimmt wird.

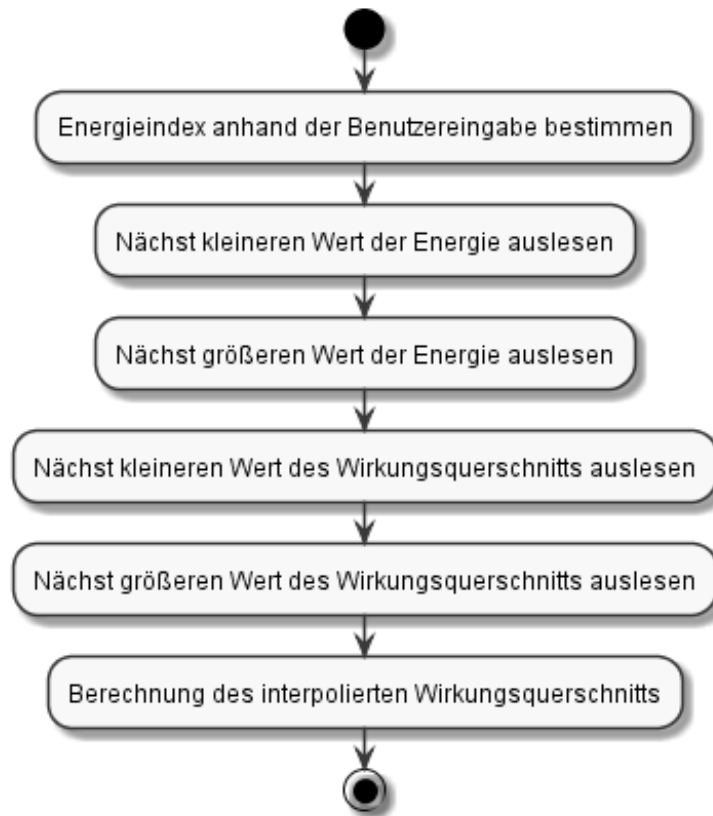


Abbildung 4.4.: Aktivitätsdiagramm der Log-Log Interpolation des Klasse cElement

Um mit dem Lambert-Beerschen Gesetz (siehe Gleichung (2.10)) die Abschwächung des Spektrums durch Materie bestimmen zu können, wird nun für jedes Material der Absorptionskoeffizient μ berechnet (siehe Gleichung (2.11)).

Dieser wird in der Einheit m^{-1} angegeben. Für die Dichte ρ wird $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$, für die Avogadro Konstante N_A wird mol^{-1} , für den Wirkungsquerschnitt σ wird m^2 und für die atomare Masse A wird $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$ als Einheit verwendet.

In der Klasse `cMaterial` werden die Absorptionskoeffizienten der verschiedenen Materialien gespeichert. Das Aktivitätsdiagramm der Berechnung des Absorptionskoeffizienten für ein Material ist aus der Abbildung 4.5 ersichtlich.

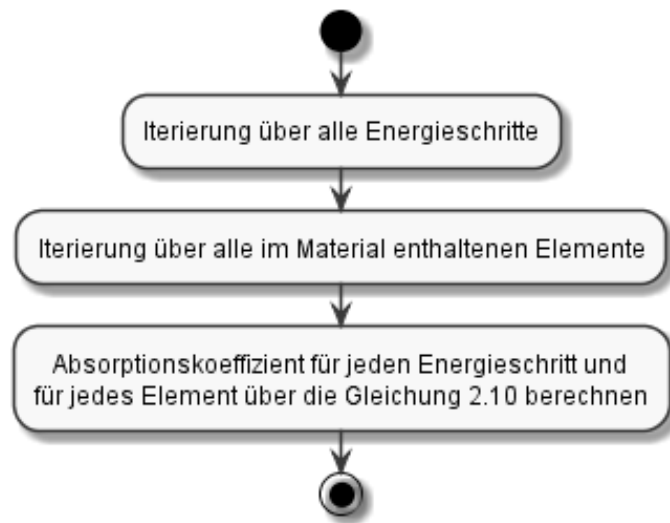


Abbildung 4.5.: Aktivitätsdiagramm der Berechnung des Absorptionskoeffizienten der verschiedenen Materialien

4.3. Programmablauf der Software zur Röntgenspektrenerzeugung

In diesem Abschnitt wird grob dargestellt, wie der gesamte Programmablauf der Software zur Röntgenspektrenerzeugung aussehen soll. Dazu werden alle Aktivitätsdiagramme zusammengesetzt und etwas erweitert. Das Ergebnis ist in der Abbildung 4.6 dargestellt.

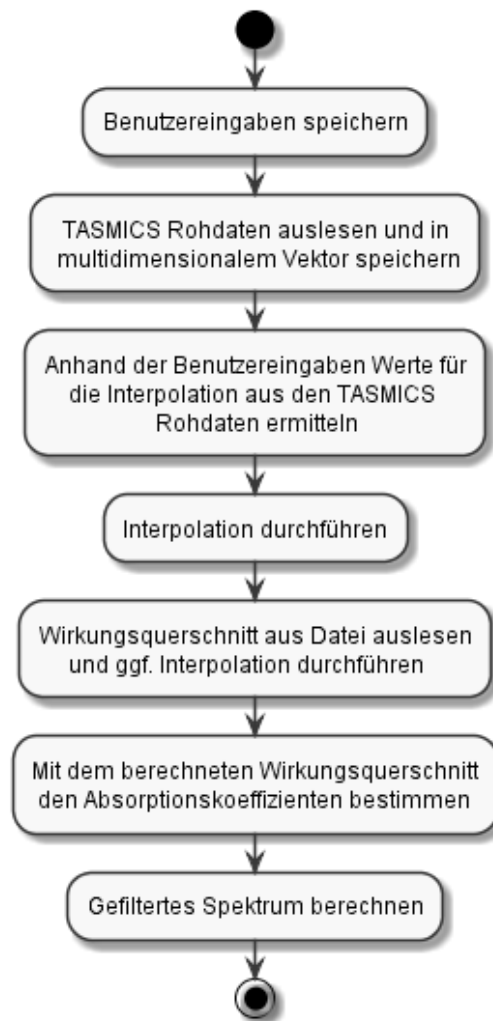


Abbildung 4.6.: Darstellung des groben Ablaufs des Programms zur Röntgenspektrenerzeugung

Zunächst muss der Anwender Werte vorgeben, mit denen das Röntgenspektrum bzw. das gefilterte Röntgenspektrum berechnet werden kann. Dazu gehören unter anderem die Röhrenspannung, die Energie bei der das Spektrum starten und enden soll, die Anzahl an Materialien, sowie ihre Zusammensetzung und Dichte. Anschließend wird aus den TASMICS Rohdaten das entsprechende Spektrum ausgelesen oder zwischen zwei Spektren interpoliert. Nachdem nun das Spektrum ohne Filterung vorhanden ist, kann es durch ein oder mehrere Materialien gefiltert werden. Die Filterung des Röntgenspektrums wird mit dem Lambert-Beerschen Gesetz durchgeführt.

4.4. Einbau des Programmcodes in die Software CT-Simulation

In diesem Abschnitt wird die Aufgabenstellung Einbau des Programmcodes in die Software CT-Simulation in einzelne Arbeitspakete aufgeteilt. Dabei wird speziell auf die Änderungen, die an der Software CT-Simulation durchgeführt werden und auf die Anpassungen, die an der Röntgenspektrumssimulationssoftware vorgenommen werden müssen, eingegangen.

4.4.1. Ausgangsversion der Röntgenspektrumssimulation

Dieser Unterabschnitt beschreibt, wie die Röntgenspektrumssimulation in der Ausgangsversion der Software CT-Simulation realisiert wurde.

Zunächst muss der Benutzer über ein Dropdown-Menü auswählen, zu welcher Röhrenspannung das Spektrum berechnet werden soll. Das Dropdown-Menü ist in der Abbildung 4.7 dargestellt.

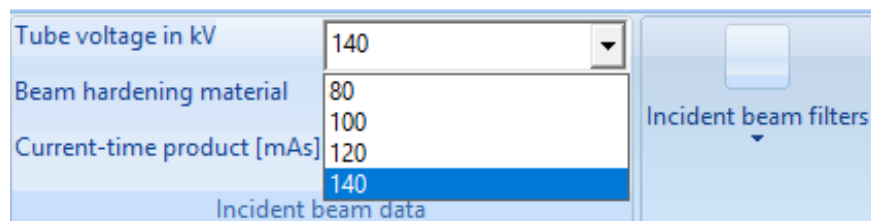


Abbildung 4.7.: Darstellung der Röhrenspannungsauswahl der Ausgangsversion der Software CT-Simulation

Aus der Abbildung 4.7 ist erkennbar, dass es bei der Ausgangsversion von CT-Simulation nur möglich ist, Spektren mit den vier Röhrenspannungen 80 kV, 100 kV, 120 kV und 140 kV auszuwählen. Die Röntgenspektren zu diesen Röhrenspannungen sind in der Klasse XraySpectrum jeweils als array implementiert. In jedem array sind zu 100 Energiewerten Röntgenspektrumsbeiträge gespeichert. Sie liegen in der Einheit $\frac{\#}{\mu\text{sr keV mAs}}$ vor. Die Spektren wurden mit einer Wolframanode in einem Anodenwinkel von 8° simuliert.

In der Klasse CTRawData wird das Röntgenspektrum in der Methode prepareXraySpectrum generiert. Anschließend wird das Spektrum in der selben Methode in die Einheit $\frac{\# \text{ keV}}{\text{sr keV mAs}}$ umgerechnet. Danach wird es durch die in der Software ausgewählten Materialien gefiltert.

4.4.2. Anpassungen der Software CT-Simulation

Als erstes müssen die Klassen in dem Programmcode der Software CT-Simulation ausfindig gemacht werden, die für die Berechnung der Röntgenspektrumssimulation zuständig sind oder die das berechnete Spektrum weiter verwenden. Wie schon im Unterkapitel 4.4.1 beschrieben, wird das in der Klasse XraySpektrum berechnete Spektrum von der Klasse CTRawData verwendet. Außerdem müssen Anpassung an der GUI vorgenommen werden, damit alle möglichen Spektren mit den Eingangsspannungen zwischen 20 kV und 640 kV berechnet werden können.

4.4.3. Anpassungen der Software zur Röntgenspektrensimation

Zunächst wird überprüft welche Klassen und Methoden, der in dieser Thesis entwickelten Software, in der GUI Anwendung CT-Simulation verwendet werden können und welche bereits implementiert sind. Außerdem müssen Änderungen an Klassen und Methoden vorgenommen werden, um die Software an das Programm CT-Simulation anzupassen.

5. Implementierung

Dieses Kapitel der Thesis befasst sich mit der Realisierung der im Kapitel 4 Design angesprochenen Teilaufgaben. Dazu werden für die entsprechenden Teilaufgaben Funktionen der einzelnen Klassen näher beleuchtet. Es werden beispielhaft Quellcodepassagen herausgesucht und erläutert.

5.1. TASMICS Rohdaten auslesen und speichern

Im Quellcode 5.1 wird die Methode `writeDataInMatrix` gezeigt, die dafür sorgt, dass die CSV-Datei mit den TASMICS Rohdaten ausgelesen und die Röntgenspektren in einem multidimensionalen Vektor gespeichert werden.

```
1 void cReadAndStoreTasmicsData::writeDataInMatrix(unsigned int numberLines,
2                                             vector <string>& readInCSVFile,
3                                             vector <string>& splittedString,
4                                             vector <vector<float>>& dataTASMICSMatrix,
5                                             vector <float>& dataFloat) {
6     // Declare variables
7     unsigned int row, column;
8
9     for (row = 0; row < numberLines; row++)
10    {
11        // Split the string in single elements which are separated with a ','
12        splitString(readInCSVFile.at(row), splittedString);
13
14        // Convert string elements into float elements
15        string2Float(splittedString, dataFloat);
16
17        for (column = 0; column < dataFloat.size(); column++)
18        {
19            // Write float elements into the multidimensional vector
20            dataTASMICSMatrix[row][column] = dataFloat.at(column);
21        }
22    }
23    return;
24 }
```

Quellcode 5.1: Programmcode zur Speicherung der TASMICS Rohdaten in einem multidimensionalen Vektor

Die Methode `writeDataInMatrix` besteht im Wesentlichen aus zwei verschachtelten `for`-Schleifen. In der äußeren Schleife werden die einzelnen Zeilen der CSV-Datei, die sich in der Variable `readInCSVFile` befinden, mit Hilfe der Methode `splitString` in einzelne Elemente aufgesplittet und in der `string`-Variable `splittedString` gespeichert. In einer CSV-Datei sind die einzelnen Elemente durch das Trennzeichen `,` voneinander separiert. Nachdem eine Zeile ausgelesen und in ihre einzelnen Elemente aufgesplittet wurde, werden nun die sich in der `string`-Variable befindlichen Daten in `float`-Daten umgewandelt und in der Variable `dataFloat` gespeichert. Grund dafür ist, dass später mit diesen Daten gerechnet werden muss.

Die verschachtelte Schleife ist dafür zuständig, die einzelnen Elemente, der im Vektor `dataFloat` gespeicherten `float` Daten, an die richtige Spalte im multidimensionalen Vektor `dataTASMICSMatrix` zu schreiben.

5.2. Interpolation zwischen den TASMICS Spektren

Da nun die TASMICS Spektren in einem multidimensionalen Vektor gespeichert sind, kann jetzt zwischen den einzelnen Spektren interpoliert werden, um ein Spektrum zu einer beliebigen Röhrenspannung zwischen 20 kV und 640 kV zu berechnen.

Auf den Abbildungen 5.1 und 5.2 ist die vorzunehmende Interpolation der Spektren bildlich dargestellt.

	x_1	x	x_2
y_1	q_{11}		q_{21}
y		P	
y_2	q_{12}		q_{22}

Abbildung 5.1.: Schematische Darstellung der biliniaren Interpolation; x_1, x_2 stellen zwei nebeneinander liegende Spannungswerte, y_1, y_2 stellen zwei benachbarte Energiewerte und $q_{11}, q_{12}, q_{21}, q_{22}$ die jeweiligen Stützwerte zu den Spannungs- und Energiewerten aus den TASMICS Rohdaten dar; P ist der zu interpolierende Punkt mit den Koordinaten x, y

Aus der Abbildung 5.1 lässt sich sehr gut erkennen, dass ein beliebiger Punkt P mit seinen Koordinaten x, y zwischen den vier Stützpunkten $q_{11}, q_{12}, q_{21}, q_{22}$ liegen kann.

Die Stützpunkte stellen Werte aus den TASMICS Rohdaten dar. Sollte sich der Punkt P nicht im Grenzbereich befinden, kann eine biliniare Interpolation durchgeführt werden. Der Punkt P kann allgemein über den Zusammenhang

$$P \approx \frac{(x_2 - x)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}q_{11} + \frac{(x - x_1)(y_2 - y)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}q_{21} \\ + \frac{(x_2 - x)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}q_{12} + \frac{(x - x_1)(y - y_1)}{(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)}q_{22} \quad (5.1)$$

berechnet werden. In der Abbildung 5.2 ist ein Ausschnitt der TASMICS Rohdaten dargestellt.

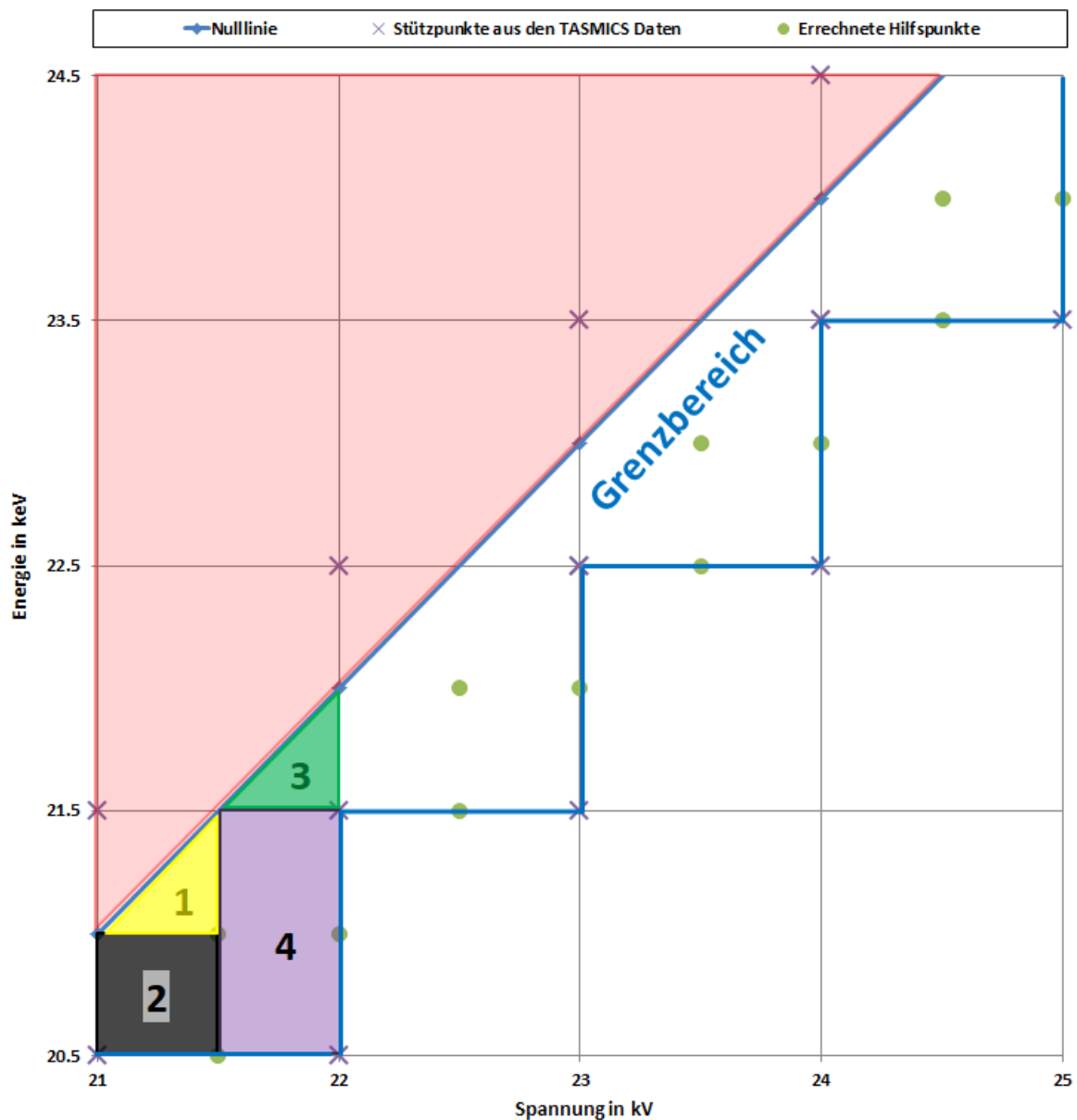


Abbildung 5.2.: Darstellung der verschiedenen Fälle, in der der zu interpolierende Punkt P im Grenzbereich liegen kann

Dabei stellen die Eckpunkte des Gitters die einzelnen Beiträge des Spektrums zu den jeweiligen Röhrensparnungen und Energien dar. Die blaue Gerade ist die Grenze, an der die Röntgenspektren noch einen Beitrag haben. Sobald sich ein Punkt auf der blauen Geraden oder in der rot hinterlegten Fläche befindet, hat das Spektrum der zugehörigen Röhrensparnung keinen Beitrag mehr.

Der Bereich, der direkt an der Nulllinie auf der nicht rot hinterlegten Seite liegt, wird als Grenzbereich bezeichnet (siehe blau umrandeter Bereich in Abbildung 5.2).

Wie schon erwähnt, wird im Grenzbereich die Interpolation nicht mit vier Stützwerten aus den TASMICS Rohdaten durchgeführt, sondern es werden je nach Lage des zu bestimmenden Punktes auch andere Werte für die Interpolation genutzt. Zunächst gibt es drei verschiedene Fälle in der sich der zu interpolierende Punkt befinden kann (vgl. Abbildung 5.2):

1. Im rot markierten Bereich
2. Im Grenzbereich unter der Nulllinie
3. Unter der Nulllinie und nicht im Grenzbereich

Für den ersten Punkt muss keine Interpolation durchgeführt werden, da dort das Spektrum keinen Beitrag mehr hat. Befindet sich der zu interpolierende Punkt nicht im Grenzbereich so kann eine biliniare Interpolation mit den entsprechenden Stützpunkten aus den TASMICS Rohdaten durchgeführt werden.

Liegt der Punkt im Grenzbereich so muss noch einmal differenziert werden, wo genau sich der zu interpolierte Punkt zwischen den Stützwerten aus den TASMICS Rohdaten befindet. Der Grenzbereich liegt direkt unter der Nulllinie (siehe Abbildung 5.2). Die mit einem violetten Kreuz gekennzeichneten Punkte sind Stützpunkte im Grenzbereich aus den TASMIC Rohdaten. Die grünen Punkte stellen aus den Stützpunkten errechnete Hilfspunkte dar, mit denen dann die Interpolation durchgeführt wird. Der Grenzbereich, zwischen zwei Röhrenspannungswerten aus den TASMICS Rohdaten, lässt sich in vier Felder aufteilen, in denen sich ein zu interpolierender Punkt befinden kann (vgl. Abbildung 5.2):

1. Im Dreieck (gelbe Fläche)
2. Im Rechteck (schwarze Fläche)
3. Im Dreieck (grüne Fläche)
4. Im Rechteck (violette Fläche)

Je nach dem in welchem Bereich ein zu interpolierende Punkt liegt, werden verschiedene Werte zur Interpolation herangezogen. Liegt der Punkt P im violetten Bereich (4), so sind die Eckpunkte des violetten Rechtecks die Stützwerte, die für die biliniare Interpolation genutzt werden. Entsprechend dienen für den schwarzen Bereich (2) dessen Eckpunkte als Stützwerte für die biliniare Interpolation. Befindet sich der zu interpolierende Punkt P im gelben (1) oder grünen Bereich (3), wird eine lineare Interpolation durchgeführt. Stützwerte sind dabei der Wert auf der Nulllinie und der Eckpunkt, der gegenüber von der Hypotenuse des Dreiecks liegt.

5.3. Filterung des Röntgenspektrums

In diesem Unterabschnitt wird die Methode `getAbsorption` erläutert, die für die Berechnung der Absorptionskoeffizienten der zu filternden Materialien verantwortlich ist. Die Methode ist im Quellcode 5.2 dargestellt.

```

1 void cMaterial::getAbsorption(std::vector< std::vector<float> > &totalAtt, float minEnergy,
2     float tubeVoltage, unsigned energySteps, unsigned numMaterials)
3 {
4     cElement element; // Element to provide the elementar data
5     std::vector<float> specMatCoeff; // Store attenuation coefficients of one material
6     unsigned enIndex; // Index for energy levels
7     unsigned elemIndex; // Index for the different elements
8     float stepSize; // Step size for the energy levels
9     float cumCs; // Cummulative cross section of the elements
10    float cumAr; // Cummulative nucleus mass
11
12    // Generate data of the element
13    element.prepare();
14    // Give the vector a specific size
15    specMatCoeff.resize(energySteps+1);
16    totalAtt.resize(numMaterials);
17
18    // Calculate the step size
19    stepSize = (tubeVoltage - minEnergy) / energySteps;
20
21    for (int i_nM = 0; i_nM <= numMaterials - 1; i_nM++) {
22
23        for (enIndex = 0; enIndex < energySteps; enIndex++) {
24
25            // Reset the cummulative variables
26            cumCs = 0;
27            cumAr = 0;
28
29            // Calculate the two weighted sums of the cummlative variables
30            for (elemIndex = 0; elemIndex < Z[i_nM].size(); elemIndex++) {
31                cumCs += fraction[i_nM][elemIndex]
32                    * element.getTotalCrossSection(Z[i_nM][elemIndex],
33                    minEnergy + enIndex * stepSize);
34                cumAr += fraction[i_nM][elemIndex]
35                    * element.getAtomicWeight(Z[i_nM][elemIndex]);
36            }
37
38            // Calculate the attenuation coefficient for the current energy
39            // level in m^-1
40            specMatCoeff[enIndex] = density.at(i_nM) * AVOGADRO_CONSTANT
41                * cumCs / cumAr * 1e-22;
42        }
43        specMatCoeff[energySteps] = 0;
44
45        totalAtt[i_nM] = specMatCoeff;
46    }
47    return;
48 }

```

Quellcode 5.2: Programmcode zur Berechnung der Absorptionskoeffizienten zu beliebigen Energien für ein oder mehrere Materialien

Aus der Gleichung 2.11, die für die Berechnung des Absorptionskoeffizienten genutzt wird, ist ersichtlich, dass dort zwei Summen berechnet werden müssen. Diese Aufgabe übernimmt die innerste der drei in einander verschachtelten for-Schleifen aus dem Quellcode 5.2.

Da für jede Energie ein Absorptionskoeffizient zu berechnen ist, wird mit Hilfe der mittleren for-Schleife durch alle für das Röntgenspektrum relevanten Energien iteriert. Die für die verschiedenen Energien ermittelten Summen werden dann mit den übrigen festen Parametern aus der Gleichung 2.10 verrechnet und in dem Vektor `specMatCoeff` gespeichert.

Ein Filter kann aus mehreren verschiedenen Materialien bestehen. Diese Materialien haben unterschiedliche Absorptionskoeffizienten. Um nun alle Absorptionskoeffizienten der verschiedenen Materialien speichern zu können, werden mit der äußeren for-Schleife alle Materialien durchlaufen, die zu der Filterung des Röntgenspektrum beitragen. Der für jedes Material berechnete Vektor der Absorptionskoeffizienten `specMatCoeff` wird abschließend in dem multidimensionalen Vektor `totalAtt` gespeichert.

5.4. Einbau des Programmcodes in die Software CT-Simulation

Dieser Abschnitt beschreibt die Realisierung des Einbaus der Klassen zur Röntgenspektrumssimulation in die Software CT-Simulation.

5.4.1. Anpassungen der Software CT-Simulation

Als erstes wird die Eingabe der Röntgenspannung angepasst. Das Dropdown-Menü wird durch ein Texteingabefeld ersetzt. Dazu werden in der Klasse `ctMainFrame` alle Programmzeilen, die zum Dropdown-Menü gehören entfernt. Anschließend wird ein Texteingabefeld an die Stelle des Dropdown-Menüs eingefügt. Die neue Röhrenspannungseingabe über die GUI ist in der Abbildung 5.3 dargestellt.

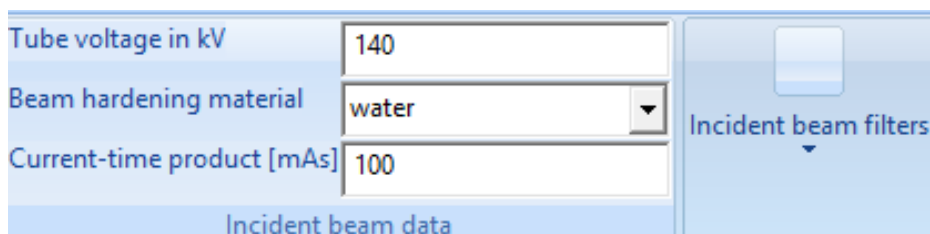


Abbildung 5.3.: Darstellung der Röhrenspannungsauswahl in der GUI mit Texteingabefeld

Nachdem das Texteingabefeld für die Röhrenspannung implementiert wurde, muss die darin eingegebene Spannung gespeichert werden. Die Speicherung erfolgt in der Klasse `InputData`. In dem Quellcode 5.3 ist die Aktualisierung und Speicherung der Röhrenspannung in der Klasse `InputData` dargestellt.

```

1 //=====
2 void ctMainFrame::onEditTextInput (wxCommandEvent&evt) // [in] event data coming from the
3 // control
4 //=====
5 {
6     //This method is triggered whenever any text control from the ribbon bar is edited
7     //it updates the local cInputData instance residing in the mainFrame and notifies the
8     //presenter of the id of the control that changed.
9
10    //transfer the values from the validator linked to the control to the InputData
11    //corresponding field
12    this->FindWindowById(evt.GetId())->GetValidator()->TransferFromWindow();
13
14    switch (evt.GetId()) {
15        case wxID_SELECTED_TUBE_VOLTAGE1: {
16            //Update the tube voltage in the local inputData
17            tubeVoltage1->GetValue().ToDouble(&this->inputData.tubeVoltage);
18            break;
19        }
20        default:{
21            break;
22        }
23    }
24    //Propagate the new state of the GUI in case the simulation state reverts
25    presenter->updateSimState(evt.GetId());
26 }

```

Quellcode 5.3: Programmcode zur Aktualisierung und Speicherung der Röhrenspannung bei einer Eingabe in das Texteingabefeld

Sobald in dem Texteingabefeld für die Röntgenspannung etwas eingegeben oder verändert wird, wird ein Event mit dem Namen `wxid_selected_tube_voltage1` in der Klasse `ctMainFrame` erzeugt. Die Methode `onEditTextInput` verarbeitet dann dieses Event, wie es im Quellcode 5.3 gezeigt ist. Dabei wird der in dem Texteingabefeld stehende Wert in einen `double`-Wert umgewandelt und in der Variable `tubeVoltage` des Objektes `inputData` der Klasse `InputData` gespeichert.

Da jetzt eine beliebige Röhrenspannung eingegeben werden kann, können jetzt die Klassen, die für die Röntgenspektrumssimulation benötigt werden, in den Programmcode der Software CT-Simulation eingefügt werden. Die Berechnung des neuen Spektrums erfolgt an der gleichen Stelle im Programmcode wie die Berechnung des alten Spektrums. Aus der in dieser Thesis entwickelten Software sind nur die Klassen `cReadAndStoreTasmicsData` und `cCalculateXraySpectra` für die ungefilterte Röntgenspektrumssimulation relevant. Die anderen Klassen werden nicht in den Programmcode eingebaut, da bereits eine Filterung der Röntgenspektren durch Materialien in der Software CT-Simulation realisiert wurde.

5.4.2. Anpassungen der Software zur Röntgenspektrensimulation

Um die Klassen `cCalculateXraySpectra` und `cReadAndStoreTasmicsData` in der Software CT-Simulation nutzen zu können, muss der Quellcode dieser Klassen angepasst werden.

In der Klasse `cCalculateXraySpectra` werden alle Methoden und Variablen entfernt, die mit der gefilterten Spektrumsberechnung zu tun haben. Außerdem wird im Konstruktor ein weiterer Aufrufparameter für die Röhrenspannung hinzugefügt. Dieser ist notwendig, um den aktuellen Wert der Röhrenspannung aus der Klasse `InputData` zu erlangen. Des Weiteren werden die Variablen `minEnergy`, `maxEnergy`, `enSteps` der Klasse `cCalculateXraySpectra` mit konstanten Werten belegt (siehe Unterabschnitt 3.3). Zudem wird der Energiebereich der Klasse `cTotalCrossSection` mit der Methode `setEnergyRange` im Konstruktor gesetzt. Zum Schluss muss die Klasse `cCalculateXraySpectra` von der Klasse `spectrum` erben, da in dieser Klasse verschiedene Rechenoperatoren auf einen Vektor angewendet werden können. Mit diesen Rechenoperatoren wird unter anderem das gefilterte Röntgenspektrum berechnet.

In der Klasse `cReadAndStoreTasmicsData` müssen nicht so viele Änderungen vorgenommen werden, um in den Programmcode der Software CT-Simulation integriert werden zu können. Hier wurde lediglich das `exception handling` angepasst. Sobald ein Fehler bei dem Auslesen der Datei auftritt, wird eine `MessageBox` mit einem Fehlertext erzeugt anstatt den Fehlertext in der Konsole auszugeben.

6. Test

Dieses Kapitel befasst sich mit der Validierung des implementierten Quellcodes und der Darstellung der Ergebnisse dieser Bachelorthesis. Zunächst werden die einzelnen Klassen und deren Zusammenspiel getestet. Danach werden die Ergebnisse dargestellt und anschließend noch mit denen von bereits bestehenden Simulationstools für Röntgenspektrenerzeugung verglichen.

6.1. Test der einzelnen Klassen

Die einzelnen Klassen beziehungsweise die jeweiligen Funktionen in den Klassen werden in diesem Unterabschnitt getestet. Dazu werden verschiedene Tests programmiert, die das zu erwartende Ergebnis der jeweiligen Funktion mit dem tatsächlichen Ergebnis vergleicht, welches die Funktion zurückgibt. Das zu erwartende Ergebnis wurde vorher manuell ausgerechnet. In dem folgenden Quellcode 6.1 wird einmal beispielhaft gezeigt, wie ein solcher Test umgesetzt wurde.

```
1 void testReadAndStoreTasmicsData() {
2     // Declare variables
3     cReadAndStoreTasmicsData tasmicsData;
4
5     cout << "Checking_class_cReadAndStoreTasmicsData" << endl;
6
7     // Checking some entries of the file
8     // Entry [0][0]
9     if (tasmicsData.dataTASMICSMatrix[0][0] != 0) {
10         throw "The_TASMICS_data_[0][0]_was_not_stored_properly";
11     }
12     // Entry [0][621]
13     if (abs(((tasmicsData.dataTASMICSMatrix[0][621] / 640) - 1) > 0.001)) {
14         throw "The_TASMICS_data_[0][621]_was_not_stored_properly";
15     }
16     // Entry [639][0]
17     if (abs(((tasmicsData.dataTASMICSMatrix[639][0] / 639.5) - 1) > 0.001)) {
18         throw "The_TASMICS_data_[639][0]_was_not_stored_properly";
19     }
20     // Entry [639][621]
21     if (abs(((tasmicsData.dataTASMICSMatrix[639][621] / 1.8301) - 1) > 0.001)) {
22         throw "The_TASMICS_data_[639][621]_was_not_stored_properly";
23     }
24     // Entry [158][168]
```

```

25     if (abs(((tasmicsData.dataTASMICSMatrix[158][168] / 5827.1) - 1) > 0.001)) {
26         throw "The_TASMICS_data_[158][168]_was_not_stored_properly";
27     }
28     // Entry [264][360]
29     if (abs(((tasmicsData.dataTASMICSMatrix[264][360] / 5848.2) - 1) > 0.001)) {
30         throw "the_tasmics_data_[264][360]_was_not_stored_properly";
31     }
32
33     cout << "Checking_class_cReadAndStoreTasmicsData_was_succuessful!!!\n" << endl;
34
35     return;
36 }

```

Quellcode 6.1: Programmcode der Testfunktion für das Auslesen der TASMICS Rohdaten

6.1.1. TASMICS Rohdaten auslesen und speichern

Um zu testen, ob das Auslesen der TASMICS Rohdaten funktioniert, werden verschiedene Werte aus den TASMICS Rohdaten ausgewählt. Dabei wird überprüft, ob diese Werte mit denen übereinstimmen, die in dem multidimensionalen Vektor an der entsprechenden Stelle gespeichert wurden. Bei der Auswahl der zu überprüfenden Daten wurde darauf geachtet, dass diese nicht direkt nebeneinander in der CSV-Datei liegen, sondern breit gestreut sind. Die Tabelle 6.1 enthält die getesteten Punkte mit dem jeweiligen Ergebnis.

Spannung in kV	Energie in keV	Wert aus CSV-Datei	Ausgelesener Wert	Testergebnis
639	621,5	1,8301	1,8301	bestanden
158	168,5	5827,1	5827,1	bestanden
264	360,5	5848,2	5848,2	bestanden

Tabelle 6.1.: Test des Auslesens der TASMICS Rohdaten

Aus der Tabelle 6.1 geht hervor, dass die Klasse die Daten korrekt aus der CSV-Datei ausliest.

6.1.2. Interpolation zwischen den TASMICS Spektren

Um die richtige Interpolation von zwischen den TASMICS liegenden Daten sicherzustellen, wird ähnlich der Vorgehensweise im Unterkapitel 6.1.1 verfahren. Es werden verschiedene Werte überprüft. Dazu werden sie manuell ausgerechnet und anschließend mit den berechneten Werten des Programms verglichen.

Ist der Wert identisch, gilt der Test als erfolgreich bestanden. In der Tabelle 6.2 sind die verschiedenen Tests und deren Testergebnisse aufgeführt.

Spannung in kV	Energie in keV	Manuell berechneter Wert	Berechneter Wert des Programms	Testergebnis
120,5	50,0	49 646	49 646	bestanden
23,0	19,5	15 579	15 579	bestanden
275,0	22,0	50 016,5	50 016,5	bestanden
610,5	10,5	24 122	24 122	bestanden
422,816	99,95	27 595,1888	27 595,1888	bestanden

Tabelle 6.2.: Test der Interpolation zwischen den Spektren der TASMICS Rohdaten

Wie aus der Tabelle 6.2 ersichtlich, sind die Tests erfolgreich absolviert worden. Somit ist sichergestellt, dass die Interpolation zwischen den einzelnen Röntgenspektren der TASMICS Rohdaten funktioniert.

6.1.3. Filterung des Röntgenspektrums

Zur Überprüfung der korrekten Filterung des Röntgenspektrums wird zunächst getestet, ob die Daten aus der Binärdatei *totalCrossSection.dat* richtig ausgelesen werden. In dem Test wird sich nur auf das Auslesen der Daten für die atomare Masse der einzelnen Elemente beschränkt. Es werden die Gewichte von verschiedenen Elementen aus dem Periodensystem ausgelesen und mit Gewichten, wie sie in der Literatur zu finden sind (siehe [6]) verglichen. Das hat den Vorteil, dass so die Daten der atomaren Masse selbst in der Binärdatei auf Richtigkeit überprüft werden. Die Testergebnisse sind in der Tabelle 6.3 aufgeführt.

Element	Atomare Masse in g mol⁻¹	Ausgelesener Wert in g mol⁻¹	Testergebnis
Wasserstoff	1,008	1,008	bestanden
Kohlenstoff	12,011	12,011	bestanden
Schwefel	32,06	32,06	bestanden
Blei	207,19	207,19	bestanden
Uran	238,03	238,03	bestanden
Fermium	257,1	257,1	bestanden

Tabelle 6.3.: Testergebnisse des Auslesens der atomaren Masse von verschiedenen Elementen aus der Binärdatei *totalCrossSection.dat*

Aus der Tabelle 6.3 ist entnehmbar, dass das Auslesen der atomaren Masse aus der Binärdatei *totalCrossSection.dat* funktioniert.

Als nächstes wird an einem Beispiel getestet, ob die Log-Log-Interpolation zwischen den verschiedenen Wirkungsquerschnitten funktioniert. Auch hier wurde vorher der Wert des Wirkungsquerschnittes bei einer bestimmten Energie bestimmt ($\sigma_{Berechnet}$) und mit dem des Programms ($\sigma_{Programm}$) verglichen. Das Ergebnis dieses Tests ist in der Tabelle 6.4 dargestellt.

Element	Energie in keV	$\sigma_{Berechnet}$ in g mol⁻¹	$\sigma_{Programm}$ in g mol⁻¹	Testergebnis
Aluminium	27,9	61,223	61,223	bestanden
Aluminium	50,6	16,1862	16,1862	bestanden
Aluminium	105,3	7,3911	7,3911	bestanden
Kupfer	77,8	86,2956	16,1862	bestanden
Kupfer	135,1	27,4901	7,3911	bestanden
Wolfram	97,63	1438,07	1438,07	bestanden
Wolfram	150,25	479,594	479,594	bestanden

Tabelle 6.4.: Testergebnisse der Interpolation des Wirkungsquerschnitts σ für Aluminium bei verschiedenen Energien

Wie aus der Tabelle 6.4 zu erkennen ist, war auch dieser Test zur Interpolation des Wirkungsquerschnitts σ erfolgreich.

Mit dem nächsten Test wird überprüft, ob der Absorptionskoeffizient μ richtig berechnet wird. Dazu werden die Absorptionskoeffizienten der Materialien Wasser, Aluminium und Kupfer berechnet und anschließend mit dem Wert des Programms verglichen. Das Ergebnis dieses Test ist in der Tabelle 6.5 zu finden.

Element	Energie in keV	Dichte in $\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$	$\mu_{\text{Berechnet}}$ in m^{-1}	μ_{Programm} in m^{-1}	Testergebnis
Wasser	50,0	1,0	22,7	22,7	bestanden
Aluminium	60,0	2,7	75,076	75,076	bestanden
Kupfer	80,0	8,96	684,351	684,351	bestanden

Tabelle 6.5.: Testergebnisse der Berechnung des Absorptionskoeffizienten von Wasser

Die Tabelle 6.5 zeigt, dass das Programm die Absorptionskoeffizienten richtig berechnet. Alle theoretisch ermittelten Absorptionskoeffizienten stimmen mit den Absorptionskoeffizienten des Programms überein.

6.2. Darstellung der Ergebnisse

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse der Röntgenspektrumssimulation präsentiert. Die simulierten Werte für die Röntgenspektren befinden sich im Anhang auf der CD im Ordner „Messwerte_und_Vergleiche“ in der Datei *Darstellung_der_Ergebnisse.xlsx*.

6.2.1. Röntgenspektren mit unterschiedlichen Röhrensparnungen

Zunächst werden unterschiedliche Spektren ohne Filterung betrachtet. Dabei werden Röntgenspektren mit den Röhrensparnungen 25 kV, 50 kV, 75 kV, 100 kV und 150 kV verwendet, die in bildgebenden Verfahren der Medizintechnik häufig genutzt werden. Die Röntgenspektren dieser Röhrensparnungen sind in der Abbildung 6.1 dargestellt.

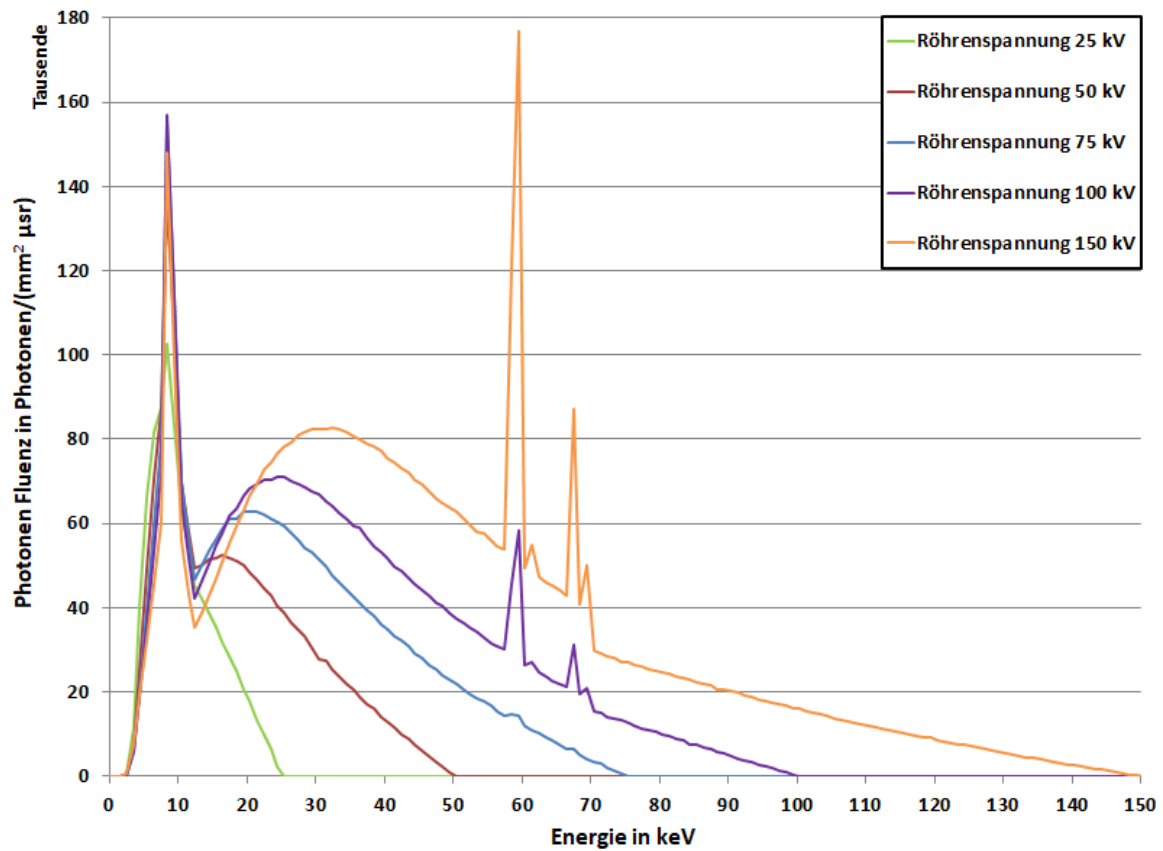


Abbildung 6.1.: Darstellung von ungefilterten Röntgenspektren mit unterschiedlichen Röhrensparnungen

In der Abbildung 6.1 sind die Röntgenspektren von verschiedenen Röhrensparnungen dargestellt. Die Spektren weisen die Form eines typischen Röntgenspektrums auf. Außerdem lassen die Peaks der Röntgenspektren Rückschlüsse auf das verwendete Anodenmaterial zu. In diesem Fall handelt es sich um eine Wolframanode. Wie schon im Unterabschnitt 2.3.4 beschrieben, entstehen die Peaks genau bei der Energie, die der Differenz der Bindungsenergien zwischen zwei Schalen eines Atoms (hier Wolframatom) entspricht. Die Werte der Bindungsenergien der Schalen eines Wolframatoms sind in Abbildung 2.8 zu sehen. Des Weiteren ist zu erkennen, dass die Röntgenspektren die X-Achse genau bei der Energie schneiden, die dem Wert der jeweils angelegten Röhrensparnung entspricht.

6.2.2. Röntgenspektren mit Aluminiumfilterung unterschiedlicher Dicke

Im Folgenden werden Röntgenspektren mit unterschiedlich starken Aluminiumfiltern bei einer Röhrensorgung von 100 kV berechnet und dargestellt. Die Abbildung 6.2 zeigt die Ergebnisse.

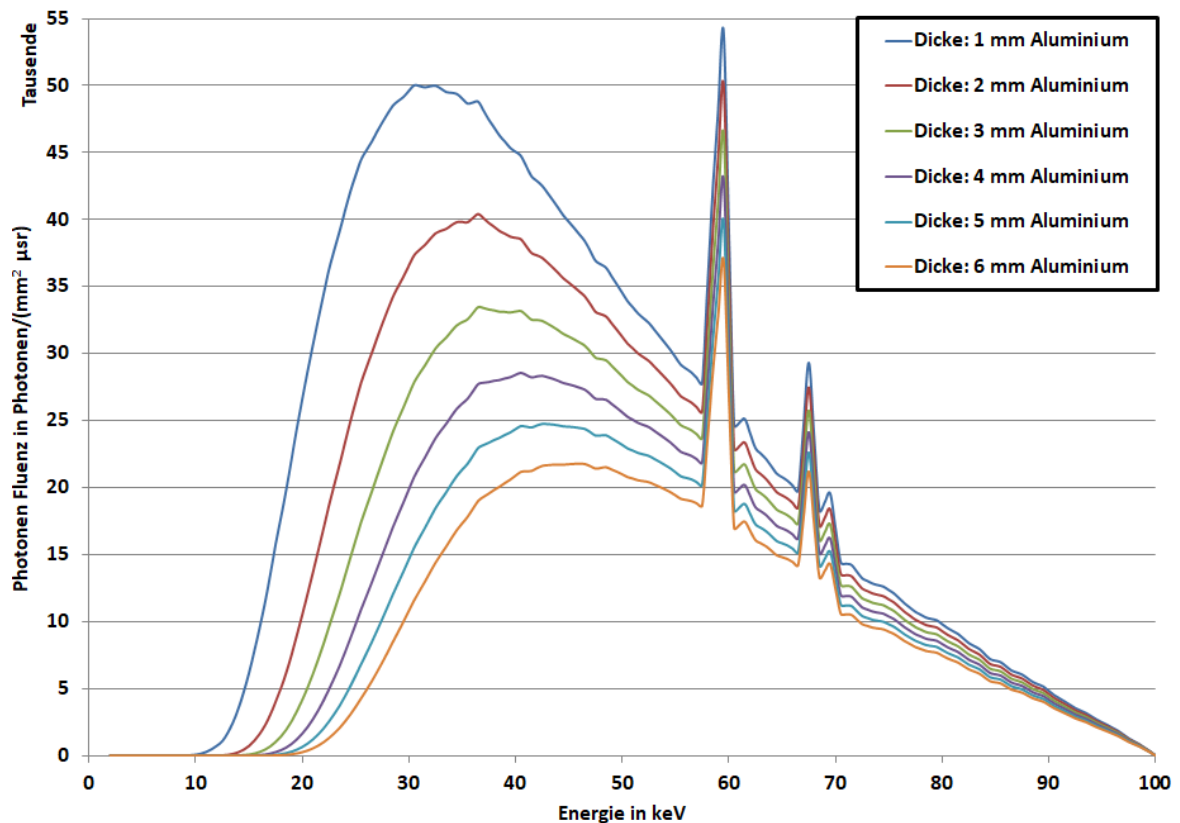


Abbildung 6.2.: Darstellung von Röntgenspektren mit Aluminiumfilterung unterschiedlicher Dicke bei einer Röhrensorgung von 100 kV

In der Abbildung 6.2 ist die Abschwächung des Spektrums durch die unterschiedlich starken Filter sehr gut erkennbar. Wird das ungefilterte mit dem gefilterten Röntgenspektrum verglichen, so fällt zunächst auf, dass der erste Pik (bei ca. 9 keV) durch die Filterung unterdrückt wird. Außerdem bewirkt die Filterung des Spektrums eine Verringerung der Photonen Fluenz. Dieser Effekt wird durch eine Vergrößerung der Dicke des Filters verstärkt.

6.2.3. Röntgenspektren mit Filterung von unterschiedlichen Materialien

In diesem Unterabschnitt werden die Filtermaterialien Aluminium (Dichte: $2,7 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$), Wolfram (Dichte: $19,25 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$), Wasser (Dichte: $1,0 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$) und Eisen (Dichte: $7,87 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$) mit einer Dicke von 3 mm bei einer Röhrensorgung von 100 kV simuliert. Das Ergebnis ist in der Abbildung 6.3 zu sehen.

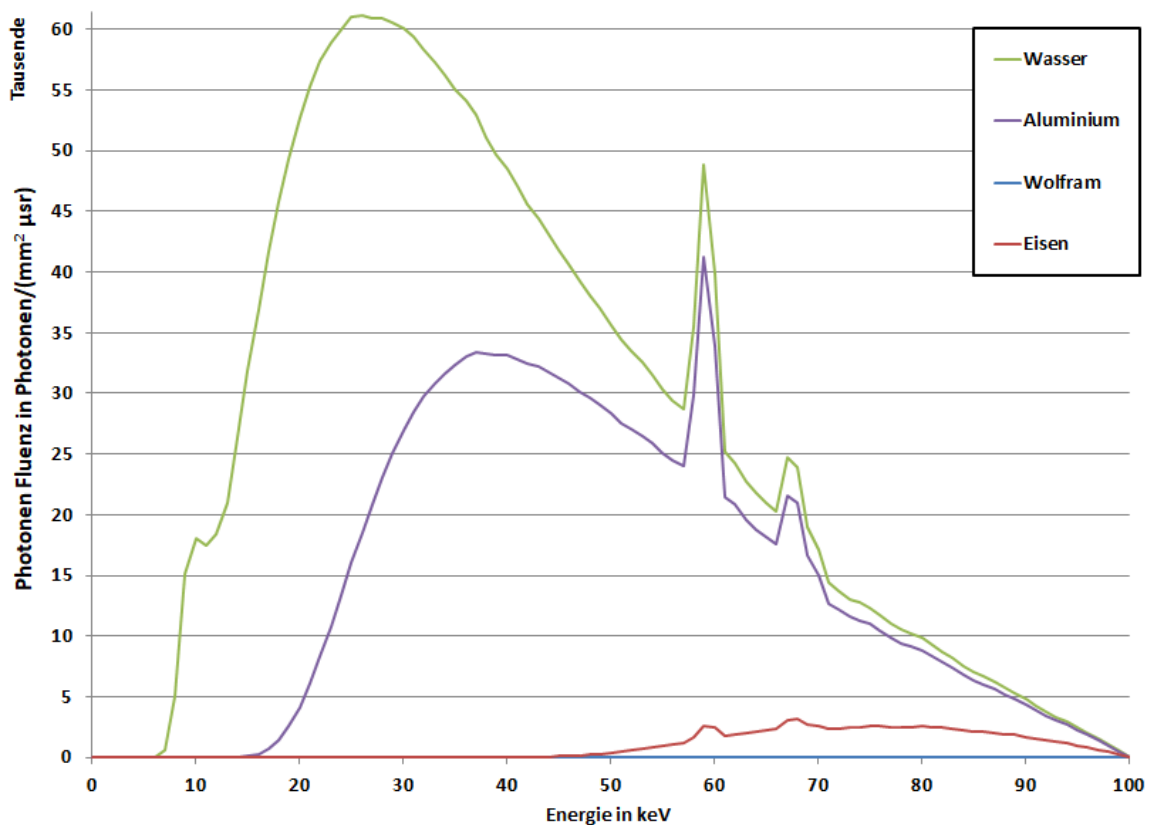


Abbildung 6.3.: Darstellung der mit verschiedenen Materialien gefilterten Röntgenspektren; Dicke der Filter = 3 mm, Röhrensorgung = 100 kV

Aus der Abbildung 6.3 ist erkennbar, dass die unterschiedlichen Materialien das Röntgenspektrum unterschiedlich stark abschwächen. Außerdem ist ersichtlich, dass ein Filter aus Wasser Röntgenstrahlung nicht so stark abschwächt wie ein Filter aus Metall. Aus dem Verlauf der Spektren mit Eisen- oder Wolframfilter ist zu erkennen, dass diese Filter die Röntgenstrahlung stark abschwächen.

6.2.4. Lineares Ende des Röntgenspektrums

Abschließend wird gezeigt, dass das Ende eines berechneten Röntgenspektrums ungefähr linear gegen „Null“ läuft und die X-Achse genau bei der Energie schneidet, die äquivalent zu der angelegten Röhrenspannung ist. Dazu werden ein gefiltertes und ein ungefiltertes Röntgenspektrum bei einer Röhrenspannung von 150 kV dargestellt. Außerdem sind die Stützpunkte aus den TASMICS Rohdaten in der Abbildung eingetragen. Das Ergebnis ist in der Abbildung 6.4 dargestellt.

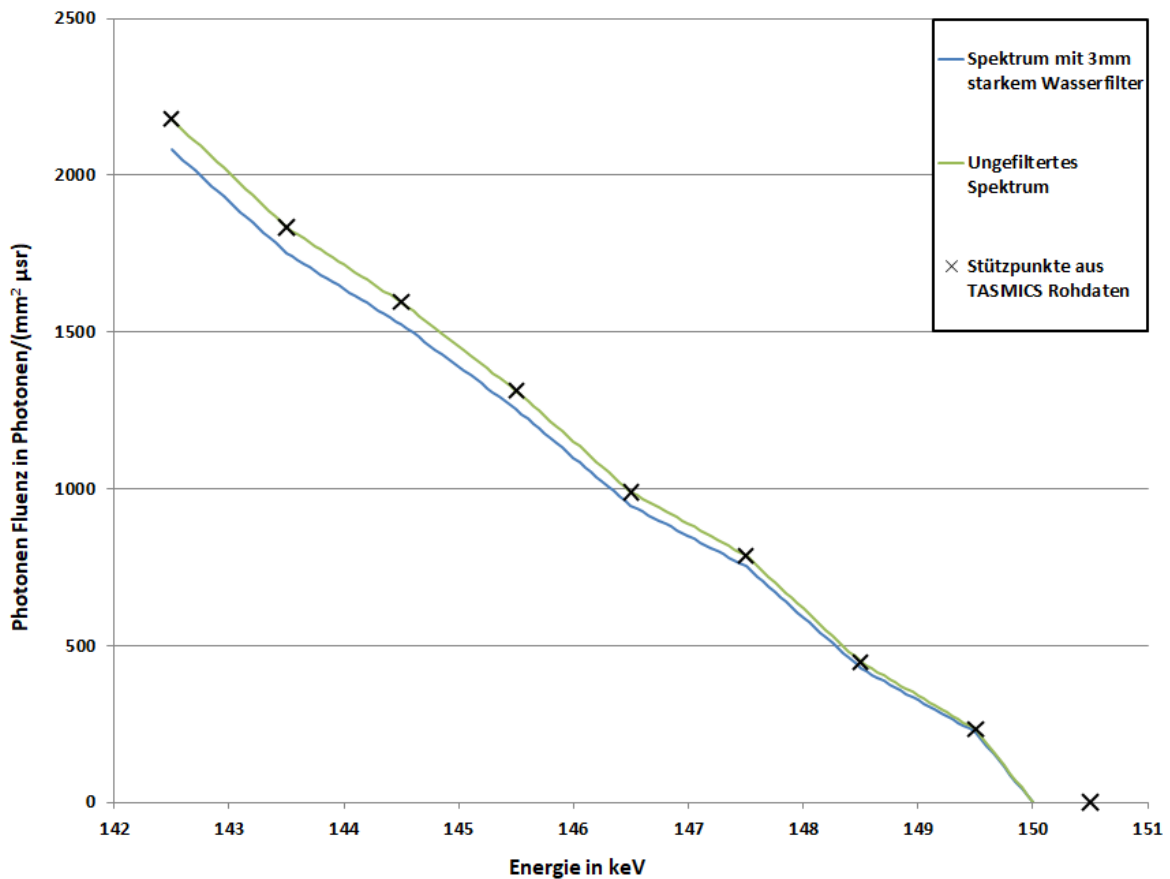


Abbildung 6.4.: Darstellung des linearen Endes eines gefilterten und eines ungefilterten Röntgenspektrums

Die Abbildung 6.4 zeigt, dass das Spektrum ungefähr linear auf den Wert „Null“ verläuft und die X-Achse genau bei der angelegten Röhrenspannung von 150 kV schneidet. Da der Spektrumsverlauf nicht exakt linear ist, liegt an den TASMICS Rohdaten. Aus dem Verlauf der Punkte aus den TASMICS Rohdaten ist erkennbar, dass diese nicht linear verlaufen. Lediglich zwischen den einzelnen Stützpunkten ist der Kurvenverlauf linear.

6.3. Vergleich mit anderen Simulationstools

In diesem Abschnitt werden die erzeugten Spektren aus der Software dieser Thesis mit bereits existierender Software verglichen. Bei den Vergleichen werden vor allem Spektren untersucht, die in der Medizintechnik häufig verwendet werden. Die Unterabschnitte 6.3.1 und 6.3.2 zeigen die Ergebnisse dieses Vergleichs. Die Excel-Datei *Vergleich_mit_anderen_Simulationstools.xlsx*, in der die Vergleiche angestellt wurden, ist im Anhang auf der CD im Ordner „Messergebnisse_und_Vergleiche“ zu finden.

6.3.1. Vergleich mit dem TASMICS Excel Sheet von John M. Boone

Zunächst wird zum Vergleich das Excel Sheet von John M. Boone herangezogen. Er ist der Autor des Röntgenspektrumssimulationsmodells TASMICS (siehe Unterabschnitt 2.7 des Kapitels Grundlagen), das als Grundlage dieser Thesis dient. Das Excel Sheet von John M. Boone ist im Anhang auf der CD im Ordner „Modelle“ hinterlegt.

Als erstes werden ungefilterte Röntgenspektren verglichen, deren Röhrenspannung im medizinischen Bereich häufig Anwendung findet. Das Ergebnis des Vergleichs der simulierten Spektren ist in der Tabelle 6.6 dargestellt.

Spannung in kV	Maximale Abweichung in $\frac{\text{Photonen}}{\text{mm}^2 \mu\text{s}}$	R^2 Maß	Steigung Regres- sionsgerade
25	$5,0900 \cdot 10^{-3}$	1,00	1,00
75	$4,8351 \cdot 10^{-4}$	1,00	1,00
100	$5,6392 \cdot 10^{-5}$	1,00	1,00
120	$2,8640 \cdot 10^{-5}$	1,00	1,00
150	$3,1455 \cdot 10^{-4}$	1,00	1,00

Tabelle 6.6.: Vergleich der ungefilterten Röntgenspektren zwischen dem TASMICS Excel Sheet und der in dieser Thesis vorgestellten Software zur Röntgenspektrensimulation

Der Vergleich der Spektren aus der Tabelle 6.6 zeigt, dass die ungefilterten Röntgenspektren fast identisch sind. Das Bestimmtheitsmaß (R^2) und die Steigung haben bei allen simulierten Spektren den Wert 1,00. Das zeigt die gute Übereinstimmung der Spektren. Grund dafür ist, dass sich beide Modelle auf dieselben Rohdaten des TASMICS Modells beziehen.

Die sehr geringen Unterschiede in den Werten sind durch das Verrechnen von Faktoren aus dem TASMICS Excel Sheet zu erklären.

Als nächstes werden die Absorptionskoeffizienten von den Materialien Aluminium (Au), Kupfer (Cu), Silber (Ag) und Titan (Ti) der beiden Modelle gegenübergestellt. In der Tabelle 6.7 ist das Ergebnis der Gegenüberstellung zu sehen.

Material	Maximale Abweichung in $\frac{1}{\text{mm}}$	ϕ Abweichung in %	R^2 Maß	Steigung Regres- sionsgerade
Al	-2,484	0,0638	1,0000	0,9944
Cu	6,150	0,0661	1,0000	1,0017
Ag	48,116	3,1645	0,9998	0,9994
Ti	-12,016	0,0042	0,9999	0,9971

Tabelle 6.7.: Gegenüberstellung von den Absorptionskoeffizienten des TASMICS Excel Sheets und der in dieser Thesen vorgestellten Software zur Röntgenspektrensimulation

Die durchschnittliche prozentuale Abweichung der Absorptionskoeffizienten, das Bestimmtheitsmaß und die Steigung aus der Tabelle 6.7 zeigen, dass die Absorptionskoeffizienten der beiden Modelle kaum einen Unterschied aufweisen. Auffällig ist, dass Silber mit Abstand die größte Abweichung ($48,116 \text{ mm}^{-1}$) und die größte durchschnittliche prozentuale Abweichung $3,1645\%$ hat. Die Messdaten in der Datei *Vergleich_mit_anderen_Simulationstools.xlsx* zeigen, dass beim Absorptionskoeffizienten des Materials Silber der Wert $48,116 \text{ mm}^{-1}$ einen absoluten Ausreißer darstellt, für den es keine Erklärung gibt.

Als letztes werden Röntgenspektren, die mit verschiedenen Filtermaterialien abgeschwächt wurden, gegenübergestellt. Jedes dieser Spektren wurde mit einer Röhrenspannung von 100 kV simuliert. Das Ergebnis ist in der Tabelle 6.8 dargestellt.

Material	Dicke in mm	Maximale Abweichung in $\frac{\text{Photonen}}{\text{mm}^2 \mu\text{sr}}$	ϕ Abweichung in % ¹	R^2 Maß	Steigung Regres- sionsgerade
Al	2	-43,6395	0,13	1,00	0,9994
Cu	3	-7,5731	-1,09	1,00	0,9973
Ag	1,5	-0,6181	0,31	1,00	0,9985
Ti	0,8	-24,9765	0,38	1,00	0,9996
Filterung durch 3 verschiedene Materialien					
Al	0,5				
Ag	0,5	62,3730	1,23	1,00	1,0020
Ti	0,5				

Tabelle 6.8.: Gegenüberstellung von gefilterten Röntgenspektren simuliert aus dem TASMICS Excel Sheet und der in dieser Thesis vorgestellten Software zur Röntgenspektrens simulation

Der Vergleich mit unterschiedlichen Materialien gefilterten Röntgenspektren in Tabelle 6.8 zeigt, dass die beiden Simulationen sehr ähnliche Ergebnisse liefern. Bei allen gefilterten Spektren, die untersucht wurden, sind sowohl das Bestimmtheitsmaß als auch die Steigung $\approx 1,00$. Diese beiden Daten deuten auf eine sehr gute Übereinstimmung der Spektren hin. Allerdings ist der Wert der maximalen Abweichung von der Simulation mit den drei Materialien mit $62,373 \text{ Photonen mm}^{-2} \mu\text{sr}^{-1}$ im Vergleich zu den anderen simulierten Spektren sehr hoch. Er stellt einen Ausreißer dar, der bei der Energie 25 keV auftritt. Das Material Silber weist genau bei dieser Energie die maximale Abweichung bei den Absorptionskoeffizienten auf (siehe Tabelle 6.7). Die geringen Unterschiede sind dadurch zu erklären, dass nicht mit den exakt gleichen Absorptionskoeffizienten gerechnet wurde.

6.3.2. Vergleich mit einem Simulationstool basierend auf Birch und Marshall

In diesem Abschnitt wird die in dieser Bachelorarbeit vorgestellte Software mit der Software SinarX verglichen, die auf dem Simulationsmodell von Birch und Marshall basiert. Dieses Modell wurde bereits im Unterabschnitt 2.9 des Kapitels Grundlagen vorgestellt.

Als erstes werden Röntgenspektren miteinander verglichen, die nicht durch Materialien gefiltert wurden. Die dabei verglichenen Spektren wurden mit den Röhrenspannungen 40 keV, 75 keV, 100 keV, 120 keV und 150 keV simuliert.

¹nach Ausreißern bereinigt, die durch unterschiedliche Zahlenformate bedingt sind

Exemplarisch wurden dazu die Röntgenspektren der beiden Softwares mit den Röhrensparnungen 75 keV und 100 keV dargestellt. Das Ergebnis ist in den Abbildungen 6.5 und 6.6 ersichtlich.

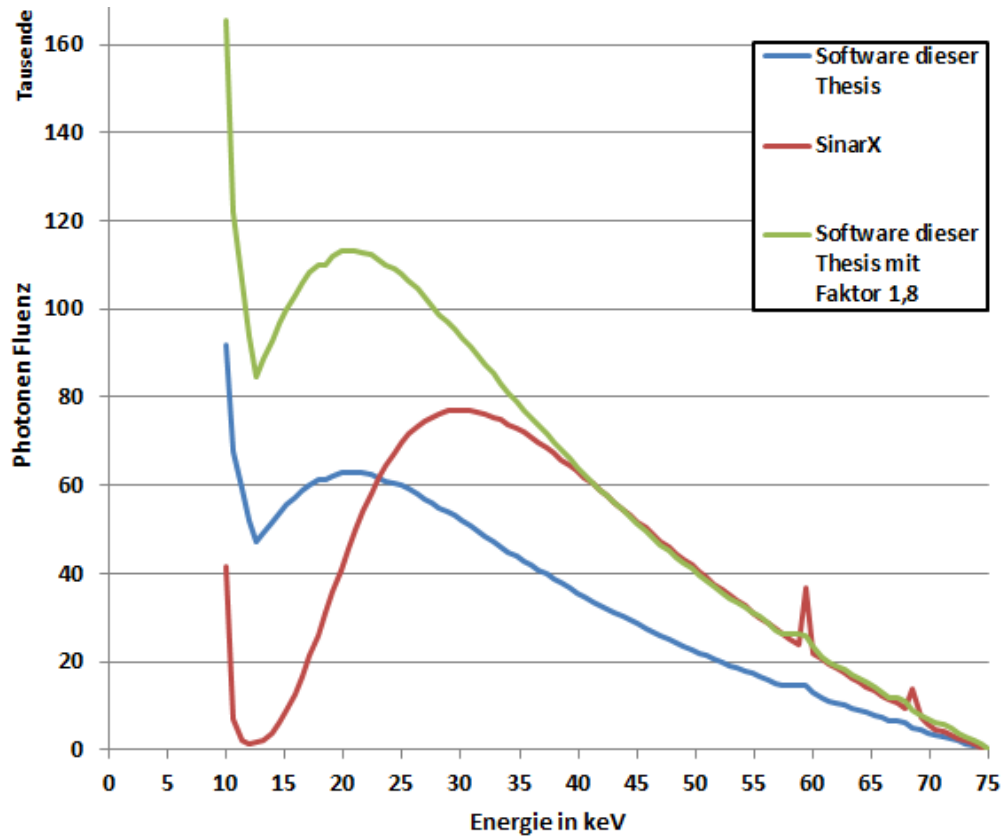


Abbildung 6.5.: Vergleich des ungefilterten 75 kV Spektrums zwischen der Software SinarX und der in dieser Thesis erzeugten Software

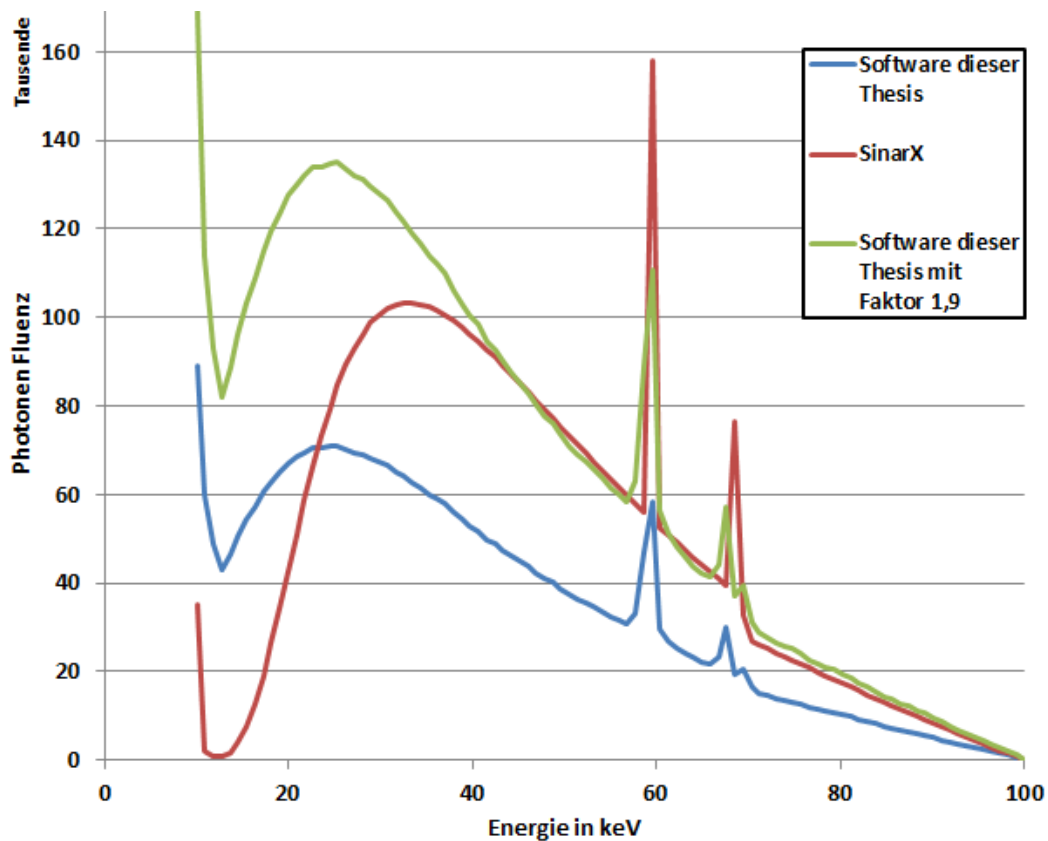


Abbildung 6.6.: Vergleich des ungefilterten 100 kV Spektrums zwischen der Software SinarX und der in dieser Thesis erzeugten Software

Aus den Abbildungen 6.5 und 6.6 wird ersichtlich, dass die Röntgenspektren der beiden Softwares sehr stark voneinander abweichen. Dabei fällt auf, dass die Piks der charakteristischen Strahlung der SinarX Software deutlich stärker ausgeprägt sind als die Piks der in dieser Thesis entwickelten Software. Außerdem ist erkennbar, dass die Spektren von SinarX bei höheren Energien auch eine größere Photonen Fluenz als die Spektren, der in dieser Thesis entwickelten Software, aufweisen. Hingegen sind bei geringeren Energien die Beiträge zum Spektrum der in dieser Thesis entwickelten Software größer. Mit einem Faktor kann der Verlauf der Röntgenspektren bei den höheren Energien angeglichen werden (siehe grüne Kurven).

Das gleiche Ergebnis zeigt sich bei gefilterten Röntgenspektren. In der Abbildung 6.7 ist ein mit 3 mm Kupfer gefiltertes Röntgenspektrum bei einer Röhrenspannung von 100 kV dargestellt.

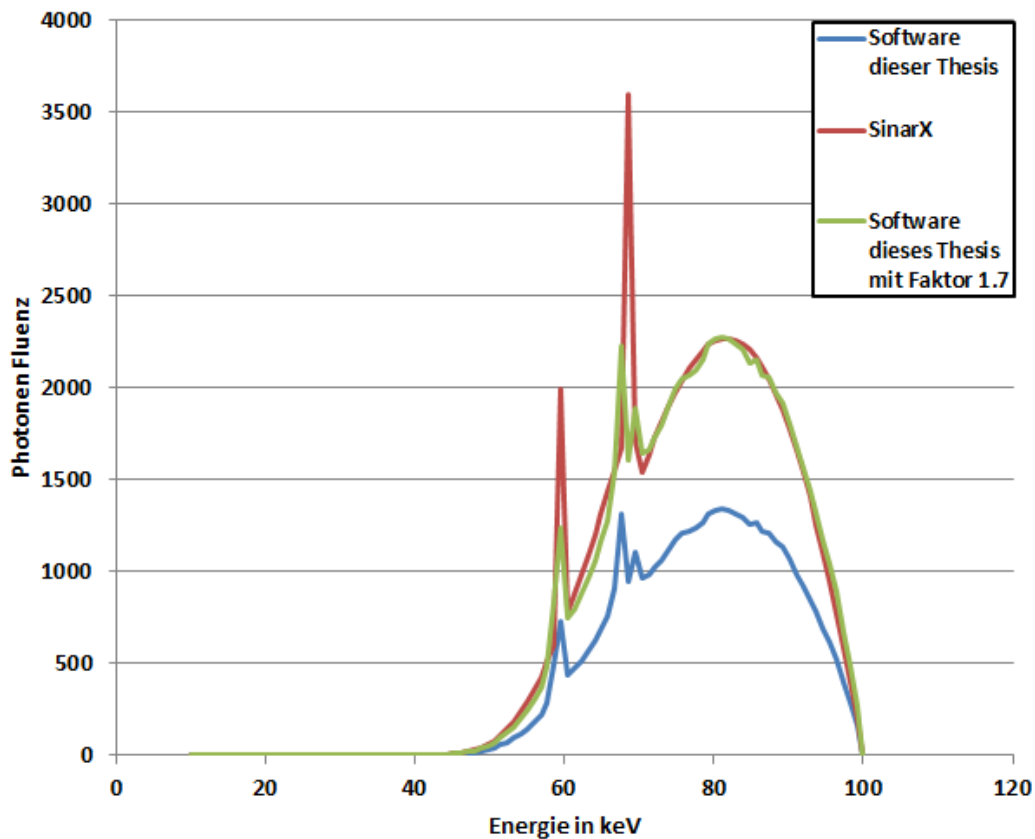


Abbildung 6.7.: Vergleich des mit 3 mm Kupfer gefilterten 100 kV Spektrums zwischen der Software SinarX und der in dieser Thesis erzeugten Software

Für diesen großen Unterschied zwischen den Spektren gibt es keine direkte Erklärung. Ein geringer Teil der Abweichungen kann durch die anlagebedingte Berylliumfilterung der TASMICS Rohdaten begründet werden. Ein weiterer Ansatz zur Erklärung ist, dass die TASMICS Spektren nicht auf das Strom-Zeit-Produkt bezogen sind. Auszuschließen ist eine durch die unterschiedlichen Modelle bedingte Abweichung. In dem Artikel des Medical Physics [7] werden Röntgenspektren mit verschiedenen Röhrensparnungen verglichen. Dabei zeigt sich, dass die Spektren der beiden Modelle gut übereinstimmen.

6.4. Test der Software CT-Simulation

In diesem Abschnitt wird die Software CT-Simulation mit der in dieser Thesis eingebauten Röntgenspektrenerzeugung getestet. Dazu werden die Tabellen von der alten Version, die die Software CT-Simulation ausgibt, mit denen der neuen Version verglichen.

Dabei werden die beiden Spalten (Mean [HU] und Standard deviation [HU]) der Tabelle (siehe Abbildung 2.21) der beiden Versionen gegenübergestellt. Es wird die beim Start der Software CT-Simulation ausgewählte Grundeinstellung verwendet. Verändert wird lediglich die Röhrenspannung. Diese wird nacheinander auf 80 kV, 100 kV, 120 kV und 140 kV eingestellt.

In der Tabelle 6.9 ist der Vergleich der beiden Versionen exemplarisch mit der Röhrenspannung von 100 kV dargestellt. Der Vergleich mit allen Spannungen ist in der Datei *Vergleich_CT-Simulation.xlsx* im Anhang auf der CD dargestellt.

Spannung in kV	ROI	Alte Version		Neue Version	
		Mean in HU	Standard deviation in HU	Mean in HU	Standard deviation in HU
100	1	1,176	27,261	1,229	36,300
	2	109,129	26,127	109,677	34,440
	3	138,560	25,726	139,377	34,065
	4	-57,248	23,699	-56,062	31,286
	5	953,945	29,866	951,841	39,738

Tabelle 6.9.: Gegenüberstellung der Ausgabe des Simulationstool CT-Simulation bei einer Röhrenspannung von 100 kV

Wie aus der Tabelle 6.9 ersichtlich ist, weist die Spalte Mean in HU keine großen Unterschiede auf. Die durchschnittliche Abweichung liegt bei 0,65 %. Hingegen ist die Abweichung in der Spalte Standard deviation in HU deutlich höher. Diese liegt im Durchschnitt bei 32,49 %. Grund dafür sind die Unterschiede zwischen den Spektren, die in Unterabschnitt 6.3.2 aufgezeigt wurden. Bei den übrigen Spannungen fällt der Vergleich ähnlich aus. Die Spalte Mean in HU weist auch bei den anderen Spannungen nur sehr geringe Unterschiede auf. Bei dem Vergleich der Spalte Standard deviation in HU zeigt sich, dass dort bei den anderen Spannungen Differenzen im Bereich von 32 % bis 38 % auftreten. Dabei ist zu beobachten, dass bei größer werdender Spannung auch die Abweichung leicht ansteigt.

7. Fazit

7.1. Zusammenfassung

Im Zuge dieser Bachelorarbeit wurden verschiedene Modelle zu Röntgenspektrensimulation mittels Nutzwertanalysen gegenübergestellt und gegeneinander abgewogen. Dabei diente das TASMICS Modell als Grundlage für die Röntgenspektrumssimulation, die in dieser Thesis verwendet wurde. Das TASMICS Modell ist ein relativ modernes und durch die Wissenschaft validiertes und akzeptiertes Modell zur Simulation von Röntgenspektren.

Es wurde eine Software entwickelt, die Röntgenspektren einer Wolframanode mit beliebigen Röhrenspannungen zwischen 20 kV und 640 kV simulieren kann. Diese Spektren können mit beliebig vielen verschiedenen Materialien gefiltert werden. Außerdem ist es möglich nur einen bestimmten Ausschnitt eines Röntgenspektrums durch das Festlegen der Anfangs- und Endenergie zu simulieren. Des Weiteren können die Spektren durch die Vorgabe der Energieschritte beliebig fein aufgelöst dargestellt werden. Die Spektren der in dieser Thesis entwickelten Software wurden mit den Spektren von zwei anderen Simulationstools verglichen. Der Vergleich mit dem TASMICS Excel Sheet ergab eine sehr hohe Übereinstimmung der getesteten Röntgenspektren. Bei dem auf der Theorie von Birch und Marshall basierenden Tool SinarX gab es dagegen nur eine sehr geringe Übereinstimmung der Röntgenspektren.

Außerdem wurde in dieser Bachelorthesis die entwickelte Software zur Röntgenspektrensimulation, in die bereits existierende Software CT-Simulation eingebaut. Dadurch ist es nun möglich, beliebige Röhrenspannungen im Bereich zwischen 20 kV und 640 kV für die Simulation zu nutzen.

7.2. Ausblick

Die entwickelte Software zur Röntgenspektrenerzeugung bietet noch Spielraum für Optimierungsmöglichkeiten. Durch das der Software zu Grunde liegende Modell TASMICS, sind die Röntgenspektren beschränkt. Mit der in dieser Thesis entwickelten Software gibt es nur die Möglichkeit Spektren einer Wolframanode zu simulieren. Es gibt es ähnliche Modelle wie TASMICS, die andere Anodenmaterialien Molybdän (MASMIC) und Rhodium (RASMICS) verwenden. Außerdem ist der Anodenwinkel mit 12° beim TASMICS Modell nicht veränderbar. Diese Anodenwinkel könnten mit einer zusätzlichen Filterung simuliert werden. In einer auf dieser Thesis aufsetzenden Arbeit könnten Spektren mit anderen Anodenmaterialien und der Möglichkeit mehrere Anodenwinkeln nutzen zu können, implementiert werden.

Außerdem ist offen geblieben, warum sich die Spektren der in dieser Thesis entwickelten Software und der Software SinarX so stark unterscheiden. Es könnten weitere Tests mit einem unabhängigen Simulationstool erfolgen, um so die Ursache für die hohen Abweichungen zu ermitteln.

Tabellenverzeichnis

2.1. Spektrum elektromagnetischer Wellen (erstellt mit Daten aus [10])	12
4.1. Nutzwertanalyse der Simulationsmodelle zur Röntgenspektrenerzeugung TASMICS und Birch und Marshall	39
4.2. Nutzwertanalyse der Simulationsmodelle zur Röntgenspektrenerzeugung TASMICS und TASMIP	40
6.1. Test des Auslesens der TASMICS Rohdaten	60
6.2. Test der Interpolation zwischen den Spektren der TASMICS Rohdaten	61
6.3. Testergebnisse des Auslesens der atomaren Masse von verschiedenen Ele- menten aus der Binärdatei <i>totalCrossSection.dat</i>	62
6.4. Testergebnisse der Interpolation des Wirkungsquerschnitts σ für Aluminium bei verschiedenen Energien	62
6.5. Testergebnisse der Berechnung des Absorptionskoeffizienten von Wasser . .	63
6.6. Vergleich der ungefilterten Röntgenspektren zwischen dem TASMICS Excel Sheet und der in dieser Thesis vorgestellten Software zur Röntgenspektrensi- mulation	68
6.7. Gegenüberstellung von den Absorptionskoeffizienten des TASMICS Excel Sheets und der in dieser Thesis vorgestellten Software zur Röntgenspektren- simulation	69
6.8. Gegenüberstellung von gefilterten Röntgenspektren simuliert aus dem TASMICS Excel Sheet und der in dieser Thesis vorgestellten Software zur Röntgenspektrensimulation	70
6.9. Gegenüberstellung der Ausgabe des Simulationstool CT-Simulation bei einer Röhrenspannung von 100 kV	74

Abbildungsverzeichnis

2.1. Schematische Darstellung einer Röntgenröhre mit Drehanode [4]	8
2.2. Schematischer Aufbau einer Röntgenröhre ¹	9
2.3. Darstellung des Zeitverlaufs einer sinusförmigen Welle (T : Schwingungsdauer, a : Auslenkung, a_0 : Amplitude) [10]	10
2.4. Schematische Darstellung einer kontinuierlichen elektromagnetischen Welle (links) und ein Wellenpaket (Quant oder Photon) mit variabler Wellenlänge (rechts)	11
2.5. Ionisation eines Hüllenelektron am Beispiel eines Kohlenstoffatoms	13
2.6. Entstehung von Bremsstrahlung durch Ablenkung und Abbremsung eines einfallenden Elektrons im elektrischen Feld eines Atomkerns (a) und bei direkter Kollision mit einem Atomkern (b). [4]	14
2.7. Entstehung von charakteristischer Strahlung durch Herauslösen eines Elektrons einer inneren Schale und wieder Auffüllen dieses Elektronenlochs durch Elektronen höherer Schalen [4]	15
2.8. Darstellung der verschiedenen Bindungsenergien für Wolfram [4]	16
2.9. Schematische Darstellung des Augereffekts ²	17
2.10. Schematische Darstellung eines Röntgenspektrums bestehend aus Bremspektrum und charakteristischen Linienspektrum [9]	18
2.11. Darstellung der Zusammensetzung des Gesamtabsorptionskoeffizienten und der Abhängigkeit der Abschwächung von Photonenenergie am Beispiel von Blei (erstellt mit Hilfe der Daten von [1])	20
2.12. Schematische Darstellung des Photoeffekts [4]	21
2.13. Schematische Darstellung der Compton-Streuung [4]	23
2.14. Schematische Darstellung der Rayleigh-Streuung [4]	24
2.15. Darstellung des Raumwinkels ³	25
2.16. Darstellung der Neutronenbewegung in einer Wand [13]	26
2.17. Zweidimensionale Darstellung des Aufbaus, der in der Monte-Carlo-Simulation für die Modellierung der Röntgenröhre genutzt wurde [7]	28
2.18. Beispieldatensätze mit unterschiedlichem R^2 -Wert [12]	31
2.19. Aktivitätsdiagramm des Workflows der Simulation von CT-Bildern	32
2.20. Screenshot des Startbildes der Software CT-Simulation	33
2.21. Screenshot des Simulationsergebnisses der Software CT-Simulation	34

4.1.	Darstellung des Auslesens und Speicherns der TASMICS Rohdaten in Form eines Aktivitätsdiagramms	42
4.2.	Aktivitätsdiagramm für die grobe Darstellung der Interpolation zwischen den diskreten Röntgenspektren aus den TASMICS Rohdaten	43
4.3.	Aktivitätsdiagramm für das Auslesen und Abspeichern der Informationen aus der Binärdatei für ein Element	44
4.4.	Aktivitätsdiagramm der Log-Log Interpolation des Klasse cElement	45
4.5.	Aktivitätsdiagramm der Berechnung des Absorptionskoeffizienten der verschiedenen Materialien	46
4.6.	Darstellung des groben Ablaufs des Programms zur Röntgenspektrenerzeugung	47
4.7.	Darstellung der Röhrenspannungsauswahl der Ausgangsversion der Software CT-Simulation	48
5.1.	Schematische Darstellung der biliniaren Interpolation; x_1, x_2 stellen zwei nebeneinander liegende Spannungswerte, y_1, y_2 stellen zwei benachbarte Energiewerte und $q_{11}, q_{12}, q_{21}, q_{22}$ die jeweiligen Stützwerte zu den Spannungs- und Energiewerten aus den TASMICS Rohdaten dar; P ist der zu interpolierende Punkt mit den Koordinaten x, y	51
5.2.	Darstellung der verschiedenen Fälle, in der der zu interpolierende Punkt P im Grenzbereich liegen kann	53
5.3.	Darstellung der Röhrenspannungsauswahl in der GUI mit Texteingabefeld . .	56
6.1.	Darstellung von ungefilterten Röntgenspektren mit unterschiedlichen Röhrenspannungen	64
6.2.	Darstellung von Röntgenspektren mit Aluminiumfilterung unterschiedlicher Dicke bei einer Röhrenspannung von 100 kV	65
6.3.	Darstellung der mit verschiedenen Materialien gefilterten Röntgenspektren; Dicke der Filter = 3 mm, Röhrenspannung = 100 kV	66
6.4.	Darstellung des linearen Endes eines gefilterten und eines ungefilterten Röntgenspektrums	67
6.5.	Vergleich des ungefilterten 75 kV Spektrums zwischen der Software SinarX und der in dieser Thesis erzeugten Software	71
6.6.	Vergleich des ungefilterten 100 kV Spektrums zwischen der Software SinarX und der in dieser Thesis erzeugten Software	72
6.7.	Vergleich des mit 3 mm Kupfer gefilterten 100 kV Spektrums zwischen der Software SinarX und der in dieser Thesis erzeugten Software	73
A.1.	Auswahl der zu installierenden Packages (Markierung grün)	83

Literaturverzeichnis

- [1] M. Berger, J. Hubbell, S. Seltzer, J. Chang, J. Coursey, R. Sukumar, D. Zucker, and K. Olsen. Xcom: Photon cross sections database, 2018. URL <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html>. zuletzt aufgerufen am 27.03.2018.
- [2] R. Birch and M. Marshall. Computation of bremsstrahlung x-ray spectra and comparison with spectra measured with a ge(li) detector. *Physics in Medicine and Biology*, 24(3): 1–14, Januar 1979.
- [3] J. M. Boone and J. A. Seibert. An accurate method for computer-generating tungsten anode x-ray spectra from 30 to 140 kv. *Medical Physics*, 24(11):1661–70, November 1997.
- [4] O. Dössel and T. M. Buzug. *Biomedizinische Technik - Medizinische Bildgebung*. Ute Morgenstern and Marc Kraft, 7 edition, 2014.
- [5] A. Figueroa. Development of a graphical user interface for x-ray simulation of computed tomography images. Master's thesis, Hochschule für angewandte Wissenschaften Hamburg, 2017.
- [6] E. Hering, R. Martin, and M. Stohrer. *Physik für Ingenieure*. Springer Verlag, 11 edition, 2012.
- [7] A. M. Hernandez and J. M. Boone. Tungsten anode spectral model using interpolating cubic splines: Unfiltered x-ray spectra from 20kv to 640kv. *Medical Physics*, 41(4):1–15, 2014.
- [8] R. Heß. Unterlagen aus dem kurs (ie/hss) x-rays without x-ray ws17. Unveröffentlichte Unterlagen, 2017.
- [9] J. Krämer. Röntgenstrahlung. Technical report, Technische Universität Dresden, Physikalisches Grundpraktikum, 2013.
- [10] H. Krieger. *Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes*. Springer Verlag, 5 edition, 2017.
- [11] H. Krieger. *Strahlungsquellen für Technik und Medizin*. Springer Verlag, 3 edition, 2018.

-
- [12] H.-J. Mittag. *Statistik*. Springer Verlag, 2012.
- [13] T. Müller-Gronbach, E. Novak, and K. Ritter. *Monte Carlo-Algorithmen*. Springer Verlag, 2012.
- [14] H. Nahrstedt. *Die Monte-Carlo-Methode - Beispiele unter Excel VBA*. Springer Verlag, 2015.
- [15] Spektrum. Auger-effekt, 2018. URL <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/auger-effekt/984>. zuletzt aufgerufen am 29.03.2018.

A. Anhang

A.1. CD-Struktur

Der Anhang der Arbeit befindet sich auf CD und ist bei Prof. Dr. Robert Heß oder Prof. Dr. Heike Neumann einzusehen.

Die CD ist wie folgt strukturiert:

- PDF-Datei „Bachelor_Thesis_Nils_Mosch“
- Ordner „Modelle“:
 - TASMICS_v1.4.xlsx
 - Ordner „Spektr_Code“
 - Ordner „Spektr_Documentation“
- Ordner „Quellcode“:
 - Ordner „Software_Roentgenspektrensimation“
 - Ordner „CTSimulation“
- Ordner „Rohdaten“:
 - TASMICS_Rohdaten.csv
 - totalCrossSection.dat
- Ordner „Messergebnisse_und_Vergleiche“
 - Vergleich_mit_anderen_Simulationstools.xlsx
 - Darstellung_der_Ergebnisse.xlsx
- PNG-Datei „Klassendiagramm_Roentgenspektrensimation“

A.2. Ausführung des Programms

Um das Programm ausführen zu können, müssen verschiedene Programme installiert und Einstellungen in den Programmen getroffen werden. Diese werden in den nachfolgenden Unterabschnitten näher beschrieben.

A.2.1. Benötigte Software

Die für die Ausführung benötigte Software wird hier aufgeführt:

1. Herunterladen des Programm Eclipse Oxygen Packages - Eclipse IDE for C/C++ Developers mit anschließender Installation (im Hauptverzeichnis)
 - Link: <https://www.eclipse.org/downloads/packages/eclipse-ide-cc-developers/oxygen3a> aufgerufen am 28.05.2018
2. Herunterladen des Programms MinGW Version 6.3.0-1 mit anschließender Installation (im Hauptverzeichnis)
 - Link: <https://sourceforge.net/projects/mingw/files/> aufgerufen am 21.06.2018
 - Installation der Packages unter „Basic Setup“ siehe Abbildung A.1:

Package	Class	Installed Version	Repository Version	Description
<input checked="" type="checkbox"/> mingw-developer-tool	bin	2013072300	2013072300	An MSYS Installation for MinGW Developers (meta)
<input checked="" type="checkbox"/> mingw32-base	bin	2013072200	2013072200	A Basic MinGW Installation
<input type="checkbox"/> mingw32-gcc-ada	bin		6.3.0-1	The GNU Ada Compiler
<input type="checkbox"/> mingw32-gcc-fortran	bin		6.3.0-1	The GNU FORTRAN Compiler
<input checked="" type="checkbox"/> mingw32-gcc-g++	bin	6.3.0-1	6.3.0-1	The GNU C++ Compiler
<input type="checkbox"/> mingw32-gcc-objc	bin		6.3.0-1	The GNU Objective-C Compiler
<input checked="" type="checkbox"/> msys-base	bin	2013072300	2013072300	A Basic MSYS Installation (meta)

Abbildung A.1.: Auswahl der zu installierenden Packages (Markierung grün)

3. Java muss installiert sein

A.3. Erweiterte Einstellungen

In diesem Unterabschnitt werden erweiterte Einstellungen beschrieben, die durchgeführt werden müssen, damit die Software CT-Simulation ausgeführt werden kann.

1. Unter „Systemeigenschaften“ → „Umgebungsvariablen“ → „Path“ den Dateipfad des „bin“-Ordners (im Hauptverzeichnis) von MinGW angeben (z.B. „C:\MinGW\bin“)

2. wxWidgets mit MinGW kompilieren

- a) nach der Anleitung https://wiki.wxwidgets.org/Compiling_wxWidgets_with_MinGW kompilieren aufgerufen am 31.05.2018
- b) Erneut Kompilierung durchführen mit „SHARED = 0“
- c) Erneut Kompilierung durchführen mit „BUILD = debug“, sowohl mit „SHARED = 1“ als auch mit „SHARED = 0“

3. Einstellung in Eclipse Oxygen vornehmen

- a) Ein leeres C++ Projekt mit GCC MinGW Kompiler anlegen (mit debug und release)
- b) „Rechtsklick“ auf das Projekt → „Import“ → „General“ → „File system“ → „Next Button“ → „Browse... Button“ → Ordner des Quellcodes „src“ auswählen → „Into Folder“ → „CTSimulation\src“
- c) „Rechtsklick“ auf das Projekt → „Properties“
 - i. → „C/C++ Build“
 - A. → „Environment“ → „Neue Variable“ anlegen: „WXWIDGETS_HOME“ → in „Values“ Dateipfad angeben in dem wxWidgets gespeichert ist
 - B. → „Settings“
 - → „GCC C Compiler“ → „include“ → „include Path“ :
\${WXWIDGETS_HOME}\include → noch einmal „include“ → „include Path“: \$WXWIDGETS_HOME\lib\gcc_dll\mswud
 - → „MinGW C++ Linker“ → „Library search path (-L)“:
\${WXWIDGETS_HOME}\lib\gcc_dll → alle Bibliotheken aus dem Ordner „gcc_dll“ in „Libraries“ als Text kopieren (ohne „lib“ am Anfang und ohne „a“ am Ende)

Versicherung über die Selbstständigkeit

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit im Sinne der Prüfungsordnung nach §16(5) APSO-TI-BM ohne fremde Hilfe selbstständig verfasst und nur die angegebenen Hilfsmittel benutzt habe. Wörtlich oder dem Sinn nach aus anderen Werken entnommene Stellen habe ich unter Angabe der Quellen kenntlich gemacht.

Hamburg, 24. September 2018

Ort, Datum

Unterschrift