

Untersuchungen zu einer iterativen CT-Rekonstruktion in der gitterbasierten Röntgenbildgebung

Masterarbeit aus der Physik

Vorgelegt von
Andreas Wolf
13. April 2016

Erlangen Centre for Astroparticle Physics
Physikalisches Institut IV
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg



Betreuerin: Prof. Dr. Gisela Anton

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	5
2 Theoretische Grundlagen	7
2.1 Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie	7
2.2 Röntgenbildgebung	10
2.3 Gitterbasierte Röntgenbildgebung	12
2.3.1 Talbot-Effekt	12
2.3.2 Talbot(-Lau)-Interferometer	14
2.3.3 Bildmodalitäten	15
2.4 Computertomographie	17
2.4.1 Radontransformation	18
2.4.2 Fourier-Slice-Theorem	20
2.4.3 Gefilterte Rückprojektion	22
2.4.4 Iterative Rekonstruktionsmethoden	24
3 Methoden	27
3.1 Simultane iterative Rekonstruktionsmethode	27
3.1.1 Likelihood-Funktion	27
3.1.2 Optimierung	29
3.2 Simulationsumgebung cxi	32
4 Untersuchungen und Ergebnisse	35
4.1 Projektoren für die Rekonstruktion	35
4.1.1 Methode nach Siddon	36
4.1.2 Distance-driven Projektor	39
4.1.3 Projektoren auf Basis von Blobs	41
4.2 Evaluation des Rekonstruktionsalgorithmus	47
4.2.1 Simulierte Daten	48
4.2.2 Numerisches Phantom	56
4.2.3 Messdaten	59
4.3 Verbesserungen des Rekonstruktionsalgorithmus	67
4.3.1 Wahl von Startwerten für die SIR	67
4.3.2 Regularisierung	70
4.4 Erweiterung der Modellgebung – Kantensignale	73
4.4.1 Kantensignale in der Simulation	74
4.4.2 Betrachtungen zum Einfluss der zweiten Ordnung des Phasenschubs	76
4.4.3 Komplexer Dunkelfeldkontrast	80

Inhaltsverzeichnis

5 Zusammenfassung und Ausblick	87
Literaturverzeichnis	91

1 Einleitung

Seit ihrer Entdeckung durch Wilhelm Conrad Röntgen (1898) vor über 100 Jahren hat sich die Verwendung von Röntgenstrahlung in der medizinischen Diagnostik und der zerstörungsfreien Materialprüfung zu einem etablierten Verfahren entwickelt. Dank ihrer Eigenschaft, Objekte zu durchdringen, die für sichtbares Licht undurchsichtig sind, ermöglicht es die Röntgenstrahlung, Informationen über die innere Struktur dieser Objekte zu erlangen. Mit der Einführung der Computertomographie durch Godfrey Newbold Hounsfield (1973) wurde es möglich, diese inneren Strukturen quantitativ zu rekonstruieren und in Form von Schnittbildern graphisch darzustellen.

Den notwendigen Kontrast liefert in der konventionellen Röntgenbildgebung die Abschwächung der Röntgenstrahlung durch ihre Wechselwirkung mit der durchstrahlten Materie. Röntgenstrahlung wird dabei jedoch nicht nur absorbiert, sie erfährt auch eine Änderung ihrer Phase. Die Messung des von einem Objekt erzeugten Phasenschubs stellt einen neuen Kontrastmechanismus für die Bildgebung zur Verfügung mit dem weitere Information über die innere Struktur des Objekts gewonnen werden kann. In der optischen Bildgebung ermöglicht die von Frits Zernike (1935) begründete Phasenkontrastmikroskopie so zum Beispiel die Abbildung von Strukturen, die mit einem Hellfeldmikroskop nur nach Anfärbung sichtbar wären.

In der Phasenkontrastbildgebung müssen die Phasenunterschiede in messbare Variationen der Strahlungsintensität umgewandelt werden. Im Fall von Röntgenstrahlung sind dazu komplexe Aufbauten erforderlich. Die in dieser Arbeit thematisierte Messmethode ist die gitterbasierte Röntgenbildgebung mit einem Talbot(-Lau)-Interferometer (Momose et al., 2003; Pfeiffer et al., 2006). Die Übersetzung der Phasenänderungen in Intensitätsunterschiede geschieht hierbei durch den Einsatz mehrerer Gitter. Weitkamp et al. (2005) präsentierten tomographische Rekonstruktionen aus Absorptions- und Phasenkontrast durch Einsatz der Phasestepping-Technik an einem solchen Gitterinterferometer.

Ein hochaktuelles Forschungsthema im Bereich der Röntgenbildgebung sind iterative tomographische Rekonstruktionsverfahren (Kalender, 2000). In den letzten Jahren haben derartige Methoden auch in der Phasenkontrastbildgebung Einzug gehalten (Li et al., 2011; Köhler et al., 2011; Hahn, 2014). Die Hauptanliegen bei der Verwendung dieser Verfahren anstelle der etablierten analytischen Methoden wie der gefilterten Rückprojektion sind eine Verringerung der applizierten Strahlendosis bei gleichbleibender Bildqualität sowie die Reduzierung von Bildartefakten. Die meisten dieser Verfahren benötigen zur CT-Rekonstruktion die Werte der Projektion von Abschwächung bzw. Phase. Über eine sogenannte Phasenrekonstruktion müssen diese zunächst aus den gemessenen Intensitätswerten bestimmt werden. Bei der Phasestepping-Technik sind dafür für jeden Projektionswinkel mehrere Aufnahmen bei verschiedenen Gitterpositionen erforderlich. Der Messvorgang ist dadurch langsam und bedarf einer präzisen Ausrichtung der Gitter. Zudem muss die Modellierung des Rauschens von den gemes-

senen Intensitäten auf die durch die Phasenrekonstruktion extrahierten Parameter übertragen werden, siehe Weber et al. (2011).

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die von Ritter et al. (2013) vorgeschlagene iterative CT-Rekonstruktion mittels Likelihood-Maximierung. Die Methode operiert auf der Ebene der gemessenen Intensitätswerte und vermeidet dadurch eine zwischenzeitliche Phasenrekonstruktion.

Kapitel 2 bildet eine Einführung in die physikalischen Grundlagen der gitterbasierten Röntgenbildgebung sowie der Computertomographie. In Kapitel 3 wird das Rekonstruktionsverfahren vorgestellt. Die verwendete Likelihood-Funktion und die iterative Methode zu ihrer Maximierung werden motiviert. Ebenso wird das Vorwärtsmodell zur Modellierung des Messvorgangs besprochen. Das Kapitel schließt mit einem kurzen Einblick in die Wellenfeldsimulation für die Talbot-Lau-Röntgenbildgebung. Die Untersuchungen und Ergebnisse dieser Arbeit sind in Kapitel 4 aufgeführt. In Abschnitt 4.1 werden verschiedene Projektoren zur Modellierung des Messvorgangs präsentiert. In Abschnitt 4.2 wird die vorgestellte Rekonstruktionsmethode evaluiert. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf dem Konvergenzverhalten und der Bildqualität. Die Ergebnisse werden mit Resultaten aus der gefilterten Rückprojektion verglichen. Das Rekonstruktionsverfahren wird auf drei verschiedene Aufnahmeschemata mit jeweils einer Aufnahme pro Projektionswinkel angewendet. Abschnitt 4.3 betrachtet zwei potenzielle Mittel, die Konvergenz der Methode zu beschleunigen sowie die erzielte Bildqualität zu verbessern. Das Kapitel endet mit der Untersuchung des Einflusses von Objektkanten in Abschnitt 4.4. Hier wird die Möglichkeit demonstriert, Korrelationen zwischen den verschiedenen Kontrastmechanismen in der Rekonstruktionsmethode zu berücksichtigen. Kapitel 5 fasst die Ergebnisse der Arbeit kurz zusammen und gibt einen Ausblick auf zukünftige Untersuchungen.

2 Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel gibt einen Überblick über die physikalischen Grundlagen und Konzepte dieser Arbeit. Zunächst soll betrachtet werden, welche Prozesse für die Wechselwirkung zwischen Röntgenstrahlung und Materie von Bedeutung sind, wie diese mit den Mitteln der klassischen Elektrodynamik beschrieben werden können und wie diese Kenntnisse ein bildgebendes Verfahren fundieren. Der folgende Abschnitt liefert eine Einführung in die gitterbasierte interferometrische Röntgenbildgebung. Abschließend werden die Grundlagen der Computertomographie behandelt.

2.1 Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie

Röntgenstrahlung bezeichnet elektromagnetische Wellen, die energetisch im Bereich zwischen Größenordnungen 10^0 keV und 10^2 keV liegen (Als-Nielsen & McMorrow, 2001). Die wichtigsten Wechselwirkungsprozesse in diesem Energiebereich bilden der Photoeffekt, der Comptoneffekt – häufig auch als inelastische Streuung bezeichnet – sowie elastische Streuung. Während die ersten beiden Prozesse nur quantenmechanisch beschrieben werden können, kann elastische Streuung im klassischen Wellenbild behandelt werden. Dabei regt die Röntgenstrahlung Elektronen zum Schwingen an, welche dadurch ihrerseits Strahlung der gleichen Wellenlänge emittieren. Für den Fall der sogenannten Thomson-Streuung – die Elektronen sind hier quasi frei – kommt es dabei zu einem Phasenunterschied von π zwischen einfallender und emittierter Welle (Als-Nielsen & McMorrow, 2001). Das gleiche Ergebnis liefert die klassische Beschreibung der Elektronen durch Lorentzoszillatoren für den Fall, dass die einfallende Strahlung eine deutlich größere Frequenz aufweist als die Resonanz des Oszillators. Auf makroskopischer Ebene führt diese Tatsache, nach Überlagerung der ursprünglichen einfallenden Welle mit allen Streubeiträgen, zu einer im Vergleich zum Vakuum veränderten Phasengeschwindigkeit und damit zu Brechung (Als-Nielsen & McMorrow, 2001). In einer quantenmechanischen Beschreibung ist das elektromagnetische Feld in Photonen quantisiert. Beim Photoeffekt wird eines dieser Photonen von einem Atom absorbiert. Dabei gibt es seine Energie an ein Hüllenelektron ab und das Atom wird ionisiert. Beim Comptoneffekt hingegen überträgt das Photon nur einen vom Streuwinkel abhängigen Teil seiner Energie auf das Elektron. Gegenüber dem Photoeffekt wird der Comptoneffekt für höhere Photonenenergien und kleinere Kernladungszahlen dominant (Buzug, 2008). Beide Prozesse führen zu einer Abschwächung der Röntgenstrahlung bei Durchgang durch Materie. Klassisch wird Röntgenstrahlung, wie jede Art elektromagnetischer Strahlung, durch die Maxwell-Gleichungen beschrieben. Im Vakuum führen diese zur Wellengleichung

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.1)$$

mit c der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. Es zeigt sich, dass hierbei eine komplexe skalare Wellenfunktion Ψ ausreicht, um das elektromagnetische Feld an jedem Punkt $\mathbf{r} = (x, y, z)$ im dreidimensionalen euklidischen Raum und zu jeder Zeit t zu beschreiben (Paganin, 2006). Zerlegt man Ψ in seine spektralen Komponenten, das heißt

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi_\omega(\mathbf{r}) \exp[-i\omega t] d\omega, \quad (2.2)$$

so erhält man aus Gleichung 2.1 die sogenannte Helmholtzgleichung

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi_\omega(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.3)$$

für jede einzelne spektrale Komponente Ψ_ω , wobei für die Wellenzahl $k = \omega/c$ gilt mit ω der Kreisfrequenz (Paganin, 2006).

In Anwesenheit von Materie gelten die obigen Gleichungen im Allgemeinen nicht mehr, da hier die einzelnen Komponenten des elektrischen und des magnetischen Feldes über die Maxwell-Gleichungen miteinander gekoppelt sind. Bei verschwindender Ladungs- und Stromdichte sowie unter der Annahme sowohl statischer als auch räumlich nur langsam variierender Permittivität und Permeabilität, entkoppeln die einzelnen Feldkomponenten und die physikalische Beschreibung erfolgt wiederum durch ein komplexes skalares Feld (Paganin, 2006). Für die spektralen Komponenten dieses Feldes lässt sich dann eine inhomogene Helmholtzgleichung

$$(\nabla^2 + k^2 n_\omega^2(\mathbf{r})) \Psi_\omega(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.4)$$

aufstellen. Die oben angesprochenen Effekte der Abschwächung und der Brechung durch die Änderung der Phasengeschwindigkeit sind dabei im komplexen Brechungsindex n_ω kodiert. Im Fall von Röntgenstrahlung ist für den Brechungsindex die Schreibweise

$$n_\omega = 1 - \delta_\omega + i\beta_\omega \quad (2.5)$$

mit δ_ω dem Dekrement des Brechungsindex und β_ω dem Extinktionskoeffizienten üblich. Der Index ω verdeutlicht die Frequenzabhängigkeit der jeweiligen physikalischen Größe. Im Wissen, dass sich die allgemeine Lösung der Wellengleichung über Gleichung 2.2 als Linearkombination von monochromatischen Lösungen schreiben lässt, wird in den folgenden Ausführungen stets nur eine spektrale Komponente betrachtet. Der Index ω wird hierbei zugunsten einer einfacheren Notation nicht mehr mit aufgeführt.

Zur Lösung von Gleichung 2.4 sei zunächst der einfache Fall eines homogenen Mediums – es gilt $n(\mathbf{r}) = n$ – betrachtet. Hier genügt der Ansatz einer einfachen, sich in positive z-Richtung ausbreitenden, ebenen Welle

$$\begin{aligned} \Psi(z) &= \Psi_0 \exp[in k_z z] \\ &= \Psi_0 \exp[i k_z z] \exp[-i\delta k_z z] \exp[-\beta k_z z] \end{aligned} \quad (2.6)$$

mit Amplitude Ψ_0 und z -Komponente k_z des Wellenvektors. Letzterer gibt allgemein die Ausbreitungsrichtung einer ebenen Welle an. Sein Betrag entspricht der Wellenzahl k . Experimentell lässt sich lediglich die Intensität I dieser Welle messen. Sie ist durch das Betragsquadrat

$$I(z) = |\Psi(z)|^2 = |\Psi_0|^2 \exp[-2\beta k_z z] = I_0 \exp[-2\beta k_z z] \quad (2.7)$$

gegeben. Nach Einführung des Absorptionskoeffizienten zu $\mu = 2\beta k_z$ folgt daraus das Lambert-Beersche Schwächungsgesetz (Buzug, 2008)

$$I(z) = I_0 \exp [-\mu z] . \quad (2.8)$$

Der Absorptionskoeffizient kann wiederum durch die Wirkungsquerschnitte σ der möglichen Wechselwirkungsprozesse ausgedrückt werden (Bethge et al., 2013). Für den hier betrachteten Fall der Röntgenstrahlung gilt näherungsweise

$$\mu = \frac{N_A \rho}{A} (\sigma_{\text{Photo}} + \sigma_{\text{Compton}}) \quad (2.9)$$

mit N_A der Avogadro-Zahl, ρ der Dichte und A der molaren Masse des jeweiligen Mediums. Für inhomogene Medien muss die komplette räumliche Verteilung des komplexen Brechungsin dex betrachtet werden. Hier kann Gleichung 2.4 näherungsweise über die sogenannte Projektionsnäherung (Paganin, 2006) gelöst werden. Diese, speziell für hinreichend dünne Objekte geeignete Methode, basiert auf der Annahme, dass sich das Objekt zwischen $z = 0$ und $z = \Delta$ befindet, also nur dort der Fall $n \neq 1$ vorliegt. Es sei zudem die Lösung $\Psi_0 = \Psi(x, y, z = 0)$ auf der Eintrittsfläche $z = 0$ bekannt. Auf der Austrittsfläche gilt dann bei Propagation entlang der z-Achse

$$\Psi(x, y, z = \Delta) = \Psi_0 \exp [ik_z \Delta] \exp \left[-ik_z \int_0^\Delta \delta(\mathbf{r}) - i\beta(\mathbf{r}) dz \right] . \quad (2.10)$$

Im Lambert-Beerschen Schwächungsgesetz führt dies im Exponenten zu einem Linienintegral über den Absorptionskoeffizienten

$$I(x, y, z = \Delta) = |\Psi_0|^2 \exp \left[- \int_0^\Delta \mu(\mathbf{r}) dz \right] . \quad (2.11)$$

Ein analoges Linienintegral über δ liefert den sogenannten Phasenschub

$$\Delta\varphi(x, y, z = \Delta) = -k_z \int_0^\Delta \delta(\mathbf{r}) dz \quad (2.12)$$

der Welle im Vergleich zur Propagation im Vakuum. Variiert $\Delta\varphi$ senkrecht zur Ausbreitungsrichtung, beispielsweise entlang der x-Achse, so erfährt die Wellenfront eine Brechung um den Winkel α . Letzterer ergibt sich zu (Hahn, 2014)

$$\tan(\alpha) = \frac{1}{k_z} \frac{\partial\varphi}{\partial x} . \quad (2.13)$$

Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 2.1 veranschaulicht und erklärt. Vergleicht man die phänomenologische Beschreibung der Phasengeschwindigkeit in Materie durch den Brechungsin dex mit der zu Anfang dieses Abschnitts skizzierten Argumentation, dass sich diese aus der Phasenlage von Streubeiträgen ergibt, so kann $\delta(\mathbf{r})$ mittels

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{2\pi r_0 \rho_e(\mathbf{r})}{k^2} \quad (2.14)$$

aus der Verteilung der Elektronendichte ρ_e bestimmt werden (Als-Nielsen & McMorrow, 2001). Dabei bezeichnet r_0 den sogenannten klassischen Elektronenradius.

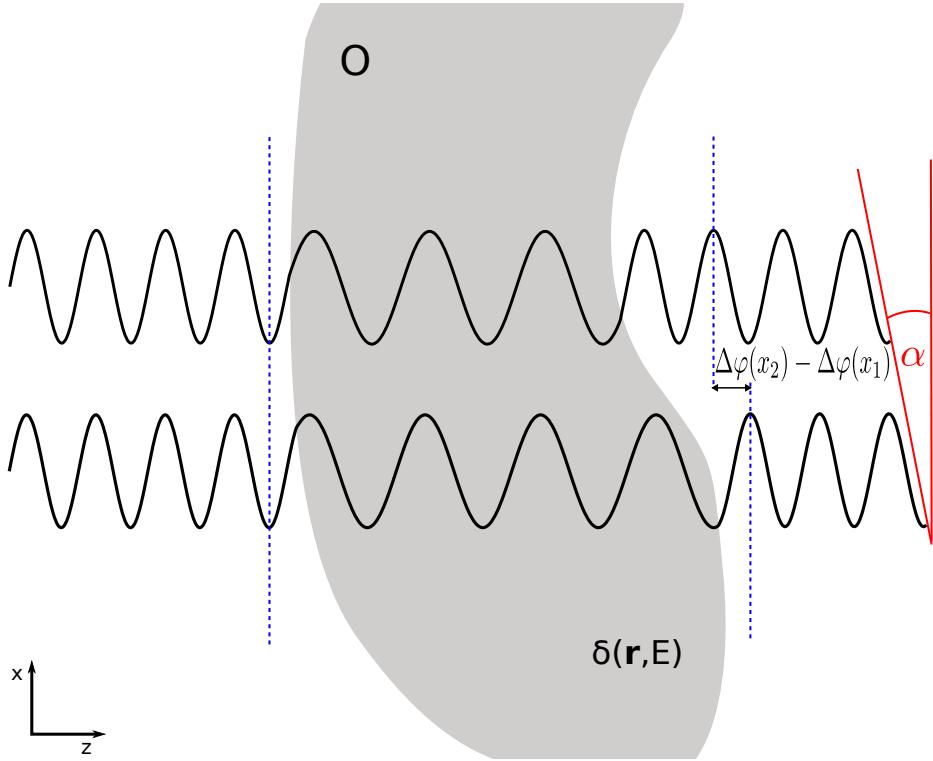


Abbildung 2.1: Veranschaulichung von Phasenschub und Brechung. Die Differenz aus dem Phasenschub der oberen Welle bei $x = x_2$ zu dem der unteren bei $x = x_1$ bestimmt den Brechungswinkel α . Im Limes $x_2 - x_1 \rightarrow 0$ folgt daraus Gleichung 2.13.

2.2 Röntgenbildgebung

Über die in Abschnitt 2.1 diskutierten Wechselwirkungsprozesse zwischen Materie und Röntgenstrahlung ist es möglich, Informationen über die innere Struktur von Objekten zu gewinnen. Abbildung 2.2 skizziert einen für die Röntgenbildgebung typische Messanordnung. Dabei bestrahlt eine Quelle S ein Objekt O, welches zunächst nur durch die Verteilung seines Absorptionskoeffizienten μ charakterisiert sei. Diese bestimmt gemäß Gleichung 2.11 die exponentielle Abschwächung der Röntgenstrahlung bei Durchgang durch das Objekt. Mittels eines Röntgendetektors D kann die Intensität der Strahlung hinter dem Objekt vermessen werden. Dabei werden Änderungen in x- bzw. y-Richtung, die entsprechende Ortsauflösung vorausgesetzt, detektiert. Aus Gleichung 2.11 kann dann, nach der Bestimmung von $I_0(x, y) = |\Psi_0(x, y)|^2$ aus einer sogenannten Referenzmessung ohne Objekt, die Transmission

$$T(x, y) = \frac{I(x, y)}{I_0(x, y)} = \exp \left[- \int \mu(\mathbf{r}) dz \right] \quad (2.15)$$

berechnet werden.

Bei der Bildgebung mit polychromatischen Strahlungsquellen, wie zum Beispiel den in der medizinischen Bildgebung üblichen Röntgenröhren, gilt es zu beachten, dass der Absorptionskoeffizient energieabhängig ist. Die vom Detektor gemessene Intensität ergibt sich dann aus dem

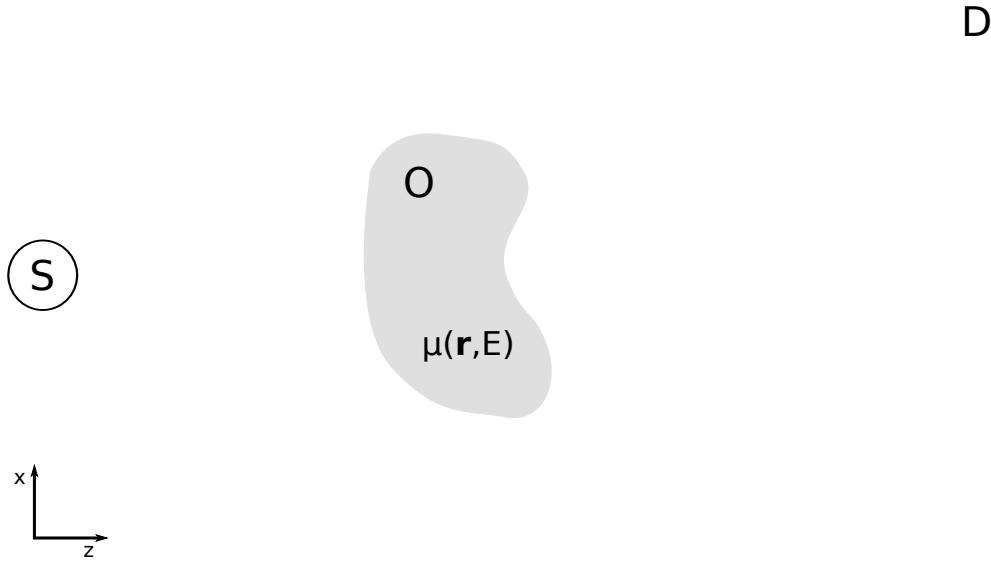


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung eines Aufbaus zur Röntgenbildgebung

Integral über alle spektralen Komponenten, gewichtet mit der Antwortfunktion des Detektors. Dabei muss zwischen integrierenden und photonenzählenden Detektoren unterschieden werden, siehe dazu auch Ritter (2015).

Im Gegensatz zur Absorption ist es nicht möglich, den durch das Objekt verursachten Phasenschub direkt zu messen. Das Snelliussche Brechungsgesetz liefert einen guten Schätzwert für die Größenordnung der auftretenden Brechungswinkel (Hahn, 2014). In Kleinwinkelnäherung gilt

$$\frac{\alpha_i}{\alpha_r} = \frac{1 - \delta_r}{1 - \delta_i}. \quad (2.16)$$

Dabei bezeichnet der Index i die einfallende und der Index r die gebrochene Welle. Der Brechungswinkel α ergibt sich aus der Differenz von Ausfalls- und Einfallswinkel. Unter der Annahme einer Propagation ins Vakuum, das heißt $\delta_r = 0$, folgt

$$\alpha = \alpha_r - \alpha_i = -\delta_i \alpha_i. \quad (2.17)$$

Für Röntgenstrahlung liegt δ im Bereich von 10^{-5} in Festkörpern bis 10^{-8} in Gasen (Als-Nielsen & McMorrow, 2001). Damit ergeben sich Brechungswinkel von der Größenordnung μrad , das heißt im Bereich von wenigen Bogensekunden. Brechungseffekte sind mit dem in diesem Abschnitt diskutierten Aufbau für die Absorptionsbildgebung damit nicht sichtbar.

2.3 Gitterbasierte Röntgenbildgebung

Die Bildgebung über den Phasenschub verspricht für viele Materialien, so zum Beispiel für biologisches Weichgewebe, eine im Vergleich zur reinen Absorptionsbildgebung deutlich höhere Sensitivität und damit einen besseren Kontrast. Ursache hierfür ist ein Verhältnis aus lokalem Phasenschub $k\delta$ und Absorptionskoeffizienten μ in der Größenordnung von 10^3 (Momose et al., 1996). In Abschnitt 2.2 hat sich gezeigt, dass die bei Röntgenstrahlen auftretenden Brechungswinkel zu klein sind, als dass sie direkt gemessen werden können. In den letzten Jahrzehnten wurden verschiedenste Methoden entwickelt, die den Phasenschub in eine Veränderung der Intensität überführen und damit sichtbar machen. Die meisten dieser Verfahren sind interferometrisch (Bonse & Hart, 1965; Momose & Fukuda, 1995) oder propagationsbasiert (Wilkins et al., 1996). Die für diese Arbeit relevante gitterbasierte Röntgenbildgebung ist den erstgenannten Methoden zuzuordnen.

In diesem Abschnitt soll zunächst mit dem Talbot-Effekt auf die theoretische Grundlage der gitterbasierten Röntgenbildgebung eingegangen werden. Anschließend wird erörtert, wie sich der konventionelle Messaufbau aus Abschnitt 2.2 damit auf die Phasenkontrastbildung erweitern lässt, gefolgt von einer Beschreibung des Messablaufs und der einzelnen Bildmodalitäten.

2.3.1 Talbot-Effekt

Die gitterbasierte Röntgenbildgebung basiert auf dem nach seinem Entdecker William Henry Fox Talbot (1836) benannten Talbot-Effekt. Dieser beschreibt die unter kohärenter Beleuchtung auftretende Selbstabbildung absorbierender und senkrecht zur Beleuchtungsrichtung periodischer Strukturen in bestimmten, diskreten Abständen. Mittels der Fresnelpropagation – siehe Gleichung 3.29 in Abschnitt 3.2 – kann gezeigt werden, dass sich diese Distanzen zu ganzzahligen Vielfachen des sogenannten Talbot-Abstands

$$z_T = \frac{2g^2}{\lambda} \quad (2.18)$$

ergeben (Paganin, 2006). Dabei bezeichnet g die Periodizität der Struktur und λ die Wellenlänge der verwendeten Strahlung.

Daneben tritt der Talbot-Effekt auch für nicht absorbierende periodische Strukturen auf, welche lediglich die Phase der einfallenden elektromagnetischen Wellen modulieren. Suleski (1997) stellt Untersuchungen für eine Vielzahl solcher Fälle bereit. Beschränkt man sich bezüglich der periodischen Strukturen auf Gitter mit einem Tastverhältnis von $1/2$ bei einem aufgeprägten Phasenschub von π bzw. $\pi/2$, so gilt für die Abstände der auftretenden Selbstabbildungen

$$z_T = \frac{1}{\eta^2} \frac{m_T g^2}{2\lambda} \quad \forall m_T \text{ ungerade}. \quad (2.19)$$

Da sich diese Abstände aus Gleichung 2.18 durch die Multiplikation mit einem gemeinen Bruch ergeben, werden sie auch als fraktionale Talbot-Abstände der Ordnung m_T bezeichnet. Der Parameter η ist gegeben durch

$$\eta = \begin{cases} 1 & \text{für } \Delta\varphi = \frac{\pi}{2} \\ 2 & \text{für } \Delta\varphi = \pi \end{cases} \quad (2.20)$$

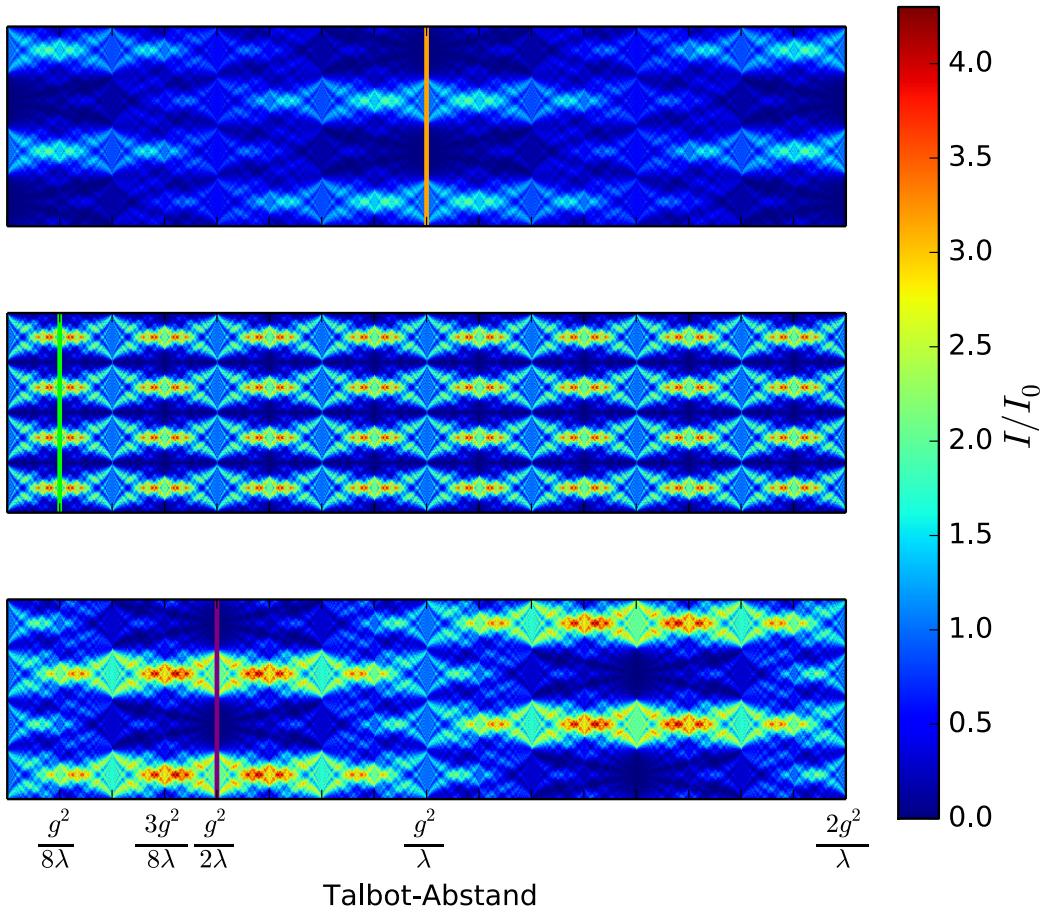


Abbildung 2.3: Numerische Berechnung der Intensität hinter einer periodischen Struktur. Die Auftragung erfolgt für ein reines Absorptionsgitter (oben), sowie für ein Phasengitter mit Phasenschub π (Mitte) bzw. $\pi/2$ (unten) jeweils über zwei Perioden und gegen die Propagationsdistanz.

und berücksichtigt die Art des Gitters.

Abbildung 2.3 zeigt die numerisch berechnete Intensitätsverteilung hinter einem absorbierenden und zwei phasenschiebenden Gittern. Die einfallende Welle propagiert dabei von links nach rechts und hat eine Intensität von I_0 . Sie wurde jeweils über zwei Perioden des jeweiligen Gitters berechnet. Für das Absorptionsgitter ergibt sich die erste Selbstabbildung nach Propagation um den vollen Talbot-Abstand gemäß Gleichung 2.18. Daneben kommt es zu einer weiteren transversal verschobenen Abbildung beim halben Talbot-Abstand. Diese ist in der graphischen Darstellung durch die orangefarbene Linie markiert. Die grüne bzw. violette Linie kennzeichnen jeweils den fraktionalen Talbot-Abstand erster Ordnung der phasenschiebenden Gitter. Bei einem Phasenschub von π kommt es dabei zu einer Frequenzverdopplung im Beugungsmuster.

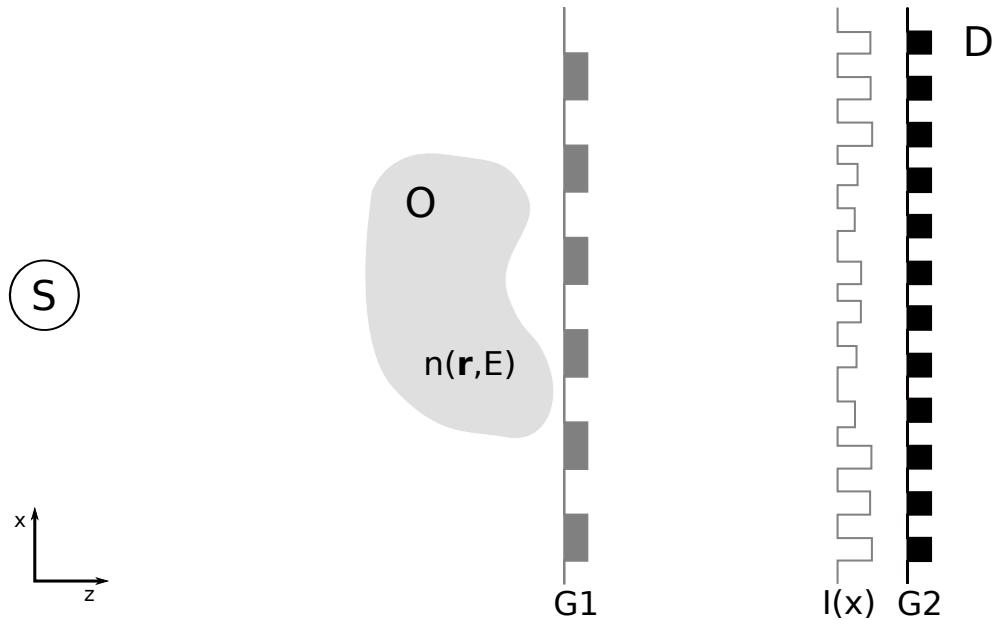


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung eines Talbot-Interferometers für die Röntgenbildgebung

2.3.2 Talbot(-Lau)-Interferometer

Über die durch den Talbot-Effekt verursachten Intensitätsmodulationen steht ein räumliches Referenzmuster zur Verfügung, gegenüber dem der Phasenschub eines Messobjekts detektiert werden kann. Der in Abschnitt 2.2 vorgestellte Aufbau der Absorptionsbildgebung wird dazu durch die Verwendung von zwei Gittern zu einem sogenannten Talbot-Interferometer erweitert. Das erste Gitter, im Folgenden als Beugungsgitter oder G1 bezeichnet, wird dabei direkt hinter dem zu messenden Objekt platziert. Hier ist ein phasenschiebendes Gitter meist die bevorzugte Wahl, da dadurch bei der Transmission zum einen kein nennenswerter Intensitätsverlust auftritt, was eine Reduzierung der Dosisbelastung des abzubildenden Objekts erlaubt. Zum anderen ist die erforderliche Propagationsdistanz nach dem Gitter deutlich kleiner und erlaubt somit kompaktere Aufbauten. Ohne Messobjekt im Strahlengang generiert das Beugungsgitter die durch den Talbot-Effekt beschriebenen Selbstabbildungen. Damit die (fraktionalen) Talbot-Abstände dabei noch im Bereich praktikabler Größenordnungen liegen, hat G1 in der Regel eine Periode von wenigen Mikrometern. Das Beugungsmuster weist eine Periodizität der gleichen Größenordnung auf und kann folglich nicht mit gewöhnlichen Röntgendetektoren – mit Pixelgrößen zwischen 10^1 und 10^2 μm – aufgelöst werden. Zur Abtastung des Talbotmusters wird deshalb ein zweites Gitter, im Folgenden Analysatorgitter bzw. G2 genannt, bei einem (fraktionalen) Talbot-Abstand in den Strahlengang eingebracht. Es ist stark absorbierend und von der Periodizität her dem Beugungsmuster angepasst. Eine schematische Darstellung eines

solchen Talbot-Interferometers für die Röntgenbildgebung findet sich in Abbildung 2.4. Die Abtastung des Talbotmusters erfolgt über die Phasestepping-Technik (Weitkamp et al., 2005). Dabei wird das Analysatorgitter mehrfach um Bruchteile seiner Periode senkrecht zu seinen Stegen und der Strahlrichtung verschoben. Mit der Aufnahme eines Bildes nach jedem Schritt wird damit für jeden Detektorpixel eine periodische Intensitätskurve, die sogenannte Phasesteppingkurve, erzeugt. Deren Form ergibt sich aus der Faltung der Transmissionsfunktion von G2 mit der Intensitätsverteilung des Talbotmusters. Im idealen Fall einer rechtecksförmigen Intensitätsmodulation ergibt sich daraus ein Dreieckssignal. In der Realität wird diese Dreiecksmodulation sowohl aufgrund der endlichen Größe der Röntgenquelle, als auch durch die Verwendung polychromatischer Strahlung sowie wegen Imperfektionen der Gitter verschmiert. Die resultierende Phasesteppingkurve entspricht dann einer Sinusschwingung.

Das Auftreten und die Ausprägung des Talbot-Effekts stellen bestimmte Anforderungen an die räumliche Ausdehnung und die spektrale Bandbreite der verwendeten Röntgenquelle. Simulationen zu dem Einfluss dieser beiden Parameter finden sich bei Ritter (2015). Das obig skizzierte Talbot-Interferometer eignet sich damit nur für bestimmte Quellen, wie zum Beispiel Mikrofokus-Röntgenröhren, siehe Schuster (2016), oder für Synchrotronstrahlung. Der Einsatz eines dritten, sogenannten Quellgitters ermöglicht die Verwendung von konventionellen Röntgenröhren, wie sie in der medizinischen Absorptionsbildgebung üblich sind (Pfeiffer et al., 2006). Jede Öffnung, dieses häufig auch als G0 bezeichneten Gitters, stellt eine für sich genommen kohärente Strahlungsquelle dar, welche folglich zu einer Selbstabbildung des Beugungsgitters führt (Patorski, 1983). Die einzelnen Talbotmuster überlagern sich ihrerseits inkohärent. Aus dem Strahlensatz folgt die Bedingung

$$\frac{g_0}{g_2} = \frac{l}{z_T} \quad (2.21)$$

an die Periode g_0 des Quellgitters, welche zu einem maximalen Kontrast der Überlagerungen führt. Dabei bezeichnet g_2 die Periode von G2 und l den Abstand zwischen Quell- und Beugungsgitter. Zusammenfassend kommt es dadurch zu einer Selbstabbildung von G1 durch G0. Dieser Effekt ist nach seinem Entdecker Ernst Lau (1948) benannt. Den entsprechenden Aufbau mit Quellgitter bezeichnet man deshalb als Talbot-Lau-Interferometer.

2.3.3 Bildmodalitäten

Zur Bildgebung in der gitterbasierten Röntgenbildgebung erfolgt die Abtastung des Beugungsmusters jeweils mit und ohne Messobjekt im Strahlengang. Wie oben beschrieben, liefern damit beide Messungen – im Folgenden werden sie als Objekt- bzw. Referenzmessung bezeichnet – eine Phasesteppingkurve für jeden Detektorpixel. Mit der Beschreibung durch eine Sinusfunktion ergibt sich folgende Parametrisierung:

$$I(x_s) = A \cdot \sin(2\pi x_s + \Phi) + \bar{I}. \quad (2.22)$$

Dabei gibt x_s die Translation des Analysatorgitters in Einheiten der Gitterperiode an. Die für die Bildgebung relevanten Parameter sind die Amplitude A , die Phase Φ und die mittlere Intensität \bar{I} der Phasesteppingkurve. Sie können durch einen Least-Squares-Fit, über eine diskrete Fouriertransformation oder mittels Entfaltung aus den Messdaten bestimmt werden

(Weber, 2013). Durch einen Vergleich der Parameter aus Objekt- und Referenzmessung kann jeweils ein projektives Bild des Objekts rekonstruiert werden. Im weiteren Verlauf dieses Abschnitts soll auf die einzelnen Bildmodalitäten eingegangen werden. Die Parameter der Referenzmessung werden dabei mit dem Subskript 0 indexiert.

Absorption

Analog zu Gleichung 2.15 kann in jedem Pixel über

$$T = \frac{\bar{I}}{\bar{I}_0} \quad (2.23)$$

aus den mittleren Intensitäten der beiden Phasesteppingkurven die Transmission für das Messobjekt bestimmt werden. Das Lambert-Beersche Schwächungsgesetz erlaubt das Auflösen nach dem projizierten Absorptionskoeffizienten. Die dadurch gewonnene Bildinformation entspricht derjenigen aus der reinen Absorptionsbildung (vgl. Abschnitt 2.2).

Differentieller Phasenschub

Der Phasenschub durch das Messobjekt liefert eine neue Bildinformation. Er führt zu einer Brechung der einfallenden Wellenfront und damit zu einer lateralen Verschiebung des Talbotmusters. Diese kann durch die Differenz der Phasenwerte der beiden Phasesteppingkurven

$$\Delta\Phi = \Phi - \Phi_0 \quad (2.24)$$

charakterisiert werden. Gleichzeitig lässt sich die absolute Verschiebung via

$$t = \tan(\alpha) \cdot z_T \quad (2.25)$$

über den Brechungswinkel α ausdrücken (Ritter, 2015). Über die Gitterperiode von G2 lassen sich die beiden Ausdrücke in Verbindung bringen. Mit Gleichung 2.13 und Gleichung 2.12 folgt dann

$$\Delta\Phi = -\frac{2\pi}{g_2} \cdot t = \frac{2\pi z_T}{g_2} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} \int \delta(\mathbf{r}) dz \right). \quad (2.26)$$

Die im Bild dargestellte Größe ist damit proportional zum differentiellen Phasenschub. Dabei gilt es zum einen zu beachten, dass Gleichung 2.26 auf der Annahme fußt, dass sich das Wellenfeld hinter dem Messobjekt über die Größe eines Pixels durch eine ebene Welle mit einem bestimmten Brechungswinkel approximieren lässt. Zum anderen steht für die Phasendifferenz nur das Intervall $[-\pi, \pi]$ zur Verfügung. Entsprechende Werte des differentiellen Phasenschubs, welche zu einem Verlassen dieses Intervalls führen sollten, werden wieder in ebendieses abgebildet. Diese Phänomen bezeichnet man als *Phase Wrapping*. Eine eindeutige Bestimmung von $\partial\varphi/\partial x$ ist damit nicht möglich.

Dunkelfeld

Eine weitere Bildmodalität der gitterbasierten Röntgenbildgebung ist das sogenannte Dunkelfeldbild (Pfeiffer et al., 2008). Es ist verknüpft mit der Visibilität

$$V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} = \frac{A}{\bar{I}} \quad (2.27)$$

des Talbot-Lau-Interferometers, welche den Kontrast des Talbotmusters angibt. Kommt es zu einem Verlust der Kohärenz des Strahlungsfeldes, so nimmt die Visibilität ab. Das Dunkelfeldbild erhält man aus der Division der Visibilitäten aus Objekt- und Referenzmessung, das heißt

$$D = \frac{V}{V_0}. \quad (2.28)$$

Es ist damit sensitiv auf Verluste der Visibilität die durch das Messobjekt verursacht werden. Im Gegensatz zum Absorptions- und zum differentiellen Phasenbild existiert für das Dunkelfeldbild im Moment jedoch kein analytisches Modell, welches Entstehung und Informationsgehalt basierend auf physikalischen Prozessen beschreibt. Im Folgenden sei daher auf einige Eigenschaften des Dunkelfeldbildes qualitativ eingegangen.

Ein Talbot-Interferometer ist auf eine bestimmte Photonenenergie, die sogenannte Design-Energie, ausgelegt. Für Röntgenquanten anderer Energie ergibt sich zum einen ein anderer Talbot-Abstand und zum anderen ein vom gewünschten Phasenschub des G1 abweichender Wert. Das Zusammenspiel dieser beiden Effekte führt zu einer komplexen Energieabhängigkeit der Visibilität. Da Absorptionskoeffizient und Phasenschub energieabhängig sind, hat dies Konsequenzen für die Bildgebung mit polychromatischen Strahlungsquellen. Zum einen verschiebt ein stark absorbierendes Objekt den spektralen Schwerpunkt des verwendeten Strahlungsfeldes hin zu höheren Energie und damit weg von der Design-Energie des Interferometers. Diesen Effekt, infolgedessen die Visibilität abnimmt, bezeichnet man als Strahlaufhärtung. Zum anderen ergeben sich unterschiedliche Brechungswinkel für die einzelnen monochromatischen Komponenten der Röntgenstrahlung. Die transversale Verschiebung der Interferenzstreifen im Talbotmuster variiert folglich mit der Energie, wodurch der Kontrast der Überlagerung aller spektralen Anteile abnimmt. Das Dunkelfeldbild ist über diese Effekte mit den anderen beiden Bildmodalitäten korreliert. Simulationen hierzu finden sich bei Ritter (2015).

Des Weiteren kommt es zu einem Visibilitätsverlust, wenn die Wellenfront lokal, über die Größe eines Pixels gesehen, stark deformiert ist. Damit folgt eine Sensitivität auf granuläre Strukturen, wie zum Beispiel Mikrokalzifikationen in der Mammographie (Michel et al., 2013; Ritter et al., 2014a), auch für Abmessungen unterhalb der eigentlichen Auflösungsgrenze.

Bech et al. (2010) beschreiben das Dunkelfeldbild durch einen linearen Diffusionskoeffizienten. Es ergibt sich dann mit

$$D = \exp \left[- \int \epsilon(\mathbf{r}) dz \right] \quad (2.29)$$

die gleiche funktionale Form wie für die Transmission aus dem Lambert-Beerschen Schwächungsgesetz. Yashiro et al. (2010) kommen unter der Annahme, dass sich die Phasenfluktuationen der deformierten Wellenfront durch einen Gaußschen Zufallsprozess beschreiben lassen, ebenfalls auf eine exponentielle Dickenabhängigkeit. In Messungen und Simulationen von Gödel (2011) zeigen sich jedoch insbesondere für große Dicken Abweichungen von diesem funktionalen Verlauf.

2.4 Computertomographie

Das Ziel der Computertomographie (CT) ist es, wie bereits in Kapitel 1 angesprochen, die Verteilung einer physikalischen Größe aus projektiven Messungen zu bestimmen. In der kon-

ventionellen Röntgen-CT beispielsweise gilt es, die dreidimensionale Verteilung des Absorptionskoeffizienten aus mehreren zweidimensionalen, unter verschiedenen Projektionswinkeln aufgenommenen Röntgenbildern der transmittierten Intensität zu ermitteln. In diesem Abschnitt soll die wohl meist verwendete tomographische Rekonstruktionstechnik, die sogenannte gefilterte Rückprojektion (FBP für *filtered back projection*), beschrieben und diskutiert werden. Dazu wird zunächst mit der Radontransformation die mathematische Grundlage zur Charakterisierung des Messvorgangs einer CT eingeführt und mit dem Fourier-Slice-Theorem die Basis aller auf Fouriermethoden beruhenden Rekonstruktionsverfahren hergeleitet. Der Abschnitt schließt mit einer kurzen Einführung in algebraische und statistische Rekonstruktionsmethoden.

2.4.1 Radontransformation

Aus mathematischer Sicht versucht die Computertomographie, eine Punktfunktion

$$f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} \quad (2.30)$$

aus der zugehörigen Geradenfunktion

$$f_G(g) := \int_{\mathbf{r} \in g} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.31)$$

zu rekonstruieren. Dabei gilt $g \in G$, mit G der Menge aller Geraden des \mathbb{R}^2 . Gleichung 2.31 definiert – als Abbildung $f \mapsto f_G$ aufgefasst – die sogenannte Radontransformation (Radon, 1917). Durch die Radontransformation wird die Funktion f entlang aller Geraden $g \in G$ integriert. Sie projiziert damit f für jede einzelne Gerade g auf eine entsprechende Orthogonale und eignet sich mit Blick auf die Röntgenbildgebung, insbesondere die CT, folglich zur Beschreibung des dortigen Messvorgangs (Deans, 2007).

Soll die Radontransformation einer Punktfunktion f konkret berechnet werden, so ist in der Praxis eine geeignete Parametrisierung der in Gleichung 2.31 abstrakt dargestellten Geraden g zu wählen. Während die modernen CT-Scanner auf dem Fächer- bzw. Kegelstrahlverfahren basieren, liefert das sogenannte Translations-Rotations-Prinzip der ersten Gerätetypen die dafür geeigneter Basis. Dabei wird die Röntgenstrahlung zu einem Nadelstrahl kollimiert und die Strahlungsquelle wird nach jedem Rotationsschritt zur Abtastung des Messobjekts transversal zu ebendiesem verschoben (Kalender, 2000). Eine graphische Gegenüberstellung beider Messverfahren findet sich in Abbildung 2.5. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass sich die Bildrekonstruktion bei vorliegender Fächerstrahlgeometrie durch sogenanntes Rebinning auf den Fall der Parallelstrahlgeometrie zurückführen lässt. Die Begründung hierfür liefert die Tatsache, dass jede Geradenfunktion aus einer einzelnen Projektion in Fächerstrahlgeometrie einem jeweils unterschiedlichen Projektionswinkel in Parallelstrahlgeometrie zugeordnet werden kann. In der Sprache der Mathematik gesprochen stellen die beiden Messverfahren also lediglich unterschiedliche Partitionen der Menge G aller Geraden dar (Buzug, 2008). Ferner ist in der gitterbasierten Phasenkontrastbildgebung das Verhältnis aus der Größe des Gesichtsfeldes und der Distanz zwischen Detektor und Röntgenquelle so klein, der Einfluss der Divergenz des Röntgenstrahls damit so gering ausgeprägt, dass Parallelstrahlen eine meist akzeptable Näherung liefern (Zhihua & Guang-Hong, 2008). Die folgenden Ausführungen beschränken sich daher auf den Fall der Parallelstrahlgeometrie.

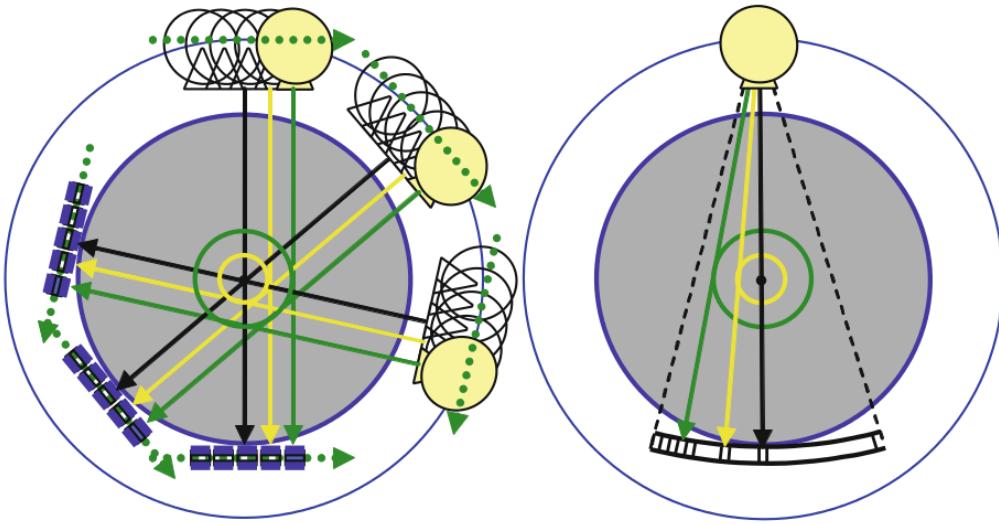


Abbildung 2.5: Gegenüberstellung von Parallelstrahlgeometrie (links) und Fächerstrahlgeometrie (rechts) (Buzug, 2008)

Während die Punktfunktion f typischerweise in einem ortsfesten Koordinatensystem (x, y) gegeben ist bzw. in einem solchen bestimmt werden soll, eignet sich ein rotierendes Koordinatensystem (ξ, η) deutlich besser zur Parametrisierung der Geraden g . Letztere ist durch den Rotationswinkel γ und den Abstand zum Koordinatenursprung ξ vollständig charakterisiert. Die Koordinatenachse η entspricht dann der Ausbreitungsrichtung des Röntgenstrahls. Abbildung 2.6 veranschaulicht den Zusammenhang zwischen den beiden Koordinatensystemen. Die Basisvektoren von (ξ, η) erhält man in (x, y) zu

$$\mathbf{e}_\xi = \begin{pmatrix} \cos(\gamma) \\ \sin(\gamma) \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

und

$$\mathbf{e}_\eta = \begin{pmatrix} -\sin(\gamma) \\ \cos(\gamma) \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

Mittels dieser Basisvektoren können die Komponenten x und y durch ξ und η ausgedrückt werden. Man erhält

$$x = \xi \cos(\gamma) - \eta \sin(\gamma) \quad (2.34)$$

bzw.

$$y = \xi \sin(\gamma) + \eta \cos(\gamma) \quad (2.35)$$

und die Radontransformierte aus Gleichung 2.31 lässt sich schreiben als

$$f_G(g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi \cos(\gamma) - \eta \sin(\gamma), \xi \sin(\gamma) + \eta \cos(\gamma)) d\eta = p_\gamma(\xi). \quad (2.36)$$

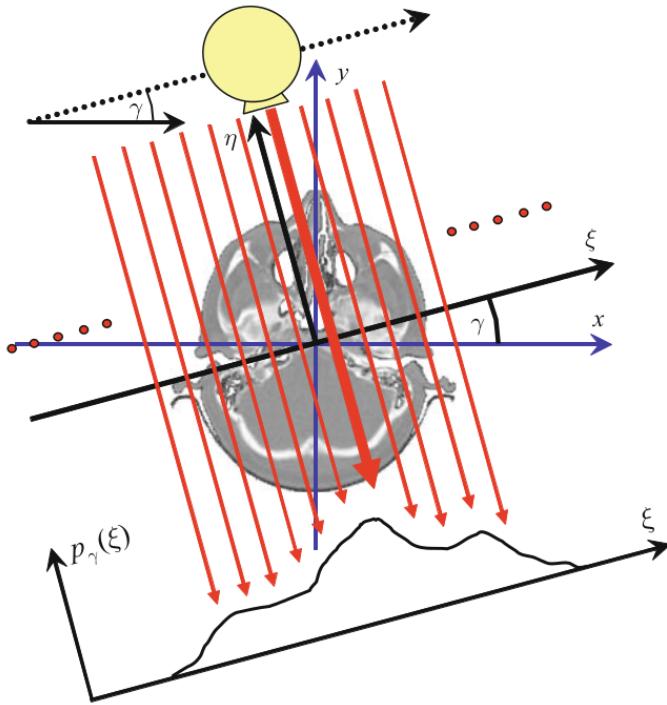


Abbildung 2.6: Zusammenhang zwischen ortsfestem und rotierendem Koordinatensystem (Buzug, 2008)

Dargestellt werden die radontransformierten Daten üblicherweise in einem kartesischen (ξ, γ) -Diagramm, welches, da jeder Objektpunkt, der nicht auf der Rotationsachse liegt, dort eine Sinuskurve beschreibt, auch als Sinogramm bezeichnet wird.

2.4.2 Fourier-Slice-Theorem

Da die im vorherigen Abschnitt eingeführte Radontransformation den Messvorgang der Computertomographie modelliert, also Projektionswerte $p_\gamma(\xi)$ aus der Objektfunktion $f(x, y)$ generiert, gilt es in der CT-Rekonstruktion ebendiese Transformation zu invertieren. Eine Lösung dieses Problems ist das sogenannte Fourier-Slice-Theorem. Es besagt, dass die eindimensionale Fouriertransformation der Radontransformierten $p_\gamma(\xi)$ von $f(x, y)$ dem radialen Schnitt durch die zweidimensionale Fouriertransformation von $f(x, y)$ unter dem Winkel γ entspricht. Schematisch ist dieser Zusammenhang in Abbildung 2.7 veranschaulicht.

Für den Beweis des Fourier-Slice-Theorems (Bracewell, 1956) wird zunächst die zweidimensionale Fouriertransformation definiert als

$$F(u_x, u_y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) \exp [-2\pi i (xu_x + yu_y)] dx dy . \quad (2.37)$$

Unter Verwendung der Beziehungen zwischen dem ortsfestem und dem rotierendem Koordinatensystem – siehe Gleichung 2.34 und 2.35 – lässt sich die Fouriertransformation der

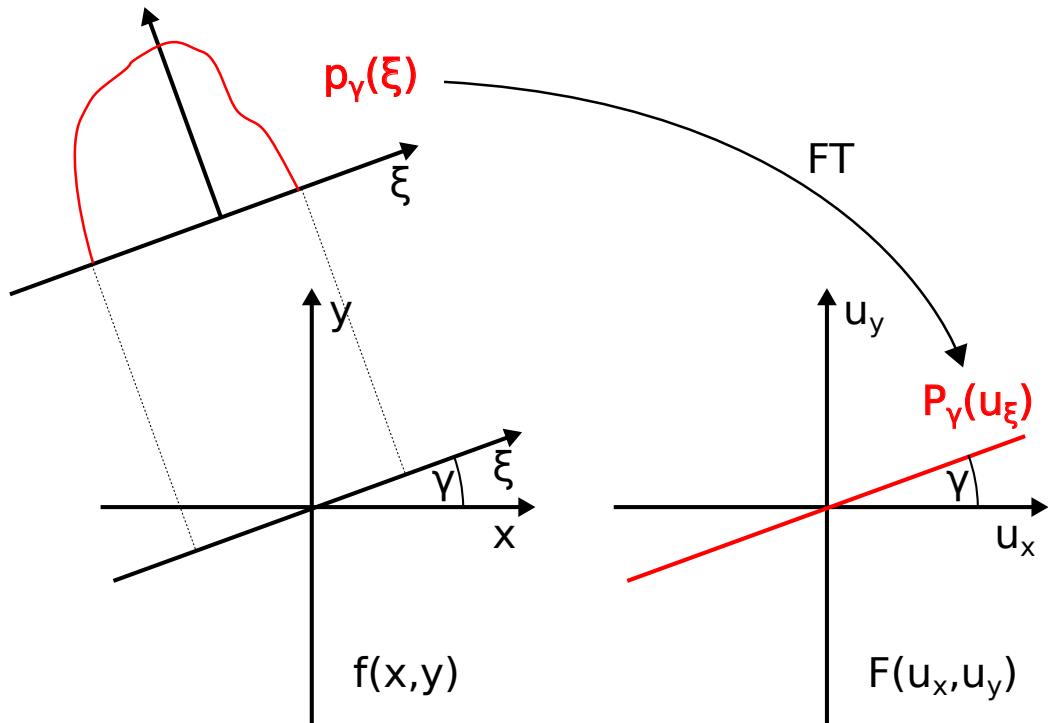


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung des Fourier-Slice-Theorems

Radontransformierten

$$\begin{aligned}
 P_\gamma(u_\xi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} p_\gamma(\xi) \exp[-2\pi i \xi u_\xi] d\xi \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi \cos(\gamma) - \eta \sin(\gamma), \xi \sin(\gamma) + \eta \cos(\gamma)) d\eta \right] \exp[-2\pi i \xi u_\xi] d\xi \quad (2.38) \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, y) \exp[-2\pi i (x \cos(\gamma) u_\xi + y \sin(\gamma) u_\xi)] dx dy \\
 &= F(u_x, u_y)|_{\substack{u_x = u_\xi \cos(\gamma) \\ u_y = u_\xi \sin(\gamma)}}
 \end{aligned}$$

nach der Koordinatentransformation in das ortsfeste System mit Gleichung 2.37 in Verbindung bringen. Der Ausdruck in der letzten Zeile von Gleichung 2.38 beschreibt einen radialen Schnitt durch Gleichung 2.37 unter dem Winkel γ und beweist damit das Fourier-Slice-Theorem.

Im Prinzip könnte die ursprüngliche Objektfunktion $f(x, y)$ somit – die exakte Kenntnis der Radontransformierten vorausgesetzt – mittels einer zweidimensionalen inversen Fouriertransformation bestimmt werden. In der Praxis ist $p_\gamma(\xi)$ jedoch nur für endlich viele Abtastpunkte bekannt. Bezogen auf das Koordinatensystem (x, y) liegen diese auf radialen Schnitten durch den Ursprung. Im Fourieraum ist folglich $F(u_x, u_y)$ ebenfalls nur entlang analoger radiauer

Schnitte gegeben. Zur Bestimmung von $f(x, y)$ auf rechtwinklig angeordneten Stützstellen, muss die zugehörige Fouriertransformierte $F(u_x, u_y)$ mittels Interpolationsverfahren auf einem entsprechenden kartesischen Gitter definiert werden. Da durch die radiale Struktur der Messwerte die Dichte der Abtastpunkte im Fourierraum zu höheren Raumfrequenzen hin abnimmt, führen Interpolationsmethoden dort aber zu größeren Fehlern (Buzug, 2008). Das im folgenden Abschnitt diskutierte Rekonstruktionsverfahren umgeht dieses Problem.

2.4.3 Gefilterte Rückprojektion

Die gefilterte Rückprojektion ist die wohl meist verwendete Rekonstruktionstechnik in der Computertomographie (Buzug, 2008). Sie zeichnet sich durch eine einfache Implementierung und einen moderaten Bedarf an Rechenleistung aus. Mathematisch kann das Verfahren direkt aus dem Fourier-Slice-Theorem abgeleitet werden. Durch eine Koordinatentransformation in der inversen Fouriertransformation

$$\begin{aligned} f(x, y) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(u_x, u_y) \exp[2\pi i(xu_x + yu_y)] du_x du_y \\ &= \int_0^{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{F(u_\xi \cos(\gamma), u_\xi \sin(\gamma))}_{=P_\gamma(u_\xi)} |u_\xi| \exp[2\pi i \xi u_\xi] du_\xi d\gamma \end{aligned} \quad (2.39)$$

von kartesischen Koordinaten in ein Polarkoordinatensystem, kann der Integrand über das Fourier-Slice-Theorem durch die fouriertransformierte Radontransformation von f ausgedrückt werden. Das innere Integral definiert die Filterung der Radontransformierten im Frequenzraum

$$h_\gamma(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} P_\gamma(u_\xi) |u_\xi| \exp[2\pi i \xi u_\xi] du_\xi \quad (2.40)$$

mit dem Rampen-Filter

$$W_{\text{ramp}}(u) = |u|. \quad (2.41)$$

Ohne den Filterterm würde Gleichung 2.40 der Radontransformierten $p_\gamma(\xi)$ und damit den Projektionen von f entsprechen. Folglich bezeichnet man $h_\gamma(\xi)$ auch als gefilterte Projektion. Der Rampen-Filter sorgt dabei für eine stärkere Gewichtung der hohen Ortsfrequenzen und kompensiert dadurch die unterschiedliche Dichte an Abtastpunkten im Frequenzraum.

Mit den gefilterten Projektionen lässt sich das äußere Integral aus Gleichung 2.39 schreiben als

$$f(x, y) = \int_0^\pi h_\gamma(\xi) d\gamma. \quad (2.42)$$

In diesem Schritt werden die gefilterten Projektionen auf das Volumen des gemessenen Objekts zurückprojiziert, wodurch die Objektfunktion aus der Radontransformierten zurückgewonnen werden kann. Da in der Praxis die Projektionen nur für diskrete Werte von γ und ξ bekannt sind und zugleich die Objektfunktion nur auf einem Gitter – das heißt für diskrete (x, y) -Koordinaten – bestimmt wird, wird zum einen das Integral aus Gleichung 2.42 durch eine

Summe ersetzt. Zum anderen erfordert die Rückprojektion aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Koordinatensysteme stets eine Form der Interpolation. Dazu berechnet man für jeden Projektionswinkel die ξ -Koordinate der gewünschten Gitterstellen $\xi(x, y)$ und interpoliert den Wert der gefilterten Projektion für diesen Punkt aus den vorhandenen Abtastpunkten. Für die in dieser Arbeit mittels gefilterter Rückprojektion rekonstruierten Volumen wurde dazu linear in ξ interpoliert.

Im weiteren Verlauf dieses Abschnitts soll auf die tomographische Rekonstruktion der drei verfügbaren Bildmodalitäten der gitterbasierten Röntgenbildgebung (siehe Abschnitt 2.3.3) eingegangen werden.

Absorption

Für den Fall der Absorptionsbildung definiert man den negativen Logarithmus der Transmission als Radontransformierte. Mit Gleichung 2.15 gilt dann

$$p_\gamma(\xi) = -\ln(T) = \int \mu(\mathbf{r}) d\eta. \quad (2.43)$$

Die zu rekonstruierende Punktfunktion ist damit der Absorptionskoeffizient μ . Man erhält seine Verteilung über Gleichung 2.42 mit

$$h_\gamma(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{FT}[-\ln T(\xi)] |u_\xi| \exp[2\pi i \xi u_\xi] du_\xi. \quad (2.44)$$

Dabei ist $\mathcal{FT}[\dots]$ eine symbolische Notation für die Fouriertransformation, wie sie beispielsweise explizit in Gleichung 2.38 definiert ist.

Differentieller Phasenkontrast

Die dem differentiellen Phasenschub zugehörige Punktfunktion ist das Dekrement δ des Brechungsindex. Aufgrund der differentiellen Natur der dazu gemessenen Projektionen können diese nicht direkt der gefilterten Rückprojektion übergeben werden. Vielmehr muss die Radontransformierte

$$p_\gamma(\xi) = \int \delta(\mathbf{r}) d\eta \quad (2.45)$$

von δ über Gleichung 2.26 bestimmt werden. Mit der Eigenschaft

$$\mathcal{FT}\left[\frac{\partial f}{\partial x}(x)\right] = 2\pi i u_x \mathcal{FT}[f(x)] \quad (2.46)$$

der Fouriertransformation folgt

$$P_\gamma(u_\xi) = \frac{\mathcal{FT}\left[\frac{g_2}{2\pi z_T} \Delta\Phi\right]}{2\pi i u_\xi}. \quad (2.47)$$

Für Gleichung 2.40 zur Berechnung der gefilterten Projektion führt dies zur Verwendung des Hilbert-Filters

$$W_{\text{hilbert}}(u) = -\frac{i}{2\pi} \operatorname{sgn}(u) \quad (2.48)$$

anstelle des Rampen-Filters (Faris & Byer, 1988). Alternativ können die differentiellen Projektionen zunächst aufintegriert – in der Praxis geschieht dies durch eine kumulative Summe über ξ – und dann mittels Rampen-Filter in der Rückprojektion rekonstruiert werden. Dabei muss eine Verschiebung der Abtastpunkte in ξ um eine halbe Pixelbreite berücksichtigt werden (Raupach & Flohr, 2011).

Dunkelfeld

Die gefilterte Rückprojektion für das Dunkelfeldbild verläuft, gegeben seine Beschreibung durch den Koeffizienten ϵ über Gleichung 2.29, komplett analog zur Rekonstruktion des Absorptionskoeffizienten. In den entsprechenden Gleichungen – 2.43 und 2.44 – sind lediglich die Ersetzungen $T \rightarrow D$ und $\mu \rightarrow \epsilon$ durchzuführen. Neben den in Abschnitt 2.3.3 angesprochenen, mit einer exponentiellen Dickenabhängigkeit nicht vereinbaren Ergebnissen, gilt es hierbei zusätzlich zu beachten, dass das Dunkelfeldsignal im Allgemeinen richtungsabhängig ist, also eher durch eine vektorielle Größe modelliert werden sollte, anstatt durch ein Skalar (Bayer et al., 2014). Isotrope Beschreibungen wie über Gleichung 2.29 sind folglich inkonsistent.

2.4.4 Iterative Rekonstruktionsmethoden

Während sie in den Anfängen der CT-Bildgebung zum Einsatz kamen, wurden iterative Rekonstruktionsverfahren aufgrund ihres hohen Rechenaufwands und den damit verbundenen langen Rechenzeiten meist schnell zugunsten von analytischen Methoden wie der gefilterten Rückprojektion aufgegeben. Auf der anderen Seite ermöglichen sie eine bessere Modellierung der grundlegenden physikalischen Prozesse und versprechen dadurch eine Vermeidung von Bildartefakten sowie eine Reduzierung des Bildrauschens bzw. der Dosis. Außerdem eignen sie sich besser für unvollständige Datensätze oder irreguläres Sampling während der Messung. In den letzten Jahren sind sie deshalb mit der breiten Verfügbarkeit an Rechenleistung wieder vermehrt in Erscheinung getreten (Beister et al., 2012).

Man unterscheidet zwischen algebraischen und statistischen Methoden. Erstere modellieren den Bildgebungsprozess durch ein lineares Gleichungssystem

$$\mathbf{p} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{f} . \quad (2.49)$$

Dabei ist \mathbf{f} eine diskrete Repräsentation der zu rekonstruierenden Punktfunktion f bezüglich einer bestimmten Klasse an Bildbasisfunktionen – eine formale Definition hierzu findet sich mit Gleichung 3.6 in Abschnitt 3.1.1 – und \mathbf{p} bezeichnet die gemessenen Projektionen von f , das heißt die diskretisierte Radontransformierte. Die Systemmatrix \mathbf{A} beinhaltet die Information, wie stark welche Basisfunktion zu welchem Linienintegral beiträgt. Im Allgemeinen ist die Systemmatrix sehr groß, für moderne CT-Scanner von der Größenordnung $10^6 \times 10^5$ (Buzug, 2008). Das betrachtete Gleichungssystem ist damit überbestimmt. Eine exakte Lösung für \mathbf{f} existiert folglich nur unter idealisierten Bedingungen. Eine direkte Invertierung des Gleichungssystems 2.49, selbst mittels einer Pseudoinversen, ist für gewöhnlich nicht praktikabel (Buzug, 2008). Eine Möglichkeit, das Gleichungssystem iterativ zu lösen, bietet die Methode nach Stefan

Kaczmarz (1937). Deren Iterationsformel

$$\mathbf{f}^{(k+1)} = \mathbf{f}^{(k)} + \frac{p_i - \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{f}^{(k)}}{\|\mathbf{a}_i\|^2} \mathbf{a}_i \quad \text{mit } i = 1 + k \mod M \quad (2.50)$$

projiziert den k -ten Schätzwert $\mathbf{f}^{(k)}$ auf den Lösungsraum der i -ten Gleichung. Mit \mathbf{a}_i wird dabei die i -te der M Zeilen von \mathbf{A} bezeichnet.

Statistische Methoden bieten einen dazu deutlich unterschiedlichen Ansatz der Bildrekonstruktion. Dabei wird die Bildgebung durch einen stochastischen Prozess modelliert und die gesuchten Bildkoeffizienten sind dessen Parameter. Die gemessenen Intensitäten stellen eine Realisierung des Zufallsprozesses dar. Seine Parameter werden dann derart geschätzt, dass sie die beobachtete Stichprobe möglichst plausibel machen. Auf diese Weise können auch statistische Merkmale, wie beispielsweise die Rauscheigenschaften der Messung, in der Rekonstruktion berücksichtigt werden.

Ein dafür geeignetes parametrisches Schätzverfahren ist die sogenannte Maximum-Likelihood-Methode (Fisher, 1922). Dabei seien n unabhängige Realisierungen x_1, \dots, x_n der Zufallsvariablen X_1, \dots, X_n vorhanden. Ferner seien deren Wahrscheinlichkeitsdichten $p_{X_i}(x)$ abhängig von einer bestimmten Anzahl an Parametern $\boldsymbol{\theta}$, das heißt sie entspringen einer Familie $p(\cdot | \boldsymbol{\theta})$ von Funktionen. Die Werte $\boldsymbol{\theta}^*$ der Parameter seien nicht bekannt. Das Ziel der Maximum-Likelihood-Methode ist dann die Bestimmung eines Schätzer $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ der die wahren Werte bestmöglich approximiert. Die gemeinsame Dichtefunktion aller Realisierungen lässt sich dazu schreiben als

$$P(x_1, \dots, x_n | \boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^n p_{X_i}(x_i | \boldsymbol{\theta}). \quad (2.51)$$

Betrachtet man diesen Ausdruck nun nicht als Funktion der x_i , sondern umgekehrt als Funktion von $\boldsymbol{\theta}$ für feste Realisierungen x_1, \dots, x_n der Zufallsvariablen, so ergibt sich hieraus die Likelihood-Funktion

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta} | x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n p_{X_i}(x_i | \boldsymbol{\theta}). \quad (2.52)$$

Den Schätzwert $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ erhält man aus der Maximierung dieser Funktion. In der Praxis ist es oft einfacher mit dem Logarithmus von \mathcal{L} , der sogenannten Log-Likelihood-Funktion

$$l(\boldsymbol{\theta} | x_1, \dots, x_n) = \ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta} | x_1, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \ln p_{X_i}(x_i | \boldsymbol{\theta}), \quad (2.53)$$

zu arbeiten. Da der Logarithmus streng monoton steigend ist, bleibt das Maximum dabei dasselbe, sofern es existiert. In diesem Fall ergibt sich der Maximum-Likelihood-Schätzer dann zu

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} l(\boldsymbol{\theta} | x_1, \dots, x_n). \quad (2.54)$$

Während $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ für einige Wahrscheinlichkeitsdichten analytisch berechnet werden kann, sind vor allem für kompliziertere Modelle numerische Optimierungsmethoden erforderlich.

3 Methoden

3.1 Simultane iterative Rekonstruktionsmethode

Forschungsgegenstand dieser Arbeit ist die von Ritter et al. (2013) entwickelte simultane, iterative Rekonstruktionsmethode (nachstehend abgekürzt als SIR). Der Ansatz wurde derart konzipiert, dass der Absorptionskoeffizient μ , das Dekrement δ des Brechungsindex und der Diffusions- bzw. Streukoeffizient ϵ des Dunkelfeldes gleichzeitig auf Basis der gemessenen PhasestANDINGkurven rekonstruiert werden. Zum einen entfällt dadurch die Notwendigkeit, die für die Bildgebung relevanten Parameter der PhasestANDINGkurve zu extrahieren. Im Gegensatz zu den dazu in Abschnitt 2.3.3 beschriebenen Methoden ermöglicht die SIR damit unter Umständen auch CT-Rekonstruktionen mit weniger als drei Abtastpositionen des Gitters G2 pro Projektion. Zum anderen können mögliche Korrelationen unter den drei Bildinformationen durch deren gleichzeitige Berechnung auf eine sehr natürliche und geradlinige Art und Weise berücksichtigt werden. In diesem Abschnitt sollen die Grundlagen der SIR vorgestellt werden. Mit der Likelihood-Funktion wird dafür zunächst die Zielfunktion der Methode eingeführt. Eine zweite Passage behandelt deren numerische Optimierung.

3.1.1 Likelihood-Funktion

Zum Aufstellen der Likelihood-Funktion benötigt man eine Modellierung des Bildgebungsprozesses, das heißt eine Vorwärtsrechnung. Diese verknüpft die Parameter $\boldsymbol{\theta}$ aus der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion – hier sind das die Verteilungen $\mu(\mathbf{r})$, $\delta(\mathbf{r})$ und $\epsilon(\mathbf{r})$ – mit den gemessenen Intensitäten der PhasestANDINGkurven. Im Folgenden bezeichnet der Index i einen Detektorpixel in einer Projektion und der Index s die Position des Analysatorgitters während eines Phasesteps. Zu jedem Wert von i und s existiert eine gemessene Intensität $N_{i,s}$. Bei gegebenen Verteilungen von μ , δ und ϵ erlaubt die Vorwärtsrechnung die Bestimmung des jeweiligen Erwartungswertes $\bar{N}_{i,s}$. Er berechnet sich zu

$$\bar{N}_{i,s} = N_i^0 T_i [1 + V_i^0 D_i \cos(\Phi_{i,s}^0 + \Delta\Phi_i)] \quad (3.1)$$

mit N_i^0 der mittleren Intensität und V_i^0 der Referenzvisibilität aus einer Messung ohne Probe. Der Phasenwert $\Phi_{i,s}^0$ errechnet sich über die Summe des Phasenwertes Φ_i^0 der Referenzkurve und der relativen Phase $\Phi_s = 2\pi x_s$ aus der Translation von G2, das heißt

$$\Phi_{i,s}^0 = \Phi_i^0 + \Phi_s. \quad (3.2)$$

Die von den Objekteigenschaften abhängigen Größen in Gleichung 3.1 sind die Transmission T_i , das Dunkelfeld D_i und die differentielle Phase $\Delta\Phi_i$ in jedem Pixel. Sie können über die Gleichungen 2.15, 2.29 und 2.26 berechnet werden. Die darin auftretenden Linienintegrale

erstrecken sich von der Röntgenquelle bis zum betrachteten Pixel. Sei dieser Pfad durch die Gerade g_i gegeben, so ergibt sich zusammenfassend

$$T_i = \exp \left[- \int_{\mathbf{r} \in g_i} \mu(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right], \quad (3.3)$$

$$D_i = \exp \left[- \int_{\mathbf{r} \in g_i} \epsilon(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right] \quad (3.4)$$

sowie

$$\Delta\Phi_i = \frac{\partial}{\partial\xi} \int_{\mathbf{r} \in g_i} \tilde{\delta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (3.5)$$

Im Ausdruck für die differentielle Phase wurde dabei der geometrische Vorfaktor $2\pi z_T/g_2$ aus Gleichung 2.26 in $\tilde{\delta}$ absorbiert. Er ist nur zu berücksichtigen, wenn die absoluten Werte von δ von Interesse sind.

Wie im Fall der gefilterten Rückprojektion, können die Objektfunktionen μ , δ und ϵ auch hier nur für eine Diskretisierung des \mathbb{R}^2 bestimmt werden. Im Allgemeinen kann eine Objektfunktion f durch eine gewichtete Summe von sogenannten Bildbasisfunktionen

$$f(\mathbf{r}) \approx \sum_j f_j \psi_j(\mathbf{r}) \quad (3.6)$$

approximiert werden. Rekonstruiert werden dann die Koeffizienten f_j . Mit der Wahl der ψ_j lassen sich die Linienintegrale in Gleichung 3.3 - 3.5 als Summen schreiben. Dabei erhält man

$$\int_{\mathbf{r} \in g_i} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \approx \int_{\mathbf{r} \in g_i} \sum_j f_j \psi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_j f_j \underbrace{\int_{\mathbf{r} \in g_i} \psi_j(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}_{=M_{ij}}. \quad (3.7)$$

Über die Koeffizienten M_{ij} wird dabei ein sogenannter Vorwärtsprojektor definiert. Sie geben ganz allgemein an, wie stark die j-te Basisfunktion zum i-ten Messwert beiträgt. In der ursprünglichen Implementierung der SIR wurde eine Diskretisierung mittels Voxel gewählt. Das sind rechteckige Bildbasisfunktionen

$$\psi_j(\mathbf{r}) = \text{rect} \left(\frac{x - x_j}{d_x} \right) \cdot \text{rect} \left(\frac{y - y_j}{d_y} \right) \quad (3.8)$$

mit Mittelpunkt (x_j, y_j) und Breite $d_{x/y}$. Die Rechtecksfunktion ist dabei derart definiert, dass sie den Wert eins annimmt, falls das Argument betragsmäßig kleiner oder gleich $1/2$ ist, und sonst null. Die Koeffizienten M_{ij} werden mit der Methode nach Siddon (1985) berechnet. Eine ausführlichere Diskussion dieser und anderer Methoden zur Berechnung verschiedener Vorwärtsprojektoren findet sich in Abschnitt 4.1 dieser Arbeit.

Die diskretisierten Versionen von Gleichung 3.3 und 3.4 lauten

$$T_i = \exp \left[- \sum_j M_{ij} \mu_j \right] \quad (3.9)$$

$$D_i = \exp \left[- \sum_j M_{ij} \epsilon_j \right]. \quad (3.10)$$

In Gleichung 3.5 wird die Ableitung nach ξ mittels des Differenzenquotienten

$$\Delta \Phi_i \approx \frac{1}{d_d} \cdot \left[\int_{\mathbf{r} \in g_i^+} \tilde{\delta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r} \in g_i^-} \tilde{\delta}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right] = \sum_j \delta M_{ij} \tilde{\delta}_j \quad (3.11)$$

approximiert. Dabei bezeichnen $g_i^{+/-}$ Geraden von der Röntgenquelle zur rechten bzw. linken Grenze des zum i-ten Messwert gehörenden Pixels und d_d dessen Breite. Diese Näherung definiert die Koeffizientenmatrix δM_{ij} für die differentielle Vorwärtsprojektion.

Die Likelihood-Funktion für die Bildkoeffizienten ergibt sich aus Gleichung 2.52 zu

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon} | \mathbf{n}) = \prod_{i,s} p_{N_{i,s}}(n_{i,s} | \bar{N}_{i,s}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon})) \quad (3.12)$$

mit $p_{N_{i,s}}(n_{i,s} | \bar{N}_{i,s})$ der Wahrscheinlichkeit, bei einem Erwartungswert von $\bar{N}_{i,s}$ die Intensität $N_{i,s} = n_{i,s}$ zu messen. Für den Fall eines photonenzählenden Detektors folgen die gemessenen Intensitäten jeweils einer Poisson-Verteilung. Folglich gilt

$$p_{N_{i,s}}(n_{i,s} | \bar{N}_{i,s}) = \frac{\bar{N}_{i,s}^{n_{i,s}}}{n_{i,s}!} \cdot \exp[-\bar{N}_{i,s}] . \quad (3.13)$$

Die Log-Likelihood-Funktion lautet dann

$$l(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon} | \mathbf{n}) = \sum_{i,s} (n_{i,s} \cdot \ln \bar{N}_{i,s} - \bar{N}_{i,s} - \ln n_{i,s}!) \quad (3.14)$$

wobei der letzte Term in jedem Summanden unabhängig von den Bildkoeffizienten ist und daher in der Maximierung keine Rolle spielt.

3.1.2 Optimierung

Zur Bestimmung des Maximum-Likelihood-Schätzers für die Bildkoeffizienten muss Gleichung 3.14 maximiert werden. Zu diesem Zweck wird ein konjugiertes Gradientenverfahren (CG für *conjugate gradient*) verwendet. Diese numerische Methode ähnelt dem normalen Gradientenverfahren, das auch als Verfahren des steilsten Abstiegs bekannt ist, und dient der numerischen Lösung von linearen Gleichungssystemen $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ im \mathbb{R}^n . Im Folgenden soll dieses Verfahren motiviert und erläutert werden.

Das Lösen eines linearen Gleichungssystems ist äquivalent zur Bestimmung des Extremums einer quadratischen Funktion

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot \tilde{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \cdot \mathbf{x} + c, \quad (3.15)$$

da für deren Gradienten

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \underbrace{\frac{1}{2} (\tilde{\mathbf{A}}^T + \tilde{\mathbf{A}})}_{=\mathbf{A}} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} \quad (3.16)$$

gilt. Für den Fall, dass $\tilde{\mathbf{A}}$ symmetrisch und positiv definit ist, besitzt f ein globales Minimum \mathbf{x}^* (Shewchuk, 1994).

Das Verfahren des steilsten Abstiegs startet zur Minimierung einer Funktion f an einem beliebigen Punkt $\mathbf{x}_{(0)}$. Von dort aus wird $f(\mathbf{x})$ in Richtung des negativen Gradienten minimiert. Das heißt, in jedem Schritt i ist eine Liniensuche

$$f(\mathbf{x}_{(i+1)}) = \min_{\alpha > 0} f(\mathbf{x}_{(i)} - \alpha \nabla f(\mathbf{x}_{(i)})) \quad (3.17)$$

durchzuführen. Nachfolgend von Bedeutung sind die Definitionen des Fehlers $\mathbf{e}_{(i)} = \mathbf{x}_{(i)} - \mathbf{x}^*$, welcher angibt, wie weit man von der Lösung entfernt ist, und des Residuums $\mathbf{r}_{(i)} = -\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_{(i)} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_{(i)}$. Letzteres stimmt mit der Richtung des steilsten Abstiegs überein. In der Liniensuche minimiert α dann f wenn

$$0 = \frac{d}{d\alpha} f(\mathbf{x}_{(i)} + \alpha \mathbf{r}_{(i)}) = \nabla f(\mathbf{x}_{(i+1)})^T \cdot \mathbf{r}_{(i)}. \quad (3.18)$$

gilt, das heißt, an dem Punkt, wo der Gradient von f senkrecht zum Residuum steht. Aus dieser Bedingung kann die Schrittänge α bestimmt werden (Shewchuk, 1994). Zusammenfassend wird im Verfahren des steilsten Abstiegs wie folgt iteriert:

$$\mathbf{r}_{(i)} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}_{(i)}, \quad (3.19)$$

$$\alpha_{(i)} = \frac{\mathbf{r}_{(i)}^T \cdot \mathbf{r}_{(i)}}{\mathbf{r}_{(i)}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{r}_{(i)}}, \quad (3.20)$$

$$\mathbf{x}_{(i+1)} = \mathbf{x}_{(i)} + \alpha_{(i)} \mathbf{r}_{(i)}. \quad (3.21)$$

Ein Nachteil des gewöhnlichen Gradientenverfahrens ist, dass man sich häufig in der Situation befindet, dass eine Liniensuche in die gleiche Richtung verläuft wie bereits in früheren Iterationen. Die CG-Methode umgeht dieses Problem. Hier verläuft in jede Richtung nur exakt ein Schritt. Dazu wird f in eine andere Richtung $\mathbf{d}_{(i)}$ als in die durch das Residuum $\mathbf{r}_{(i)}$ vorgegebene minimiert. Diese neuen Suchrichtungen sind paarweise konjugiert bzw. \mathbf{A} -orthogonal, das heißt es gilt

$$\mathbf{d}_{(i)}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{d}_{(j)} = 0 \quad \forall i \neq j. \quad (3.22)$$

Sie können mittels des Gram-Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahrens aus den Residuen bestimmt werden (Shewchuk, 1994). Mit $\mathbf{r}_{(i)} = -\mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_{(i)}$ folgt, dass der Fehler $\mathbf{e}_{(i)}$ stets im Unterraum

$$\mathcal{D}_{(i)} = \text{span} \{ \mathbf{d}_{(i)}, \mathbf{d}_{(i+1)}, \dots, \mathbf{d}_{(n-1)} \} \quad (3.23)$$

liegt. Das Verfahren terminiert damit nach maximal n Schritten.

Das CG-Verfahren kann jedoch nicht nur auf quadratische Formen, sondern zur Minimierung beliebiger, stetiger Funktionen f angewendet werden. Die einzige Voraussetzung hierfür ist die Berechenbarkeit des Gradienten ∇f . In dieser sogenannten nichtlinearen Variante ergeben sich einige Änderungen im Vergleich zum linearen Verfahren. So ist die Berechnung der Schrittänge α deutlich komplizierter. Zudem verliert der Begriff der konjugierten Suchrichtungen an Bezug und Bedeutung, je mehr die Objektfunktion von einer quadratischen Funktion abweicht. Zur Berechnung der konjugierten Richtungen existieren daher unterschiedliche Formeln (Shewchuk, 1994). Das in dieser Arbeit verwendete nichtlineare CG-Verfahren ist die Methode *fmin_cg* aus der Bibliothek *SciPy* (Jones et al., 2001) für die Programmiersprache *Python* (Van Rossum & Drake, 2011). Die konjugierten Suchrichtungen werden dabei mit der Methode nach Polak & Ribiere (1969) berechnet. Die Struktur des gesamten Verfahrens ist in Pseudocode-Notation in Algorithmus 3.1 dargestellt. Der Ausdruck in Zeile 12 führt quasi zu einem Neustart des CG-Verfahrens, wenn die A-Orthogonalität der Suchrichtungen verloren geht, da für einen negativen Wert von β_{PR} die darauf folgende Suchrichtung wieder mit \mathbf{r} übereinstimmt. Des Weiteren ist es für allgemeine Funktionen nicht immer möglich, die Nullstellen von $\nabla f(\mathbf{x})^T \cdot \mathbf{d}$ effizient zu berechnen. Daher wird zur Bestimmung der Schrittänge eine inexakte Liniensuche verwendet, welche α iterativ variiert, bis die starken Wolfe-Bedingungen (Nocedal & Wright, 2006) erfüllt sind. Die Methode terminiert, falls die maximale Anzahl an Iterationen i_{\max} erreicht ist oder sobald die Norm des Gradienten den vorgegebenen Schwellenwert g_{tol} unterschreitet.

Algorithmus 3.1 Repräsentation der Methode *fmin_cg* in Form eines Pseudocodes

```

1:  $i \leftarrow 0$                                 ▷ Initialisierung der Schleifenvariable
2:  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}_{(0)}$                   ▷ Übergabe der Startwerte
3:  $\mathbf{r} \leftarrow -\nabla f(\mathbf{x})$             ▷ Berechnung des Gradienten
4:  $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{r}$                         ▷ Initialisierung der Suchrichtung
5:  $g_{\text{norm}} \leftarrow \max(|\mathbf{r}|)$         ▷ Maximumsnorm des Gradienten
6: while  $i < i_{\max}$  and  $g_{\text{norm}} > g_{\text{tol}}$  do
7:    $\alpha \leftarrow \text{wolfe.line\_search}(f, \nabla f, \mathbf{x}, \mathbf{d})$       ▷ Inexakte Liniensuche über die starken
   Wolfe-Bedingungen
8:    $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \alpha \mathbf{d}$           ▷ Update des Lösungsvektors
9:    $\mathbf{r}_{\text{neu}} \leftarrow -\nabla f(\mathbf{x})$ 
10:   $\Delta_r \leftarrow \mathbf{r}_{\text{neu}} - \mathbf{r}$ 
11:   $\beta_{PR} \leftarrow \mathbf{r}_{\text{neu}}^T \cdot \Delta_r / \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r}$     ▷ Polak-Ribiere-Formel zur Berechnung der konjugierten
   Suchrichtungen
12:   $\beta \leftarrow \max\{0, \beta_{PR}\}$ 
13:   $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r}_{\text{neu}}$ 
14:   $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{r} + \beta \mathbf{d}$                       ▷ Update der Suchrichtung
15:   $g_{\text{norm}} \leftarrow \max(|\mathbf{r}|)$ 
16:   $i \leftarrow i + 1$ 
17: end while

```

Zur Anwendung des CG-Verfahrens auf die im vorigen Abschnitt eingeführte Log-Likelihood-Funktion muss deren Gradient bekannt sein. Für die Ableitung von Gleichung 3.14 gilt

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} l = \sum_{i,s} \left(\frac{n_{i,s}}{\bar{N}_{i,s}} - 1 \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_j} \bar{N}_{i,s}. \quad (3.24)$$

Mit $\theta_j \in \{\mu_j, \tilde{\delta}_j, \epsilon_j\}$ unterscheidet sich der Gradient je nach Art des Bildkoeffizienten. Mit Gleichung 3.1 und 3.9, 3.11 bzw. 3.10 folgt:

$$\frac{\partial}{\partial \mu_j} l = \sum_{i,s} (\bar{N}_{i,s} - n_{i,s}) \cdot M_{ij}, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\delta}_j} l = \sum_{i,s} \left(1 - \frac{n_{i,s}}{\bar{N}_{i,s}} \right) N_i^0 T_i V_i^0 D_i \sin(\Phi_{i,s}^0 + \Delta\Phi_i) \cdot \delta M_{ij}, \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon_j} l = \sum_{i,s} \left(1 - \frac{n_{i,s}}{\bar{N}_{i,s}} \right) N_i^0 T_i V_i^0 D_i \cos(\Phi_{i,s}^0 + \Delta\Phi_i) \cdot M_{ij}. \quad (3.27)$$

Da *fmin_cg* zur Minimierung von Funktionen konzipiert ist, wird die Methode entsprechend auf die negative Log-Likelihood-Funktion angewendet. Verschiedene Untersuchungen zum Konvergenzverhalten der hier vorgestellten numerischen Optimierung finden sich in Abschnitt 4.2 dieser Arbeit.

3.2 Simulationsumgebung *cxi*

Zur Untersuchung von Rekonstruktionsalgorithmen können in der Röntgenbildgebung numerische Simulationen verwendet werden. Zum einen ermöglichen sie die Erzeugung von wirklichkeitsnahen Messdaten unter idealisierten Bedingungen. Zum anderen tragen sie zu einem besseren Verständnis komplexer physikalischer Prozesse bei und ermöglichen somit eventuell eine Verbesserung deren Modellierung. In dieser Arbeit wurde dazu die von André Ritter entwickelte Simulationsumgebung *cxi* (Ritter et al., 2014b) verwendet. In diesem Abschnitt werden die Grundlagen der Implementierung von *cxi* und die Erzeugung von Rohdaten für die Computertomographie skizziert.

Die Simulationsumgebung beruht auf der skalaren Beugungstheorie (Paganin, 2006) und ermöglicht die Berechnung von Wellenfeldern in einem Talbot(-Lau)-Interferometer. Die rechnerisch aufwendigen Operationen sind über die in C++ geschriebene Kernbibliothek *libcxi* implementiert. Um daneben eine comfortable Programmierschnittstelle zur Verfügung zu stellen, ist die Kernbibliothek in das Python-Erweiterungsmodul *_cxi* exportiert, welches seinerseits als Basis für das Python-Paket *cxi* dient. Letzteres stellt Werkzeuge zur Verfügung, die die Benutzung der Funktionen der Kernbibliothek in den gängigen simulativen Untersuchungen vereinfachen.

Wellenfelder werden innerhalb von *cxi* stets nur über ihre spektralen Komponenten behandelt. Diese werden als ein zweidimensionales Array aus komplexen Zahlen implementiert, was ihrer Abtastung auf einer rechteckigen Fläche im dreidimensionalen Raum entspricht. Zur Berechnung der Propagation eines somit diskretisierten Wellenfeldes kommt die sogenannte Operatortheorie

der Bildgebung (OTI für *operator theory of imaging*) zum Einsatz. Dabei wird das betrachtete bildgebende System in mehrere Untersysteme zerlegt. Jedes dieser Untersysteme hat eine Eintritts- und eine Austrittsfläche. Das Wellenfeld Ψ_{aus} auf der Austrittsfläche berechnet sich über

$$\Psi_{\text{aus}} = \mathcal{O}\Psi_{\text{ein}} \quad (3.28)$$

aus demjenigen auf der Eintrittsfläche, mit \mathcal{O} dem Operator des Teilsystems. Im gesamten bildgebenden System dient die Ausgabe eines Untersystems dann als Eingabe für das jeweils nächste in Propagationsrichtung.

Eine wichtige Operation für die Talbot(-Lau)-Interferometrie ist die Wellenausbreitung im freien Raum. Für ein paraxiales Wellenfeld wird diese näherungsweise durch die Fresnelpropagation beschrieben. Der zugehörige Operator ist gegeben durch

$$\mathcal{D}_{\Delta}^{(F)} = \exp[ik\Delta]\mathcal{FT}^{-1} \exp\left[-i\frac{\Delta}{2k}(k_x^2 + k_y^2)\right]\mathcal{FT}, \quad (3.29)$$

mit k_x und k_y den Komponenten des Wellenvektors in der Eintrittsfläche. Der Einfluss etwaiger Objekte im Strahlengang, wie beispielsweise die Gitter oder das Messobjekt selbst, kann mittels Projektionsnäherung – siehe Gleichung 2.10 für die explizite Form des Operators – berechnet werden. Zur Modellierung der Messobjekte steht eine Vielzahl an geometrischen Körpern zur Verfügung, darunter zum Beispiel Kugeln, Ellipsoide oder Polyeder. Diese können frei miteinander kombiniert und verschachtelt werden. Jedem geometrischen Objekt muss dabei ein Material zugewiesen werden. Die Simulationsumgebung hat Zugriff auf vorab berechnete Tabellen, welche die jeweiligen Werte des zugehörigen komplexen Brechungsindex für bestimmte Photonenenergien enthalten. Mittels Interpolation werden daraus die für die aktuelle Simulation benötigten Werte bestimmt. Die in Gleichung 2.10 auftretenden Linienintegrale werden dann mit Hilfe von Raytracing-Algorithmen berechnet.

Die durchgeführten Schritte zur Erzeugung von simulierten Rohdaten für die Computertomographie sind nachfolgend aufgeführt:

1. Initialisierung einer ebenen Welle $\Psi(x, y, z_0)$ in der Ebene $z = z_0$ über der Fläche eines Detektorpixels. Dabei wird das Wellenfeld einen bestimmten Abstand d_{margin} über die Pixelgrenzen hinaus betrachtet, um dort später gültige Werte zu erhalten. Wenn nicht explizit angegeben, wurde in der Simulation die y-Koordinate vernachlässigt. Dies reduziert den Rechenaufwand und impliziert eine Homogenität des Aufbaus und des Messobjekts in ebendiese Richtung.
2. Normalisierung des Wellenfeldes über die Pixelbreite bzw. -fläche.
3. Berechnung der Transmission durch das Messobjekt mittels Projektionsnäherung und Rückgabe des Wellenfeldes in der G1-Ebene. Für die Simulation der Objektmessung wird dem entsprechenden Operator das Messobjekt in Form eines vorab erstellten *Dictionary* übergeben.
4. Berechnung der Transmission durch das Beugungsgitter G1.
5. Freifeldpropagation durch Anwendung des Fresnel-Operators $\mathcal{D}_{z_T}^{(F)}$ (siehe Gleichung 3.29) bis zur Ebene $z = z_{G2}$ des Analysatorgitters G2.
6. Berechnung der Intensität $I(x, z_{G2}) = |\Psi(x, z_{G2})|^2$.

7. Simulation des Einflusses von Röntgenquelle und Quellgitter G0. Dies gelingt durch die Faltung der Intensitätsverteilung bei $z = z_{G2}$ mit der durch G0 transmittierten Quellverteilung. Letztere wird durch eine Gaußkurve mit Varianz σ^2 modelliert.
8. Berechnung der Transmission durch das Analysatorgitter G2 und Integration der Intensität über die Pixelbreite bzw. -fläche. Ausgeführt für die verschiedenen Positionen von G2 liefert dies die Phasesteppingkurve.
9. Iteration der Schritte 1. bis 8. über alle Detektorpixel und Projektionswinkel.

In allen Simulationen wurden stets ideal absorbierende bzw. phasenschiebende Gitter mit einem Tastverhältnis von 1/2 verwendet.

Für die Simulation von polychromatischen Wellenfeldern muss das Spektrum der Röntgenquelle diskretisiert werden. Die einzelnen spektralen Komponenten werden daraufhin separat und wie oben beschrieben simuliert, die resultierenden Intensitäten werden anschließend mit der entsprechenden spektralen Leistung gewichtet und aufsummiert.

4 Untersuchungen und Ergebnisse

Dieses Kapitel beinhaltet die im Rahmen dieser Masterarbeit durchgeföhrten Untersuchungen. Deren Ergebnisse werden vorgestellt und diskutiert.

In Abschnitt 4.1 werden verschiedene Möglichkeiten behandelt, die Koeffizientenmatrizen für die Vorwärtsprojektion zu berechnen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf deren Implementierung in die bestehende Rekonstruktionsumgebung. Anschließend wird in Abschnitt 4.2 die iterative Rekonstruktion hinsichtlich des Konvergenzverhaltens und der Bildqualität untersucht. Dabei werden die verschiedenen Projektoren verglichen. Abschnitt 4.3 behandelt die Erzeugung von geeigneten Startwerten für die Rekonstruktion sowie den Einsatz von Regularisierungstechniken. Abschließend wird in Abschnitt 4.4 versucht, eine Beschreibung für das Dunkelfeld durch Objektanten zu finden und in die Rekonstruktionsumgebung zu integrieren.

4.1 Projektoren für die Rekonstruktion

Die Projektoren in der iterativen CT-Rekonstruktion geben an, wie stark eine Bildbasisfunktion, das heißt ein Element des diskretisierten Schnittbildes, zu einem gemessenen Intensitätswert beiträgt. Es existiert eine Vielzahl an Möglichkeiten, diese Beiträge abzuschätzen und zu berechnen. Sie sind zunächst mit der Wahl der Bildbasisfunktionen verknüpft. Die zwei in dieser Arbeit betrachteten Varianten sind die bereits angesprochenen Voxel (siehe Gleichung 3.8) und sphärisch symmetrische Basisfunktionen in Form von sogenannten verallgemeinerten Kaiser-Bessel-Fensterfunktionen. Letztere sind auch unter der Bezeichnung Blobs geläufig und wurden zuerst von Lewitt (1990) zur digitalen Bilddarstellung vorgeschlagen. Eine Klasse von Projektoren sind die strahlbasierten (englisch *ray-driven*) Methoden. Sie verfolgen Strahlen von der Röntgenquelle zum jeweiligen Detektorpixel. Der Beitrag einer Bildbasisfunktion ergibt sich in diesem Fall aus ihrem Linienintegral entlang des Strahls (vgl. Gleichung 3.7). In der ursprünglichen Implementierung der SIR wird mit der Methode nach Siddon ein solcher strahlbasierter Projektor verwendet. Im Verlauf dieser Arbeit wurde zudem eine strahlbasierte Methode auf Basis von Blobs implementiert. Mit dem sogenannten *distance-driven* Projektor nach De Man & Basu (2002) wurde daneben noch eine alternative Methode auf Voxelbasis hinzugefügt. In diesem Abschnitt werden die Grundlagen und die Umsetzung der drei Projektoren behandelt.

An dieser Stelle sei erwähnt, dass sich verschiedene Projektoren in ihrem Rechenaufwand deutlich unterscheiden können. Es wird zwar auf einige Punkte eingegangen, die es hinsichtlich einer effizienten Implementierung zu beachten gilt, jedoch fällt ebendiese nicht in den Rahmen dieser Arbeit. Das Hauptaugenmerk liegt vielmehr auf der Approximation der physikalischen Größen, wie zum Beispiel der Transmission, und der erzielten Bildqualität. Für ausführlichere Diskussionen der jeweiligen Rechenzeit sei auf die referenzierten Quellen verwiesen. So werden in dieser Arbeit die von null verschiedenen Einträge der dünnbesetzten Koeffizientenmatrizen auch

vorab berechnet und abgespeichert, obwohl dies für die Datenmengen heutiger CT-Scanner, vor allem im Hinblick auf Anwendungen in der dreidimensionalen Bildgebung via Mehrschicht-CT, nicht praktikabel ist (Long et al., 2010). Letztere erfordern eine dynamische Berechnung der Projektoren in jeder Iteration. Der benötigte Rechenaufwand gewinnt also mit zunehmender Anzahl der Iterationen an Bedeutung.

4.1.1 Methode nach Siddon

Die Methode nach Siddon erlaubt eine effiziente Berechnung der Linienintegrale durch ein Gitter von Voxel. Da die Punktfunktion des Bildes über ein Voxel konstant ist, reduziert sich die Berechnung auf die Bestimmung der Schnittlänge einer Geraden mit den rechteckigen Bilbasisfunktionen. Das Linienintegral ergibt sich dann zu

$$p = \sum_{u=1}^{N_x-1} \sum_{v=1}^{N_z-1} l(u, v) f(u, v) \quad (4.1)$$

mit f dem Wert und l der Schnittlänge eines Voxels. Gleichung 4.1 suggeriert, dass der Rechenaufwand mit der Gesamtzahl der Voxel skaliert. Angenommen es sei $N_x - 1 = N_z - 1 = n$, so wäre er bei der Bestimmung eines zweidimensionalen Schnittbildes proportional zu n^2 , in der 3D-Tomographie sogar zu n^3 . Durch die Beschreibung der Voxel über die Schnittpunkte von untereinander jeweils abstandsgleichen Normalen bezüglich der Koordinatenachsen, skaliert der Algorithmus von Siddon jedoch linear mit der Größe des CT-Arrays, das heißt mit n . Anstelle der Schnittpunkte mit den Voxeln bestimmt man die Schnittpunkte der Geraden mit diesen Linien bzw. Ebenen. Da letztere den gleichen Abstand zueinander haben, genügt es, jeweils den Schnittpunkt mit der ersten Linie bzw. Ebene zu berechnen. Die übrigen ergeben sich rekursiv. Die folgende Beschreibung der einzelnen Schritte des Algorithmus folgt der Argumentation von Siddon (1985) und beschränkt sich auf den in dieser Arbeit betrachteten Fall der zweidimensionalen Tomographie. Die Gerade, entlang derer das Linienintegral berechnet wird, wird zunächst folgendermaßen parametrisiert:

$$\begin{pmatrix} x \\ z \end{pmatrix}(\alpha) = \begin{pmatrix} x_1 \\ z_1 \end{pmatrix} + \alpha \cdot \begin{pmatrix} x_2 - x_1 \\ z_2 - z_1 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Dabei sind (x_1, z_1) bzw. (x_2, z_2) die Koordinaten des Start- bzw. Endpunkts der Geraden. Ferner ist zu beachten, dass im Vergleich zu Abschnitt 2.4 das Koordinatensystem zur Parametrisierung des Schnittbildes verändert wurde, sodass es dem aus der Simulation mit *cxi* entspricht. Die darauf folgenden Schritte sind:

1. Berechnung der Parameterwerte α_{\min} und α_{\max} bei Eintritt und Austritt der Geraden.
Im Falle eines CT-Array aus $(N_x - 1) \times (N_z - 1)$ Voxel gilt für die parallelen Linien

$$X(u) = X(1) + (u - 1) \cdot d_x. \quad (4.3)$$

Dabei ist d_x der jeweilige Abstand der Linien. Für die Normalen zur z-Achse ergibt sich ein analoger Ausdruck. Über

$$\alpha_x(u) = \frac{X(u) - x_1}{x_2 - x_1} \quad (4.4)$$

lassen sich dann die Parameter $\alpha_x(1)$ und $\alpha_x(N_x)$ für den Schnittpunkt mit der ersten bzw. letzten Linie bestimmen. Unter der Annahme, dass Start- und Endpunkt jeweils außerhalb des CT-Arrays liegen, erhält man daraus den Eintritts- und Austrittsparameter zu

$$\alpha_{\min} = \max\{\min\{\alpha_x(1), \alpha_x(N_x)\}, \min\{\alpha_z(1), \alpha_z(N_z)\}\}, \quad (4.5)$$

$$\alpha_{\max} = \min\{\max\{\alpha_x(1), \alpha_x(N_x)\}, \max\{\alpha_z(1), \alpha_z(N_z)\}\}. \quad (4.6)$$

2. Bestimmung der Indizes $\{u_{\min}, \dots, u_{\max}\}$ und $\{v_{\min}, \dots, v_{\max}\}$ der Linien, für deren Schnittpunkte mit der Geraden der Parameter α im Intervall $[\alpha_{\min}, \alpha_{\max}]$ liegt. Für $x_2 \geq x_1$ gilt:

$$u_{\min} = N_x - [X(N_x) - \alpha_{\min} \cdot (x_2 - x_1) - x_1] / d_x, \quad (4.7)$$

$$u_{\max} = 1 + [x_1 + \alpha_{\max} \cdot (x_2 - x_1) - X(1)] / d_x. \quad (4.8)$$

Im Fall von $x_2 < x_1$ vertauschen sich die Rollen von α_{\min} und α_{\max} (analog für z).

3. Berechnung der Parameter $\alpha_x(u)$ für $u \in \{u_{\min}, \dots, u_{\max}\}$ (analog für z). Die Rekursionsformel lautet:

$$\alpha_x(u) = \alpha_x(u-1) + \frac{d_x}{x_2 - x_1}. \quad (4.9)$$

Jedes Element der somit erstellten Menge $\{\alpha_x\} = \{\alpha_x(u_{\min}), \dots, \alpha_x(u_{\max})\}$ entspricht einem Schnittpunkt der betrachteten Gerade mit einer der zur x-Achse orthogonalen Linien (analog für z).

4. Zusammenfügen der Mengen $\{\alpha_x\}$ und $\{\alpha_z\}$ zu $\{\alpha\}$ und Anordnung aller Elemente in aufsteigender Reihenfolge. Die Differenz aus je zwei benachbarten Elementen ist dann proportional zur Schnittlänge mit einem bestimmten Voxel.
5. Berechnung der Schnittlängen. Sei $\alpha(m)$ das m-te Element aus der Menge $\{\alpha\}$. Mit d_{12} dem Abstand von Start- und Endpunkt folgt für die Distanz zwischen den Schnittpunkten m und $m+1$:

$$l(m) = d_{12} \cdot (\alpha(m+1) - \alpha(m)). \quad (4.10)$$

6. Bestimmung der Voxelindizes $u(m)$ und $v(m)$ zu jeder Schnittlänge. Es gilt

$$u(m) = 1 + \left[x_1 + \frac{\alpha(m+1) + \alpha(m)}{2} \cdot (x_2 - x_1) - X(1) \right] / d_x. \quad (4.11)$$

Für $v(m)$ ergibt sich ein analoger Ausdruck in z .

7. Berechnung des Linienintegrals. Die Summe über alle Voxel aus Gleichung 4.1 wird dabei durch eine Summe über die Schnittpunkte aus der Menge $\{\alpha\}$ ersetzt. Es ergibt sich

$$p = \sum_{m=1}^{|\{\alpha\}|-1} l(m) \cdot f(u(m), v(m)) \quad (4.12)$$

mit $l(m)$ aus Gleichung 4.10 und den Indizes $u(m)$ bzw. $v(m)$ aus Gleichung 4.11 bzw. deren Pendant in z .

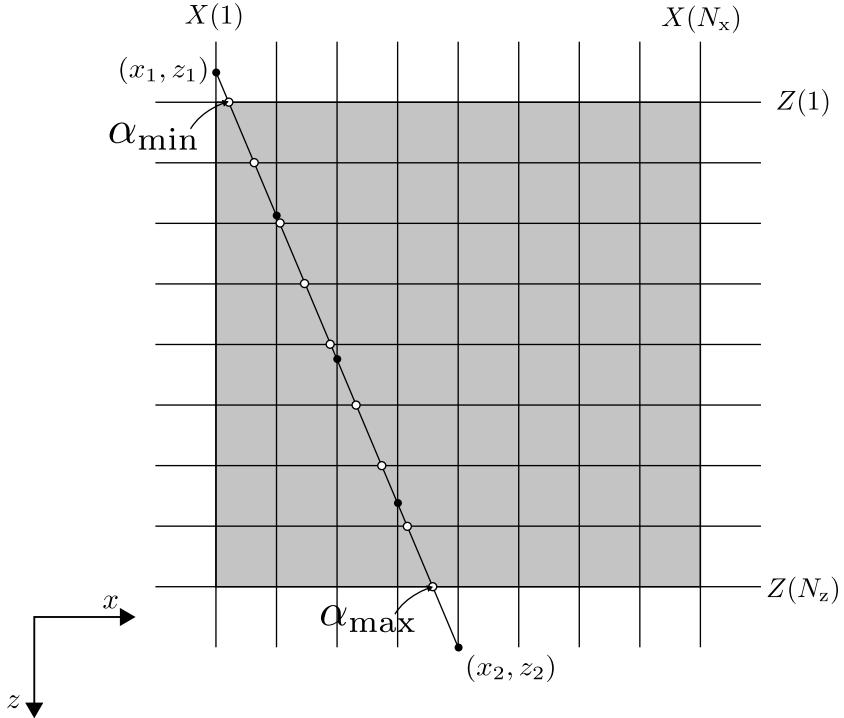


Abbildung 4.1: Darstellung der wichtigsten Größen der Methode nach Siddon. Die Parameter α_{\min} und α_{\max} bei Eintritt und Austritt der Gerade sind eingezeichnet. Die Schnittpunkte mit den Normalen zur x -Achse (ausgefüllte Kreise) und zur z -Achse (offene Kreise) sind markiert. Der Abstand von je zwei Schnittpunkten entspricht der Schnittlänge der Geraden mit einem Voxel.

Die wichtigsten Größen des Algorithmus sind in Abbildung 4.1 am Beispiel eines bestimmten Linienintegrals dargestellt.

Für die Implementierung in die Rekonstruktionsumgebung wird die Projektionsgerade nicht über Start- und Endpunkt festgelegt. Stattdessen werden der Projektionswinkel γ und der Zielpunkt ξ auf dem Detektor vorgegeben. Die Parametrisierung erfolgt direkt über die Länge η . In dem verwendeten Koordinatensystem ergibt sie sich zu

$$\begin{pmatrix} x \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\gamma) \\ -\sin(\gamma) \end{pmatrix} \cdot \xi + \begin{pmatrix} \sin(\gamma) \\ \cos(\gamma) \end{pmatrix} \cdot \eta. \quad (4.13)$$

Auf Schritt 2 des Algorithmus wird verzichtet. Stattdessen enthalten die in Schritt 3 berechneten Mengen $\{\eta_x\}$ und $\{\eta_z\}$ die Schnittpunkte mit allen, das CT-Array beschreibenden Linien. Die Schnittpunkte werden in einer Klasse implementiert, die neben dem Wert des Parameters η zusätzlich den Index der jeweiligen Normalen speichert. Die Schritte 4 bis 6 werden simultan ausgeführt. Dabei wird durch die beiden Mengen $\{\eta_x\}$ und $\{\eta_z\}$ von Schnittpunkten iteriert. Ab Werten größer gleich η_{\min} wird die Differenz l aus dem aktuellen Schnittpunkt η_{current} und demjenigen mit dem nächsthöheren Wert η_{next} berechnet und in die Koeffizientenmatrix M_{ij} eingetragen. Der Index i ergibt sich aus dem Projektionswinkel γ und dem Zielpunkt ξ . Den

Index j der Matrix erhält man via

$$j = 1 + (u - 1) + (v - 1) \cdot (N_z - 1). \quad (4.14)$$

aus den Indizes u und v der jeweils letzten Schnittpunkte in x- bzw. z-Richtung vor η_{next} .

4.1.2 Distance-driven Projektor

Eine alternative Möglichkeit, die Projektionen eines Gitters von Voxeln zu berechnen, bietet der von De Man & Basu (2002) vorgeschlagene *distance-driven* Projektor. Dabei werden die Beiträge der Voxel zu einer Projektion nicht über ihre Linienintegrale abgeschätzt. Stattdessen kann der Prozess der Projektion als eine Wandlung der Abtastung aufgefasst werden. Dazu werden die Voxelgrenzen aus einer Zeile des Schnittbildes und die Pixelgrenzen des Detektors auf eine Gerade projiziert. Die Distanz zwischen zwei benachbarten projizierten Grenzen entspricht dem Überlapp je eines Detektorpixels und eines Bildvoxels, welcher den Beitrag des jeweiligen Voxels zum Messwert des jeweiligen Pixels definiert. Im Folgenden bezeichnet ξ die Koordinate entlang der betrachteten Detektorzeile, $\xi_{i-}^{(p)}$ bzw. $\xi_{i+}^{(p)}$ die projizierte linke bzw. rechte Grenze des zum i -ten Messwert gehörenden Pixels – dessen Mittelpunkt wird mit ξ_i notiert – und $b_{j-}^{(p)}$ bzw. $b_{j+}^{(p)}$ die projizierte linke bzw. rechte Grenze des Voxels mit Index j . Für die Projektion der Punktfunktion f folgt (De Man & Basu, 2004)

$$p_i = \sum_j f_j \cdot \underbrace{\left| [\xi_{i-}^{(p)}, \xi_{i+}^{(p)}] \cap [b_{j-}^{(p)}, b_{j+}^{(p)}] \right|}_{=M_{ij}}. \quad (4.15)$$

Dieser Ausdruck ersetzt Gleichung 3.7 der strahlbasierten Verfahren. Die Methode weist einen sequenziellen Speicherzugriff auf, was schnelle Implementierungen ermöglicht. Zudem vermeidet sie Artefakte von voxel- bzw. strahlbasierten Projektoren (De Man & Basu, 2002).

Die folgenden Schritte fassen die Implementierung in der Rekonstruktionsumgebung zusammen (vgl. Abbildung 4.2):

1. Projektion der Voxel- und Pixelgrenzen auf eine gemeinsame Gerade. Die Mittelpunkte (x_j, z_j) der Voxel und ξ_i der Detektorpixel werden dabei übergeben. Aus den jeweiligen Breiten $d_{x/z}$ und d_d kann die Lage der Grenzen $b_{j+/-}$ bzw. $\xi_{i+/-}$ bestimmt werden. Für Projektionswinkel $\gamma \in [-45^\circ, 45^\circ] \cup [135^\circ, 225^\circ]$ werden die Grenzen auf die x -Achse projiziert. Mit Gleichung 4.13 folgt:

$$b_{j+/-}^{(p)} = b_{j+/-} - z_j \cdot \tan(\gamma), \quad (4.16)$$

$$\xi_{i+/-}^{(p)} = \frac{\xi_{i+/-}}{\cos(\gamma)}. \quad (4.17)$$

Für Projektionswinkel außerhalb der oben angegebenen Intervalle erfolgt die Projektion auf die z -Achse. Hier gilt:

$$b_{j+/-}^{(p)} = b_{j+/-} - x_j \cdot \tan(\gamma), \quad (4.18)$$

$$\xi_{i+/-}^{(p)} = -\frac{\xi_{i+/-}}{\sin(\gamma)}. \quad (4.19)$$

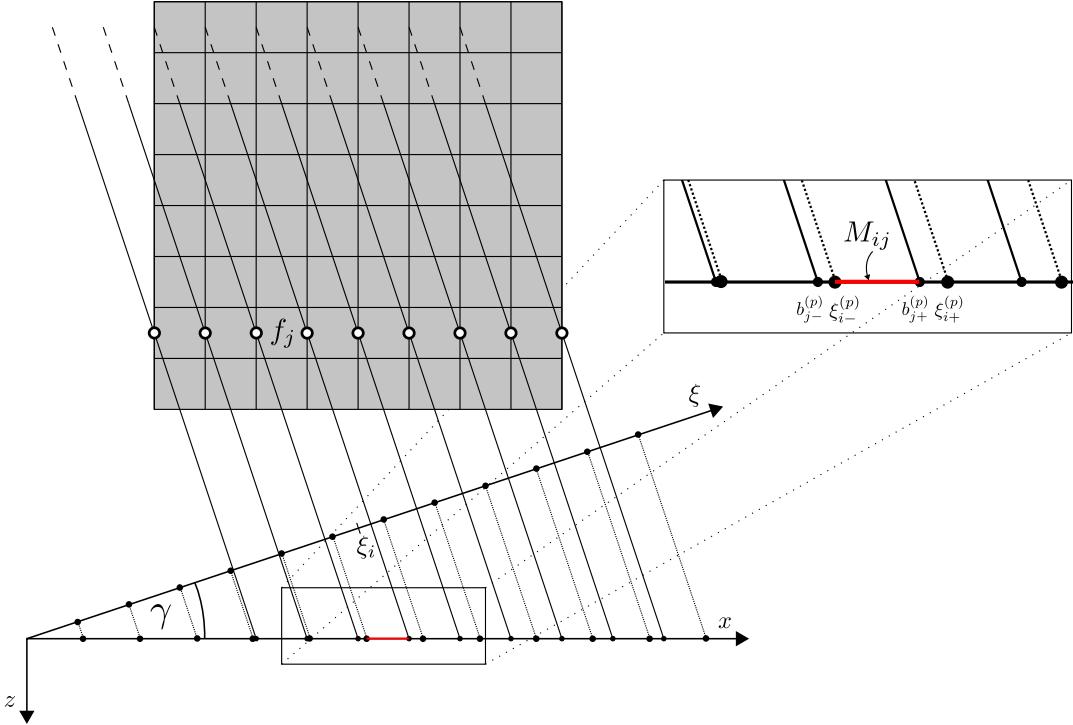


Abbildung 4.2: Prinzip des distance-driven Projektors. Die Grenzen der Voxel aus einer Bildzeile und die Grenzen der Detektorpixel werden auf die x -Achse abgebildet. Der Überlapp zweier dadurch definierter Intervalle ist am Beispiel des j -ten Voxels und des Detektorpixels bei ξ_i markiert und definiert den Eintrag M_{ij} der Koeffizientenmatrix.

2. Berechnung des Überlapps von Voxel und Detektorpixel. Dazu werden für alle Voxel und alle Pixel des Detektors die x -Werte ihrer projizierten Grenzen bestimmt und diese jeweils paarweise sortiert. Am Beispiel des Voxels j und des Detektorpixels bei ξ_i gilt:

$$b_{j,\min}^{(p)}, b_{j,\max}^{(p)} = \min(b_{j-}^{(p)}, b_{j+}^{(p)}), \max(b_{j-}^{(p)}, b_{j+}^{(p)}), \quad (4.20)$$

$$\xi_{i,\min}^{(p)}, \xi_{i,\max}^{(p)} = \min(\xi_{i-}^{(p)}, \xi_{i+}^{(p)}), \max(\xi_{i-}^{(p)}, \xi_{i+}^{(p)}). \quad (4.21)$$

Damit ergibt sich der Überlapp – und folglich der Eintrag M_{ij} der Koeffizientenmatrix – zu

$$\begin{aligned} M_{ij} &= |[\xi_{i-}^{(p)}, \xi_{i+}^{(p)}] \cap [b_{j-}^{(p)}, b_{j+}^{(p)}]| \\ &= \max(0, \min(b_{j,\max}^{(p)}, \xi_{i,\max}^{(p)}) - \max(b_{j,\min}^{(p)}, \xi_{i,\min}^{(p)})). \end{aligned} \quad (4.22)$$

3. Iteration der Schritte 1. und 2. über alle Projektionswinkel γ und Auffüllen der Koeffizientenmatrix. Dabei werden lediglich die von null verschiedenen Einträge zusammen mit ihren Indizes gespeichert.

Für die differentielle Projektion des Phasenschubs wird die Koeffizientenmatrix, wie oben beschrieben, für virtuelle Pixel berechnet, deren Mittelpunkte sich an der Position der eigentlichen Pixelgrenzen befinden. Die Differenz zweier solcher Matrizen gemäß Gleichung 3.11 liefert δM_{ij} .

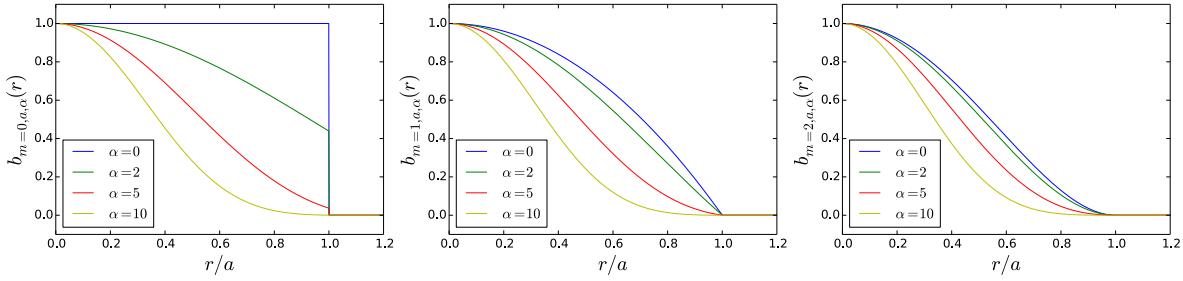


Abbildung 4.3: Radialer Verlauf der Blobs für $m = 0$ (links), $m = 1$ (Mitte) und $m = 2$ (rechts). Die Änderungen in Stetigkeit und Differenzierbarkeit für verschiedene Werte von m sind klar erkennbar, ebenso die für größere Werte von α abnehmende Breite der Glockenkurven.

4.1.3 Projektoren auf Basis von Blobs

Die von Lewitt (1990) zur digitalen Bilddarstellung vorgeschlagene Klasse an Basisfunktionen, ermöglicht es, auf die numerische Approximation der Ableitung in Gleichung 3.5 via Gleichung 3.11 zu verzichten. Daher wurde die Verwendung von Blobs von Köhler et al. (2011) zu einer direkten und von Heuristiken freien Berechnung des differentiellen Phasenschubs in der iterativen tomographischen Rekonstruktion von δ vorgeschlagen.

Definition

Blobs sind eine Verallgemeinerung der Kaiser-Bessel-Fensterfunktion. Sie sind durch

$$b_{m,a,\alpha}(r) = \begin{cases} \frac{(1-(r/a)^2)^{m/2} \cdot I_m(\alpha \cdot \sqrt{1-(r/a)^2})}{I_m(\alpha)} & \text{für } r \leq a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases} \quad (4.23)$$

gegeben (Lewitt, 1990). Dabei bezeichnet I_m die modifizierte Bessel-Funktion m -ter Ordnung. Blobs besitzen einen meist glockenförmigen radialen Verlauf. Der Radius des Trägers dieser Bildbasisfunktionen ist a . Blobs haben damit stets räumlich begrenzte Ausmaße. Über den Parameter α kann die Form der Glockenkurve beeinflusst werden. Der Parameter m kontrolliert die Stetigkeit der Funktion bei $r = a$. Während für $m = 0$ – dieser Fall entspricht dem gewöhnlichen Kaiser-Bessel-Fenster (Lewitt, 1992) – der Blob bei $r = a$ nicht stetig ist, erhält man für $m > 0$ eine stetige Funktion mit $m - 1$ stetigen Ableitungen an der Grenze (Lewitt, 1990). Abbildung 4.3 zeigt den radialen Verlauf der Blobs für $m = 0, 1, 2$ und $\alpha = 0, 2, 5, 10$.

Eigenschaften der Blobs

Die über Gleichung 4.23 definierte Familie von Funktionen besitzt einige Eigenschaften, die im Hinblick auf die Bilddarstellung von Vorteil sind (Lewitt, 1990).

Zunächst sind sie, wie bereits erwähnt, räumlich begrenzt, das heißt ihr Träger hat endliche Ausmaße. Diese Eigenschaft garantiert, dass die Objektfunktion f über Gleichung 3.6 und ihre Radontransformation über Gleichung 3.7 mit angemessenem Rechenaufwand berechnet werden können. Hinsichtlich der Vorwärtsprojektion während der CT-Rekonstruktion ist zu

beachten, dass die Anzahl an Detektorpixel, zu der eine Bildfunktion beiträgt, mit deren Radius a zunimmt. Verglichen mit einer Darstellung auf Basis von Voxeln sind Blobs im Allgemeinen weniger stark begrenzt. Die Koeffizientenmatrix M_{ij} folglich weniger dünnbesetzt.

Zusätzlich weisen Blobs eine Rotationssymmetrie auf. Die Projektion einer dieser Bildbasisfunktion ist also nicht vom Projektionswinkel abhängig, sondern lediglich vom Abstand ihres Mittelpunktes zu der Geraden, entlang derer das jeweilige Linienintegral berechnet wird.

Die Radontransformation von $b_{m,a,\alpha}(r)$, das heißt die Projektion eines Blobs, kann analytisch berechnet werden, ebenso die Ableitungen der Projektion, wenn sie denn existieren. Für die differentielle Phasenkontrastbildung hat dies den Vorteil, dass die Ableitung aufgrund ihrer Linearität anstatt für die gesamte Projektion des Phasenschubs nun für jede Basisfunktion separat bestimmt werden kann (Köhler et al., 2011). Analytische Ausdrücke existieren ebenfalls für die Fouriertransformation der Blobs. Die entsprechenden Formeln werden im weiteren Verlauf dieses Abschnitts aufgeführt.

Die Funktionen $b_{m,a,\alpha}(r)$ können derart gewählt werden, dass sie stetig und beliebig oft stetig differenzierbar sind. Gilt dies für die einzelnen Basisfunktionen eines Bildes, so auch für dessen gesamte Approximation über Gleichung 3.6. Damit ist die diskretisierte Darstellung der Objektfunktion $f(\mathbf{r})$ mittels Blobs an jedem Punkt \mathbf{r} stetig und differenzierbar, was konsistenter mit der Struktur natürlicher Materialien ist als eine Darstellung über Voxel, welche stets scharfe Kanten enthält, die in rechten Winkeln zueinander stehen (Lewitt, 1992).

Daneben wäre es vorteilhaft, wenn die Bildbasisfunktionen bandbegrenzt sind. Zum einen entsprechen die tatsächlich gemessenen Werte nicht den mit den strahlbasierten Projektoren berechneten Linienintegralen, sondern der Faltung der transmittierten Intensität mit der Apertur des Messinstruments. Diese Faltung führt zu einer Bandbegrenzung der Messdaten, welche sich mit derjenigen der Basisfunktion decken sollte (Lewitt, 1990). Zum anderen haben iterative Rekonstruktionsalgorithmen in der tomographischen Bildgebung die Eigenschaft, Rauschen zu verstärken. Eine beschränkte Bandbreite der Bildbasisfunktionen kann diese Rauschempfindlichkeit reduzieren (Lewitt, 1990). In Untersuchungen von Matej & Lewitt (1996) wiesen Rekonstruktionsverfahren mit Blobs einen geringeren Rauschpegel bei gleichem Auflösungsvermögen auf als mit Voxeln. Des Weiteren führt die Bandbegrenzung der Basisfunktionen zu einer Bandbegrenzung der Radontransformierten, womit letztere zumindest prinzipiell ohne Aliasing abgetastet werden kann (Lewitt, 1990). Die Träger einer Funktion und ihrer Fouriertransformierten können nicht gleichzeitig ein endliches Maß haben (Benedicks, 1985). Das Produkt aus Träger und Bandbreite ist für Gaußsche Glockenkurven minimal, jedoch müssten sie in praktischen Anwendungen an den Rändern abgeschnitten werden, was zu Rekonstruktionsfehlern führen kann (Matej & Lewitt, 1996). Die über Gleichung 4.23 definierten Basisfunktionen sind effektiv bandbegrenzt, das heißt ihre Fouriertransformierten haben oberhalb einer bestimmten Grenzfrequenz eine vernachlässigbare Amplitude (Lewitt, 1990).

(Differentielle) Projektion eines Blobs

Im Folgenden soll auf die Herleitung der oben angesprochenen analytischen Ausdrücke für die Projektion eines Blobs und deren Ableitung entlang der ξ -Achse eingegangen werden. Die

Projektion entlang der Geraden g_i ergibt sich zu

$$p_{m,a,\alpha}(s) = \int_{\mathbf{r} \in g_i} b_{m,a,\alpha}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 2 \int_0^{\sqrt{a^2-s^2}} b_{m,a,\alpha}(\sqrt{s^2+\eta^2}) d\eta \quad (4.24)$$

mit s der Differenz aus den ξ -Koordinaten von der Geraden g_i und dem Mittelpunkt des projizierten Blobs. Nach der Substitution $\eta = \sqrt{a^2 - s^2} \cos(\phi)$ und der Ersetzung der modifizierten Bessel-Funktion (Gradshteyn & Ryzhik, 2007)

$$I_m(z) = (-i)^m J_m(iz) \quad (4.25)$$

durch die normale Bessel-Funktion m -ter Ordnung J_m erhält man mit

$$p_{m,a,\alpha}(s) = \frac{2a(-i)^m}{I_m(\alpha)} \sqrt{1 - s^2/a^2}^{m+1} \int_0^{\pi/2} \sin^{m+1}(\phi) J_m(i\alpha\sqrt{1 - s^2/a^2} \sin(\phi)) d\phi \quad (4.26)$$

ein Integral in der Form von Sonine's erstem Integral (Lewitt, 1990). Letzteres drückt jede Bessel-Funktion mittels

$$J_{m+n+1}(z) = \frac{z^{n+1}}{2^n \Gamma(n+1)} \int_0^{\pi/2} J_m(z \sin(\phi)) \sin^{m+1}(\phi) \cos^{2n+1}(\phi) d\phi \quad (4.27)$$

durch das Integral über eine Bessel-Funktion niedriger Ordnung aus (Watson, 1944). Für das Integral in Gleichung 4.26 gilt $n = -1/2$ und damit (Lewitt, 1990)

$$p_{m,a,\alpha}(s) = \frac{a}{I_m(\alpha)} \sqrt{2\pi/\alpha} \sqrt{1 - s^2/a^2}^{m+1/2} I_{m+1/2}(\alpha\sqrt{1 - s^2/a^2}). \quad (4.28)$$

Für den Spezialfall $\alpha = 0$ erhält man (Lewitt, 1992)

$$p_{m,a,\alpha=0}(s) = 2a [2^m m!/(2m+1)!!] (1 - s^2/a^2)^{m+1/2}. \quad (4.29)$$

In Abbildung 4.4 sind beispielhaft die Projektionen der Blobs aus Abbildung 4.3 dargestellt. Im Fall von Gleichung 4.29 ergibt sich die differentielle Projektion zu

$$\frac{\partial p_{m,a,\alpha=0}}{\partial s}(s) = -\frac{4s}{a} [2^m m!/(2m+1)!!] (m+1/2) (1 - s^2/a^2)^{m-1/2}. \quad (4.30)$$

Für den allgemeineren Fall $\alpha \neq 0$ lässt sich $\partial p / \partial s$ über die Identität (Gradshteyn & Ryzhik, 2007)

$$\frac{d}{dz} z^{\pm n} I_n(z) = z^{\pm n} I_{n\mp 1}(z) \quad (4.31)$$

bestimmen. Mit $z = \alpha\sqrt{1 - s^2/a^2}$ erhält man $\partial z / \partial s = -\alpha^2 s / (a^2 z)$ und

$$\begin{aligned} \frac{\partial p_{m,a,\alpha}}{\partial s}(s) &= \frac{a}{I_m(\alpha)} \sqrt{2\pi/\alpha} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{z^{m+1/2}}{\alpha^{m+1/2}} I_{m+1/2}(z) \right) \\ &= \frac{a}{I_m(\alpha)} \sqrt{2\pi/\alpha} \frac{z^{m+1/2}}{\alpha^{m+1/2}} I_{m-1/2}(z) \frac{\partial z}{\partial s} \\ &= -\frac{s}{a I_m(\alpha)} \sqrt{2\pi\alpha} \sqrt{1 - s^2/a^2}^{m-1/2} I_{m-1/2}(\alpha\sqrt{1 - s^2/a^2}). \end{aligned} \quad (4.32)$$

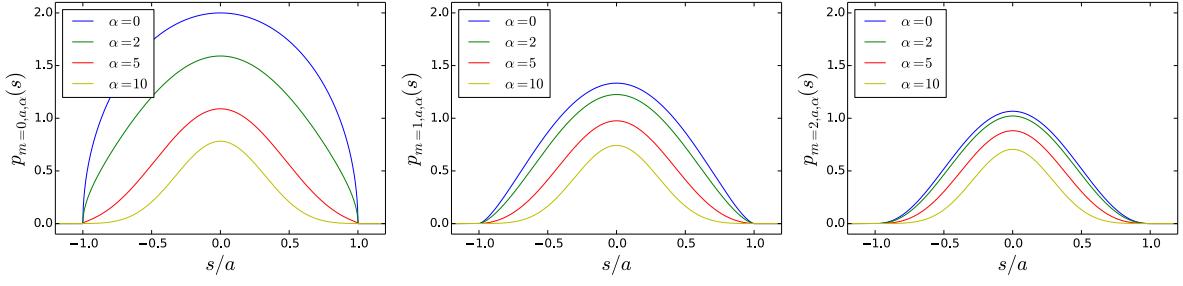


Abbildung 4.4: Projektionen der Blobs. Die Parameter sind entsprechend Abbildung 4.3 gewählt.

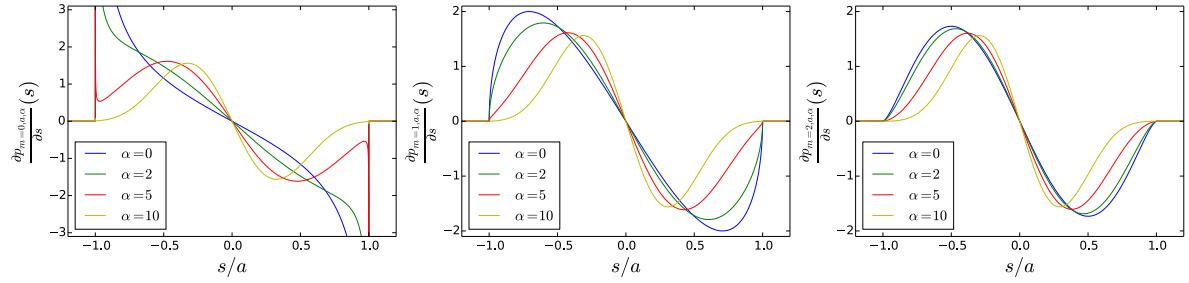


Abbildung 4.5: Differentielle Projektionen der Blobs aus Abbildung 4.3. Im Fall $m = 0$ divergiert die Ableitung bei $s = \pm a$.

Abbildung 4.5 zeigt die mit den obigen Formeln berechneten differentiellen Projektionen der Blobs aus Abbildung 4.3.

Verwendung in der Rekonstruktionsumgebung

Die Berechnung der Koeffizientenmatrizen M_{ij} und δM_{ij} erfolgt bei der Wahl des blobbasierten Projektors über die folgenden Schritte:

1. Projektion der Blobmittelpunkte auf die Detektorebene. Die Mittelpunkte (x_j, z_j) befinden sich auf einem rechteckigen Gitter. Die Anzahl der Blobs sowie ihr Abstand $d_{x/z}$ in x- bzw. z-Richtung kann vorgegeben werden, ebenso die Parameter m , a und α . Die Projektion des j-ten Blobs hat ihren Mittelpunkt bei

$$\xi_j^{(p)} = x_j \cos(\gamma) - z_j \sin(\gamma). \quad (4.33)$$

2. Paarweise Berechnung der Abstände der projizierten Mittelpunkte von den Zentren der Detektorpixel. Für den j-ten Blob und den Pixel bei ξ_i ergibt sich die Distanz $s_{ij} = \xi_i - \xi_j^{(p)}$. Die Einträge in die Koeffizientenmatrix erhält man daraus über Gleichung 4.28 bzw. 4.29 und Gleichung 4.32 bzw. 4.30 zu

$$M_{ij} = p_{m,a,\alpha}(s_{ij}), \quad (4.34)$$

$$\delta M_{ij} = \frac{\partial p_{m,a,\alpha}}{\partial s}(s_{ij}). \quad (4.35)$$

3. Iteration der Schritte 1. und 2. über alle Projektionswinkel γ und Auffüllen der Koeffizientenmatrizen. Dabei werden lediglich die von null verschiedenen Einträge zusammen mit ihren Indizes gespeichert.

Das rekonstruierte Schnittbild kann abschließend auf einem rechteckigen Gitter abgetastet werden, um graphisch ausgegeben zu werden oder um es besser mit voxelbasierten Rekonstruktionen vergleichen zu können.

Die Rekonstruktion via Blobs bietet ferner die Möglichkeit, den Messvorgang präziser zu modellieren als über die Berechnung eines Linienintegrals von der Röntgenquelle zum jeweiligen Pixel des Detektors. Dazu kann die Projektion eines Blobs über den Pixel integriert werden. Dies entspricht einer Abtastung der Faltung von $p_{m,a,\alpha}$ mit der Apertur des Messgeräts. Für Gleichung 4.29 lässt sich das Integral unter Zuhilfenahme der binomische Reihe

$$(1 - x^2)^\nu = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\nu}{k} (-x^2)^k \quad (4.36)$$

berechnen. Man erhält mit

$$\begin{aligned} \int (1 - x^2)^\nu dx &= \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\nu}{k} \int (-x^2)^k dx \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\nu}{k} \frac{(-1)^k}{2k+1} (x^2)^k \cdot x \\ &= x \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} \frac{\nu(\nu-1)\cdots(\nu-k+1)}{k!} (x^2)^k \\ &= x \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(1/2)_k (-\nu)_k}{(3/2)_k} \frac{(x^2)^k}{k!} \\ &= x \cdot {}_2F_1(1/2, -\nu; 3/2; x^2) \end{aligned} \quad (4.37)$$

einen Ausdruck, der die hypergeometrische Funktion (Gradshteyn & Ryzhik, 2007) ${}_2F_1$ beinhaltet. Dabei bezeichnet $(q)_n$ das sogenannte steigende Pochhammer-Symbol

$$(q)_n = q(q+1)\cdots(q+n-1). \quad (4.38)$$

Mit Gleichung 4.37 folgt für das Integral von Gleichung 4.29

$$\int p_{m,a,\alpha=0}(s) ds = 2as [2^m m!/(2m+1)!!] {}_2F_1(1/2, -m-1/2; 3/2; s^2/a^2). \quad (4.39)$$

Für $\alpha \neq 0$ konnte kein analytischer Ausdruck für das Integral der Projektion gefunden werden. Hier biete es sich an, die Stammfunktion von $p_{m,a,\alpha}$ numerisch für eine Vielzahl von Werten zu bestimmen und diese in Form einer Lookup-Tabelle abzuspeichern. Auf diese Weise könnten auch andere Beiträge zur Punktbildfunktion des Messsystems, wie beispielsweise die endliche Ausdehnung der Röntgenquelle berücksichtigt werden.

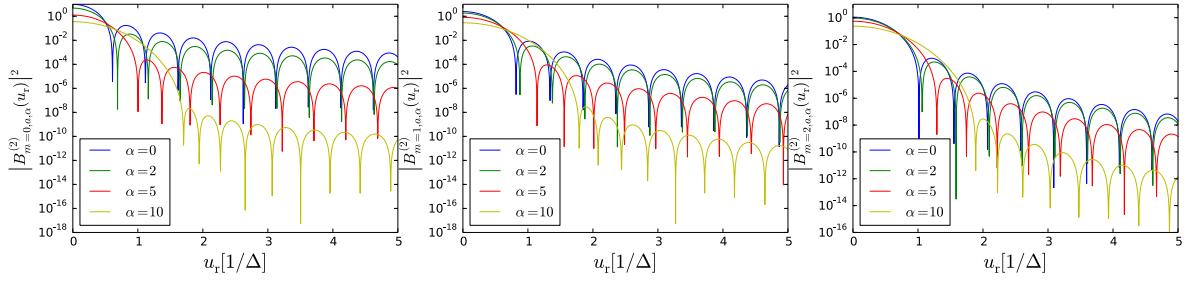


Abbildung 4.6: Fouriertransformation der Blobs aus Abbildung 4.3. Zur besseren Visualisierung ist das Quadrat der Fouriertransformierten jeweils logarithmisch aufgetragen. Die Intensität der Nebenkeulen nimmt mit größerem α deutlich ab.

Auswahl der Blobparameter

Den Blobs steht ein großer Parameterraum zur Verfügung. Ähnlich zu einer voxelbasierten Rekonstruktion gilt es zunächst, die Anzahl an Bildbasisfunktionen und deren Abstände festzulegen. Diese beiden Größen sind über die Größe des Sichtfeldes miteinander korreliert, sodass letztlich nur eine frei festgelegt werden kann. Mit a , m und α stehen den Blobs daneben drei weitere Parameter zur Verfügung. Es erscheint sehr aufwendig, aus diesen Wahlmöglichkeiten die optimale Konfiguration für eine bestimmte Rekonstruktion zu finden. Matej & Lewitt (1996) schränkten den Parameterraum durch die Forderung, dass die Wahl der Basisfunktionen in der Lage sein sollte, einen konstanten Bildbereich darzustellen, weiter ein. Über die Poissonsche Summenformel zeigten sie, dass diese Forderung äquivalent zum identischen Verschwinden der Fouriertransformierten $B_{m,a,\alpha}(u_r)$ bei allen ganzzahligen Vielfachen der Gitterfrequenz $1/\Delta$ ist. Folglich sollte

$$B(u_r = k/\Delta) = 0 \quad \forall k \in \mathbb{Z} \setminus \{0\} \quad (4.40)$$

gelten. Dabei wird angenommen, dass die Blobs auf einem quadratischen Gitter angeordnet sind, das heißt es gilt $d_x = d_z = \Delta$.

Eine allgemeine Formel für die Fouriertransformation von $b_{m,a,\alpha}(r)$ erhält man über Sonine's zweites Integral (Watson, 1944) zu (Lewitt, 1990)

$$B_{m,a,\alpha}^{(n)}(u_r) = \begin{cases} \frac{(2\pi)^{n/2} a^n \alpha^m}{I_m(\alpha)} \frac{I_{n/2+m}(\sqrt{\alpha^2 - (2\pi a u_r)^2})}{\sqrt{\alpha^2 - (2\pi a u_r)^2}^{n/2+m}} & \text{für } 2\pi a u_r \leq \alpha \\ \frac{(2\pi)^{n/2} a^n \alpha^m}{I_m(\alpha)} \frac{J_{n/2+m}(\sqrt{(2\pi a u_r)^2 - \alpha^2})}{\sqrt{(2\pi a u_r)^2 - \alpha^2}^{n/2+m}} & \text{für } 2\pi a u_r > \alpha \end{cases} \quad (4.41)$$

mit n der Dimension eines Blobs. Beispielhaft sind die Fouriertransformierten der Blobs aus Abbildung 4.3 in Abbildung 4.6 dargestellt.

Während Voxel die Bedingung aus Gleichung 4.40 exakt erfüllen, ist dies für Blobs nicht möglich (Matej & Lewitt, 1996). Stattdessen können a und α derart gewählt werden, dass $B_{m,a,\alpha}^{(n)}(u_r)$ bei $u_r = 1/\Delta$ eine Nullstelle besitzt. Ein hinreichend großer Wert von α führt dann zu einem ausreichend schnellen Abfall der Fouriertransformierten bei den nächsthöheren Vielfachen der Gitterfrequenz (vgl. Abbildung 4.6). Aus Gleichung 4.41 ist ersichtlich, dass die Bessel-Funktion

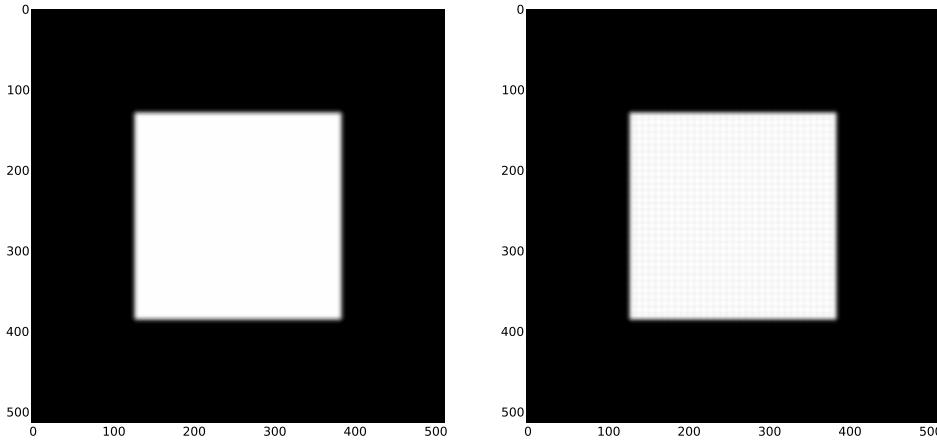


Abbildung 4.7: Repräsentation eines Quadrats über Blobs. Im linken Bild ist Gleichung 4.42 erfüllt und innerhalb des Quadrats ergibt sich ein konstanter Wert. Im rechten Bild wurde ein leicht überhöhter Wert für α gewählt, wodurch es zu Oszillation im Bild kommt.

$J_{n/2+m}$ an den Nullstellen von $B_{m,a,\alpha}^{(n)}(u_r)$ verschwinden muss. Gibt man den Radius a des Blobs vor, so bestimmt sich α zu

$$\alpha = \sqrt{(2\pi a/\Delta)^2 - J_{\text{zero}}(n/2 + m, 1)^2} \quad (4.42)$$

mit $J_{\text{zero}}(j, k)$ der k -ten Nullstelle der Bessel-Funktion j -ter Ordnung. *SciPy* stellt Methoden zur Verfügung, diese Nullstellen zu berechnen.

Zur Veranschaulichung wurde ein Quadrat gemäß Gleichung 3.6 auf einem Gitter aus 64×64 Blobs repräsentiert und über ein deutlich feineres Gitter von 512×512 Punkten abgetastet. Abbildung 4.7 zeigt, dass bereits kleine Abweichungen von Gleichung 4.42 bei der Bildrepräsentation via Blobs dazu führen können, dass konstante Bildbereiche nicht korrekt dargestellt werden.

Für die Rekonstruktion zweidimensionaler Schnittbilder gilt $n = 2$. Damit das rekonstruierte Bild überall stetig und stetig differenzierbar ist, wird $m \geq 2$ gewählt. Durch die Wahl von a kann α über Gleichung 4.42 fixiert werden. Ferner ergibt sich aus der Gitterperiode Δ eine Grenze für a , unterhalb derer Gleichung 4.42 nicht mehr lösbar ist. Während die Forderung von Matej & Lewitt (1996) zwar keine eindeutige Bestimmung der Blobparameter ermöglicht, vereinfacht sie deren Auswahl dennoch erheblich. In der Praxis können die verbliebenen freien Parameter dann an den jeweiligen Datensatz angepasst werden.

4.2 Evaluation des Rekonstruktionsalgorithmus

Zwei entscheidende Merkmale zur Charakterisierung iterativer Rekonstruktionsverfahren sind die erzielte Bildqualität und die Konvergenzgeschwindigkeit, mit der diese erreicht wird. In diesem Abschnitt wird die SIR hinsichtlich dieser beiden Charakteristika evaluiert. Dazu werden künstliche, mittels *cxi* erzeugte Projektionsdaten, ein numerisches Phantom und ein Satz experimenteller Messdaten verwendet. Eine quantitative Beurteilung der Bildqualität erfolgt über

Messungen zum Kontrast-Rausch-Verhältnis (CNR für *contrast to noise ratio*). Als Referenz dienen dabei Rekonstruktionen mittels der gefilterten Rückprojektion. Die angesprochenen Kriterien dienen ferner dem Vergleich der in Abschnitt 4.1 vorgestellten Projektoren. Zudem wird die Möglichkeit der SIR, tomographische Rekonstruktionen bei nur einem Phasestep pro Projektionswinkel durchzuführen, explizit untersucht.

4.2.1 Simulierte Daten

Für die ersten Evaluationen des Rekonstruktionsalgorithmus wurden Projektionsdaten aus einer Simulation mit *cxi* herangezogen. Wie bereits in Abschnitt 3.2 angesprochen, ist es in Simulationen möglich, realistische Daten unter idealisierten Bedingungen zu erzeugen. Die SIR kann somit auf Daten angewendet werden, die einer Aufnahme in Parallelstrahlgeometrie entsprechen und denen die Modellierung durch die vorgestellten Projektoren eher gerecht wird als der Fächerstrahlgeometrie eines experimentellen Aufbaus. Spektrale Effekte, die in der SIR nicht berücksichtigt werden, können durch monochromatische Simulationen eliminiert werden. Zusätzlich kann der Fehler der rekonstruierten Bildkoeffizienten durch einen Vergleich mit den in der Simulation übergebenen Werten des komplexen Brechungsindex bestimmt werden.

Als Messobjekt wurde ein Zylinder aus Aluminium mit einem Durchmesser von 4,1 mm implementiert. Die Simulation war monochromatisch bei einer Röntgenenergie von 25 keV. Bei dieser Energie betragen die übergebenen Werte des Absorptionskoeffizienten bzw. des Dekrements des Brechungsindex $\mu_{\text{Al}} \approx 4,9064 \text{ cm}^{-1}$ bzw. $\delta_{\text{Al}} \approx 8,6561 \cdot 10^{-7}$. Der simulierte Scan umfasste eine volle Rotation um 360° mit Aufnahmen in 1° -Schritten und 15 Phasesteps bei jedem Projektionswinkel. Es wurden 68 Detektorpixel mit einer Breite von jeweils $100 \mu\text{m}$ betrachtet. Der Mittelpunkt des Detektors war dabei um ein Viertel der Pixelbreite gegenüber der Rotationsachse des Systems verschoben. Dieser sogenannte Detektorviertelversatz gewährleistet, dass Projektionen außerhalb eines Winkelbereichs von 180° nicht redundant sind und verdoppelt somit die räumliche Abtastrate (Buzug, 2008). Das Beugungsgitter G1 war $\pi/2$ -schiebend und hatte eine Periode von $5 \mu\text{m}$. Das Analysatorgitter und der Detektor befanden sich im ersten fraktionalen Talbot-Abstand. Da die Einflüsse einer Röntgenquelle mit endlicher Ausdehnung in der SIR noch nicht berücksichtigt sind, wurde für die Standardabweichung der gaußförmigen Quellverteilung mit $\sigma = 5 \mu\text{m}$ ein relativ kleiner Wert ausgewählt, der in guter Näherung dennoch zu einer sinusförmigen Phasestppingkurve führt.

Als Startwert für die iterative Rekonstruktion wurde ein Volumen gewählt, in dem alle Bildkoeffizienten auf null gesetzt waren. Der vorgegebene Schwellenwert an die Norm des Gradienten betrug $g_{\text{tol}} = 10^{-7}$. Die maximal mögliche Anzahl an Iterationen war $i_{\text{max}} = 3000$. Für die voxelbasierten Projektoren wurden die Verteilungen von μ , δ und ϵ jeweils auf einem Gitter aus 68×68 Voxeln rekonstruiert. Die Breite der Voxel entsprach der Pixelbreite. In der Rekonstruktion mit Blobs wurden diese auf einem größeren Gitter der Dimension 50×50 verteilt. Der Abstand benachbarter Blobs in x - bzw. z -Richtung betrug das 1,36-fache der Pixelbreite d_d . Die weiteren Parameter wurden zu $a = 2,04 \cdot d_d$, $m = 2$ und $\alpha = 6,937$ gewählt. Über Gleichung 3.6 wurden die so rekonstruierten Schnittbilder dann ebenfalls auf einem quadratischen Gitter aus 68×68 Punkten mit Abstand d_d ausgewertet. Als Referenzrekonstruktion wurden die drei Objektfunktionen μ , δ und ϵ an diesen Punkten auch über die FBP bestimmt. Die resultierenden Schnittbilder des Zylinders sind in Abbildung 4.8 zusammengefasst.

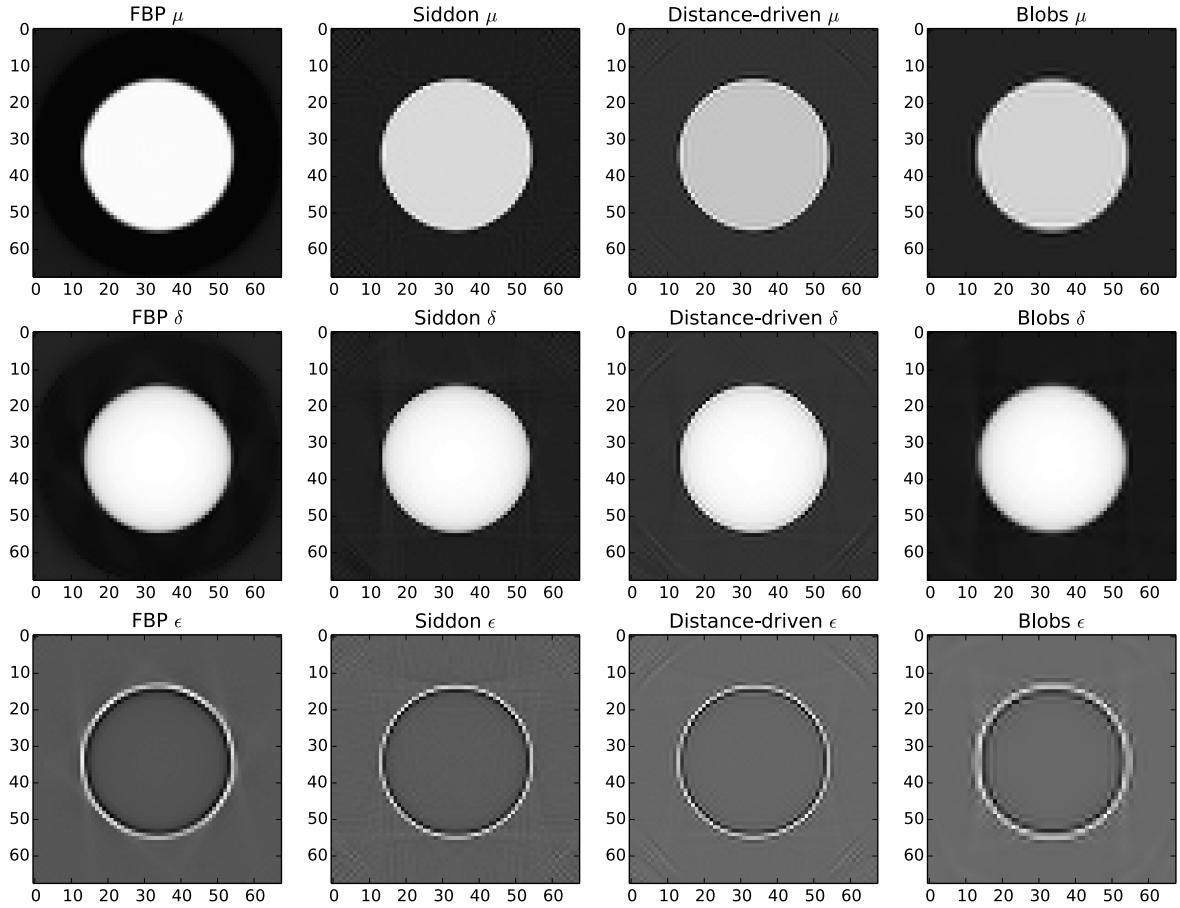


Abbildung 4.8: Tomographische Rekonstruktion eines Zylinders. Die Schnittbilder zeigen die Verteilung des Absorptionskoeffizienten μ , des Dekrements δ des Brechungsindex und des Streukoeffizienten ϵ für das Dunkelfeld. In der ersten Spalte ist die Rekonstruktion mittels FBP dargestellt. Die weiteren Spalten zeigen die Rekonstruktionen mit der SIR unter Verwendung der Methode nach Siddon, des distance-driven Projektors sowie die Rekonstruktion via Blobs.

Die SIR erzielt dabei Ergebnisse, die durchaus vergleichbar mit denen der gefilterten Rückprojektion sind. Den auffälligsten Unterschied im Signalverhalten zeigt das Absorptionsbild. Die iterativ rekonstruierten Bilder liefern an den Kanten des Zylinders im Vergleich zu den zentraleren Bereichen des Objekts merklich größere Werte für μ . Dies ist jedoch kein reines Artefakt der SIR. Vielmehr ist das Phänomen, das zu diesen Ergebnissen führt, bereits in den einzelnen projektiven Aufnahmen vorhanden (vgl. Abbildung 4.9). Dahinter wird der aus dem Bereich der Röntgenbildgebung mit kohärenten Quellen bekannte Effekt der Kantenanhebung (englisch *edge enhancement*) vermutet. Dabei führen Beugungseffekte zu einer Änderung der Intensitätsverteilung in Abhängigkeit von deren Propagationsdistanz. Ist der Detektor um die Distanz z von der Austrittsfläche des Messobjekts entfernt, so lässt sich die Intensitätsverteilung

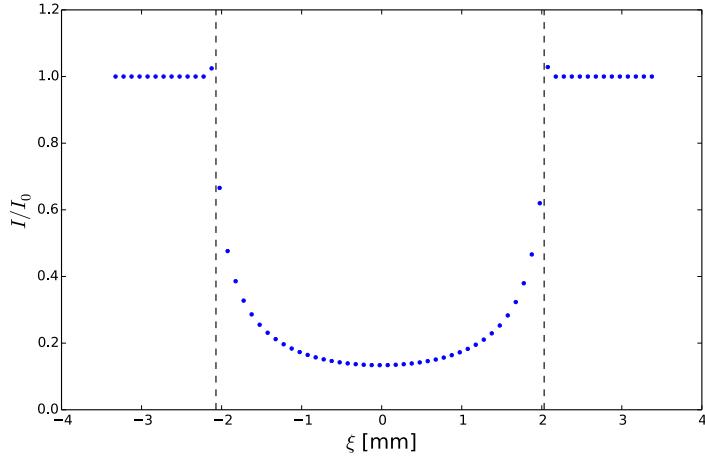


Abbildung 4.9: Simulierte Werte für die Transmission. Die Position der Kanten des Zylinders wird durch die gestrichelten Linien angedeutet. Leicht außerhalb des Zylinders ist die gemessene Intensität im Vergleich zur Referenzmessung erhöht.

in der Detektorebene näherungsweise über

$$I(x, z) = I(x, z = 0) \cdot \left[1 - \frac{\lambda z}{2\pi} \frac{\partial^2 \Delta\varphi}{\partial x^2}(x, y) \right] \quad (4.43)$$

aus der zweiten Ableitung des Phasenschubs $\Delta\varphi$ und der Intensitätsverteilung $I(x, z = 0)$ direkt hinter dem Messobjekt bestimmen (Bronnikov, 2002). Im Vergleich zur gefilterten Rückprojektion hat dieser Effekt in den iterativen Rekonstruktionen einen deutlich größeren Einfluss. Das Dunkelfeldbild des Zylinders weist nur an seinen Kanten ein Signal auf. Eine genauere Diskussion, des durch Kanten erzeugten Dunkelfeldsignals, findet sich in Abschnitt 4.4. An dieser Stelle sei lediglich vermerkt, dass das Kantensignal bei der Methode nach Siddon und beim *distance-driven* Projektor gegenüber der Rekonstruktion mittels FBP oder Blobs schärfer begrenzt ist. Dies deutet darauf hin, dass mit den ersten beiden Projektoren höhere Auflösungen erzielt werden können. Ein Großteil der rekonstruierten Schnittbilder zeigt zudem Artefakte in und am Übergang zu Bereichen, die nicht in jeder Projektion auf den Detektor abgebildet werden. Für beide voxelbasierte Projektoren der SIR treten bei allen Bildmodalitäten in den Ecken der Bilder Kachelartefakte auf. Die gefilterte Rückprojektion führt nicht zu derartigen Strukturen, jedoch ergibt sich für die entsprechenden Bereiche sowohl im μ - als auch im δ -Bild ein erhöhter Signalwert. Die Rekonstruktion auf Basis der Blobs weist keine Artefakte in den Ecken der Bilder auf. Sie hat jedoch die größten Probleme, das Dunkelfeldbild ordentlich darzustellen, vermutlich aufgrund der im Vergleich zum scharfen Signalbereich zu großen Ausmaße der Bildbasisfunktionen.

Konvergenz

Während der iterativen Rekonstruktionen mit den Ergebnissen aus Abbildung 4.8 wurden die Bildkoeffizienten zusätzlich nach jeder Iteration des konjugierten Gradientenverfahrens abgespeichert. Dies ermöglicht die Betrachtung der Konvergenzrate des Algorithmus mit der

verwendeten Zielfunktion aus Gleichung 3.14. Die Analyse anhand von simulierten Messungen erlaubt zudem die Bestimmung der Fehler der rekonstruierten Koeffizienten. Aus den Parametern μ_{AI} und δ_{AI} der Simulation kann man die wahren Schnittbilder des Zylinders erhalten. Dazu wurde das Objekt in der x - z -Ebene auf einem Gitter aus 6800×6800 Punkten mit der Ortsfrequenz $1/\mu\text{m}$ abgetastet. Das Gesichtsfeld entspricht folglich mit $6,8\text{ mm}$ exakt dem der Rekonstruktion. Anschließend wurden Bereiche von jeweils 100×100 Punkten gemittelt, um den wahren Wert in jedem Voxel näherungsweise zu bestimmen. Die wahren Schnittbilder werden im Folgenden mit $\boldsymbol{\mu}^*$ bzw. $\boldsymbol{\delta}^*$ bezeichnet. Für die Verteilung von ϵ kann kein solches Vergleichsbild erstellt werden, da für das Dunkelfeld kein hinreichend akkurate Modell existiert, das die vielfältigen Entstehungsmechanismen beschreibt. Die Abweichungen der rekonstruierten Verteilungen der Bildkoeffizienten von ihren wahren Werten werden durch die Wurzel des normierten mittleren quadratischen Fehlers (NRMSE für *normalized root-mean-square error*) charakterisiert. Sie ergibt sich zu

$$\text{nrmse}(\mathbf{f}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left(\frac{f_j - f_j^*}{f_{\max}^* - f_{\min}^*} \right)^2}. \quad (4.44)$$

Die Normalisierung durch $f_{\max}^* - f_{\min}^*$ gewährleistet, dass der Ausdruck skalenunabhängig ist. Dies ermöglicht einen problemlosen Vergleich der Fehler unterschiedlicher Bildmodalitäten. Die entsprechende Wurzel des Fehlerquadratmittels aus beiden Bildern ist durch

$$\text{nrmse}_{\text{total}} = \sqrt{[\text{nrmse}(\boldsymbol{\mu})^2 + \text{nrmse}(\boldsymbol{\delta})^2]/2} \quad (4.45)$$

gegeben.

Das Konvergenzverhalten der SIR für die drei Projektoren ist in Abbildung 4.10 dargestellt. Die linke Spalte zeigt den Verlauf der negativen Log-Likelihood-Funktion normiert durch den Wert $l_0 = l(\boldsymbol{\mu} = 0, \boldsymbol{\delta} = 0, \epsilon = 0)$. Ebenso wurde für die Bildkoeffizienten nach jeder Iteration über Gleichung 4.44 der NRMSE für die Verteilungen von μ und δ sowie über Gleichung 4.45 $\text{nrmse}_{\text{total}}$ berechnet. Die entsprechenden Verläufe sind in der rechten Spalte dargestellt. Die allgemeine Form der jeweiligen Kurven ist für alle Projektoren gleich. Die negative Log-Likelihood-Funktion fällt innerhalb der ersten Iterationen um knapp zwei Größenordnungen ab. Dies ist bedingt durch die Konvergenz des Absorptionsbildes, dessen Fehler $\text{nrmse}(\boldsymbol{\mu})$ bereits in diesem Bereich seinen endgültigen Wert annimmt. Folglich zeigt auch $\text{nrmse}_{\text{total}}$ dort einen steilen Abfall. Für die darauf folgenden Iterationen ist der gesamte Fehler durch den Fehler von δ dominiert. Dieser ist durch einen immer schwächer werdenden Abfall gekennzeichnet und erreicht seinen finalen Wert nach grob 800 bis 1000 Iterationen. Ein ähnlicher Verlauf ergibt sich für die Likelihood-Funktion. Diskrepanzen zwischen den simulierten Daten und der Modellierung des Messvorgangs in der Rekonstruktionsumgebung, zum Beispiel durch die Nichtbeachtung der Kantenanhebung, zeigen sich auch in den absoluten Werten der Zielfunktion und der NRMSE. So erreicht die Rekonstruktion mit dem *distance-driven* Projektor den niedrigsten Wert für $-l/l_0$, gleichzeitig weist sie jedoch die größten Abweichungen zu $\boldsymbol{\mu}^*$ und $\boldsymbol{\delta}^*$ auf.

Auffallend sind die Werte der verbleibenden Fehler in beiden Bildern. Über den jeweiligen NRMSE ergeben sich mittlere relative Abweichungen von 6 % bis 8 % zu $\boldsymbol{\mu}^*$ und von ca. 16 % zu $\boldsymbol{\delta}^*$. Während das Objekt im Absorptionsbild jedoch mit Ausnahme der Über- und Unterschwinger

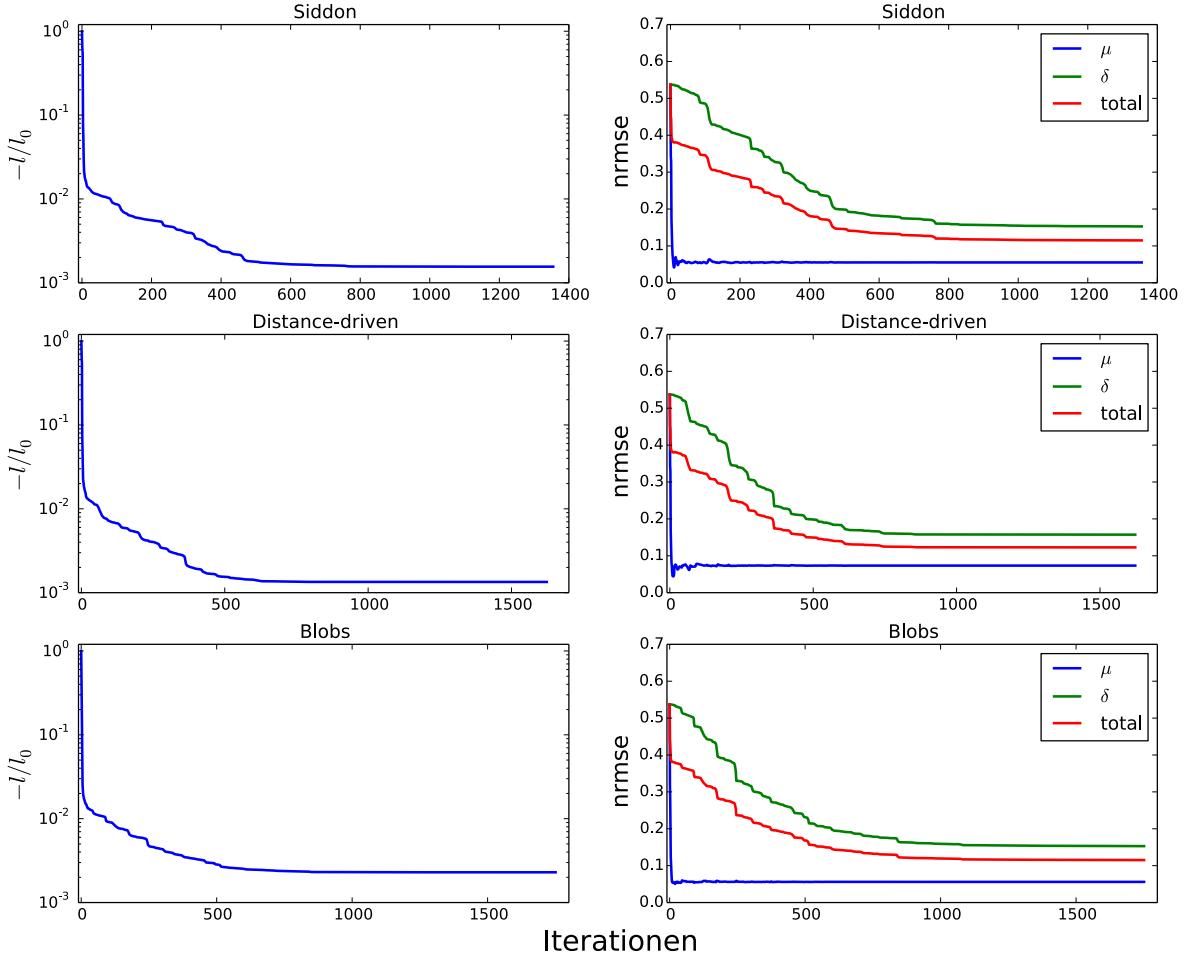


Abbildung 4.10: Verlauf der Log-Likelihood-Funktion (links) sowie der NRMSE (rechts) gegenüber der Anzahl an Iterationen

durch die Kantenanhebung weitgehend fehlerfrei rekonstruiert wird, die Abweichungen sich also zum Großteil durch die Artefakte außerhalb des Objekts ergeben, weichen die rekonstruierten Koeffizienten im δ -Bild für jeden Punkt innerhalb des Zylinders bereits um 9 % oder mehr ab. Abbildung 4.11 verdeutlicht diesen Rekonstruktionsfehler und seine Ursache. Für einen Zylinder wurde der mittlere differentielle Phasenschub direkt berechnet und über Gleichung 2.26 auf den Versatz $\Delta\Phi$ der Phasestepplingkurven von Objekt- und Referenzmessung übertragen. In den Pixeln, die Kanten des Zylinders sehen, ergeben sich dabei Abweichung zum entsprechenden Versatz der simulierten Phasestepplingkurven. Letzterer ist betragsmäßig zu klein. Aufgrund der differentiellen Natur von $\Delta\Phi$ führt dies im gesamten Objekt zu zu niedrigen Werten von $\tilde{\delta}$. Korrigiert man das Sinogramm von $\Delta\Phi$ entsprechend, so führt eine Rekonstruktion mittels FBP zu Werten, die mit der tatsächlichen Verteilung von δ gut übereinstimmen. An dieser Stelle sei betont, dass die fehlerhafte Rekonstruktion des differentiellen Phasenschubs an den Kanten ein prinzipielles Problem des Messvorgangs ist. Eine genauere Diskussion des Problems und möglicher Lösungsansätze findet sich in Abschnitt 4.4.

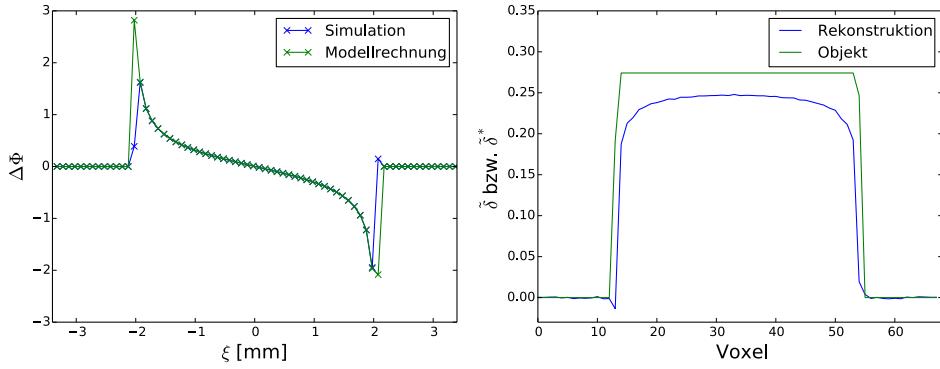


Abbildung 4.11: Versatz der Phasesteppingkurven von Objekt- und Referenzmessung für eine Projektion (links) und Schnitt durch das rekonstruierte bzw. wahre $\tilde{\delta}$ -Bild des Zylinders (rechts). Für $\Delta\Phi$ sind neben den Werten aus der Simulation zusätzlich die aus dem mittleren differentiellen Phasenschub erwarteten aufgetragen. Die Unterschiede an den Kanten des Zylinders reichen aus, um die fehlerhafte tomographische Rekonstruktion zu erklären.

Die verwendete Zielfunktion ist nicht konvex, sodass die Existenz eines globalen Minimums nicht gewährleistet ist. Es ist folglich denkbar, dass die beobachteten Fehler der rekonstruierten Bildkoeffizienten neben den Diskrepanzen des tatsächlichen Messvorgangs zu seiner Modellierung auch aus der Konvergenz in ein lokales Extremum der Zielfunktion resultieren. Zur Untersuchung dieser Hypothese wurde die iterative Rekonstruktion mit mehreren verschiedenen Startwerten initialisiert und die jeweiligen Resultate untereinander verglichen. Die Startwerte der Bildkoeffizienten wurden dabei aus Gleich- oder Exponentialverteilungen gezogen. Zum Vergleich je zweier Rekonstruktionen mit unterschiedlichen Startwerten wurde die Wurzel aus deren mittlerer quadratischer Abweichung berechnet. Dazu wurde in Gleichung 4.44 für den NRMSE f^* durch eines der beiden rekonstruierten Volumen ersetzt. Die Abweichungen waren dabei sowohl für μ als auch für δ um mindestens drei Größenordnungen kleiner als der jeweilige Fehler zu den wahren Verteilungen μ^* und δ^* . Dies deutet darauf hin, dass die Zielfunktion zumindest stabil in ein Extremum konvergiert. Die Frage, ob sich zusätzliche Rekonstruktionsfehler durch die Konvergenz in ein lokales Minimum und damit aufgrund der mangelnden Konvexität der Log-Likelihood-Funktion ergeben, konnte hier nicht final geklärt werden.

Konvergenz bei einem Phasestep pro Projektionswinkel

Eine hervorzuhebende Eigenschaft der SIR ist die Möglichkeit, tomographische Rekonstruktionen der drei Bildmodalitäten prinzipiell auch dann ausführen zu können, wenn die Phasenabtastung eine direkte Bestimmung von T , $\Delta\Phi$ und D nicht ermöglicht. Von besonderer Bedeutung ist dabei der Fall mit nur einem Phasestep pro Projektionswinkel. Erfolgreiche Rekonstruktionen unter diesen Voraussetzungen wären ein erster Schritt, die Computertomographie für die gitterbasierte Röntgenbildgebung auf moderne CT-Scanner mit stetig rotierender Scan-Einheit zu übertragen. Zur Untersuchung der Rekonstruktionen mit einem Phasestep pro Projektionswinkel wurde der simulierte Datensatz drei verschiedenen Aufnahmeprotokol-

len entsprechend zugeschnitten. Das erste Protokoll entspricht einer Aufnahme mit festem Analysatorgitter. Jedem Projektionswinkel wurde daher der Intensitätswert für den gleichen Phasestep zugeordnet. Der so zugeschnittene Datensatz wird “konstant” genannt. Das zweite Protokoll entspricht dem Datenerfassungsschema aus Zanette et al. (2011) und wird folglich mit “interlaced” bezeichnet. Bei der Zuordnung eines Phasesteps zu einer Projektion wird dabei zyklisch durch die Position der Phasesteps iteriert. Für das letzte Protokoll wird jedem Winkel zufällig einer seiner Phasesteps zugeordnet. Dies entspricht am ehesten einer zufälligen Abtastung des Talbotmusters, zum Beispiel durch ein vibrierendes G2. Der verwendete Zufallszahlengenerator wurde dabei immer mit dem gleichen Startwert, einem sogenannten *Seed*, initialisiert. Die Folge an Zufallszahlen ist dadurch stets die selbe, was für alle Projektoren eine identische Ausgangslage schafft. Die Rekonstruktionen über die zugeschnittenen Datensätze wurden analog zum vollen Datensatz durchgeführt und ausgewertet. Als Vergleich dient eine Rekonstruktion mittels gefilterter Rückprojektion, bei der für jeden dritten Projektionswinkel drei Phasesteps betrachtet wurden. Die Gesamtzahl der verwendeten Aufnahmen entspricht damit derjenigen der drei vorgestellten Protokolle für die SIR.

Analog zu Abbildung 4.10 für den vollen Datensatz zeigt Abbildung 4.12 das Konvergenzverhalten der Rekonstruktion mit einem Phasestep pro Projektionswinkel. Neben der Zielfunktion ist auch der Wert der negativen normierten Log-Likelihood-Funktion aufgetragen, der sich für die jeweilige Verteilung der Bildkoeffizienten bei Betrachtung des vollen Datensatzes ergeben würde. Die Fehler des μ - bzw. des δ -Bildes sind wieder in Form des NRMSE dargestellt. Das Protokoll “konstant” führt mit keinem Projektor zu einem sinnvollen Ergebnis. Zwar fällt die Zielfunktion insgesamt um fünf bis sechs Größenordnungen ab, jedoch resultiert dies in keiner nennenswerten Reduzierung der Fehler. Für μ zeigt der NRMSE wie bei der Rekonstruktion über den vollen Datensatz innerhalb der ersten Iterationen einen steilen Abfall. Allerdings nimmt er im Anschluss daran wieder zu und der Fehler in δ gleichzeitig nur minimal ab. Entsprechend zeigt $-l/l_0$, ausgewertet für den vollen Datensatz, nach anfänglichem Abfall auch eine monotone Zunahme. Für das Schema “interlaced” ergeben sich deutlichere Unterschiede zwischen den Projektoren. Im Fall der Methode nach Siddon bricht der Anstieg von $nrmse(\mu)$ nach ca. 500 Iterationen ab und weist danach einen schwächer werdenden Abfall auf. Das Verhalten spiegelt sich im Verlauf der Log-Likelihood-Funktion für den vollen Datensatz wieder. Für die anderen beiden Projektoren, ähnelt der prinzipielle Verlauf eher dem Schema “konstant”. Die absoluten Werte der Fehler sind dabei aber kleiner. Die geringsten Abweichungen zu den wahren Verteilungen von μ und δ liefern alle Projektoren für die zufällige Phasenabtastung. Die Rekonstruktion über den Projektor nach Siddon ist die einzige, die aufgrund eines hinreichend kleinen Gradienten terminiert. Die Rekonstruktion mit Blobs erreicht im Vergleich dazu trotz kleinerer Fehler die maximale Anzahl an Iterationen. Am schlechtesten schneidet hier der *distance-driven* Projektor ab, dessen Fehler in μ in der zweiten Hälfte der Rekonstruktion wieder merklich ansteigt.

Es lässt sich festhalten, dass sich nicht alle drei untersuchten Protokolle für die Rekonstruktion mit einem Phasestep pro Projektionswinkel eignen. Vermutlich benötigt die SIR über einen bestimmten Winkelbereich eine gewisse Phasenabtastung, um über die Korrelationen zwischen benachbarten Projektionswinkeln die drei Arten von Bildkoeffizienten bestimmen zu können. Im Fall des fixierten Analysatorgitters im Schema “konstant” ist dies nicht gegeben. Ebenso ist dies im Protokoll “interlaced” problematisch, da die Anzahl an Phasesteps hier mit 15,

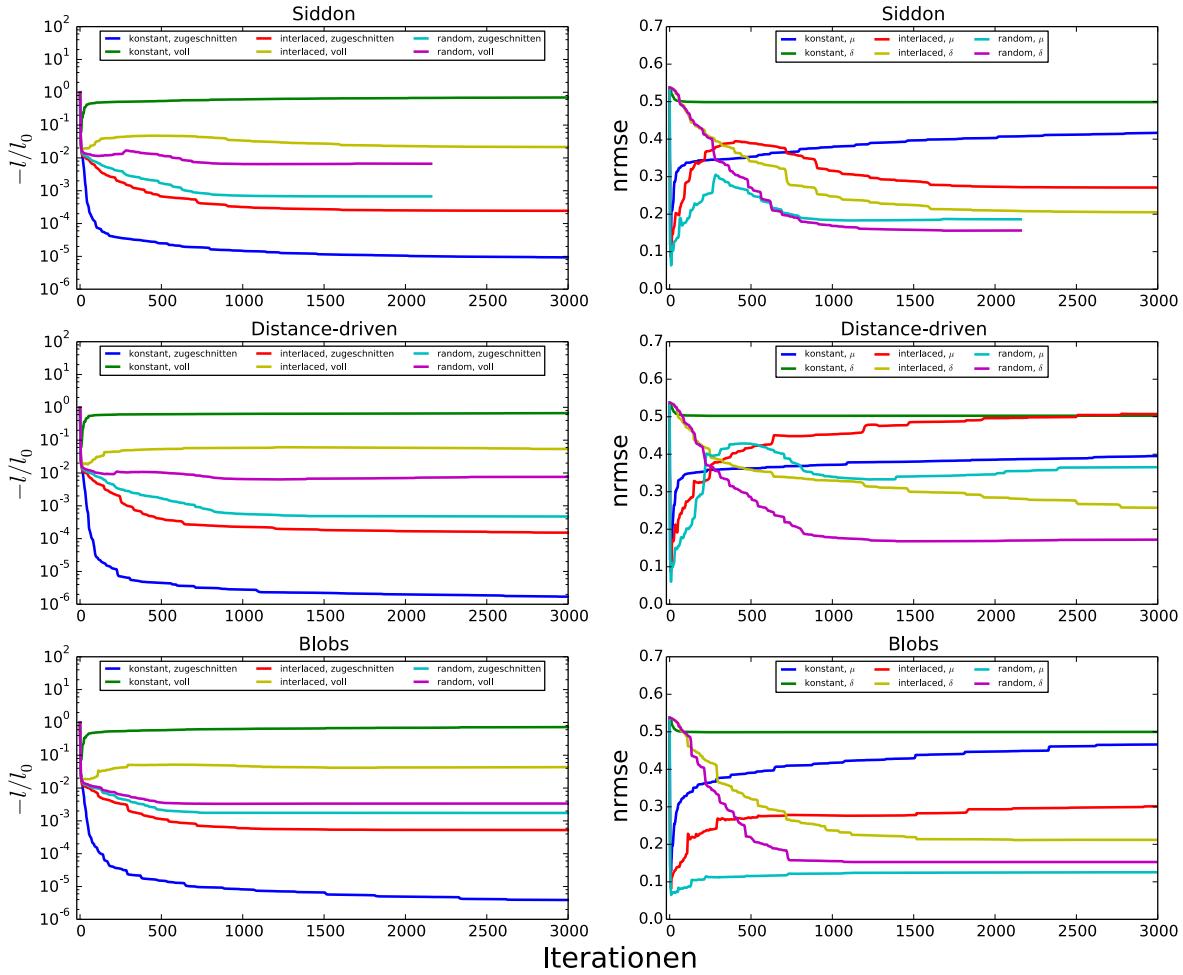


Abbildung 4.12: Verlauf der Zielfunktion (links) sowie der NRMSE (rechts) für die drei Protokolle “konstant”, “interlaced” und “random”.

im Vergleich zur Anzahl an Projektionswinkeln im vollen Datensatz, relativ groß ist. So führte eine Beschränkung des Schemas auf jeden dritten Phasestep für die Methode nach Siddon und die Rekonstruktion via Blobs zu erfolgreichen Rekonstruktionen, das heißt zu einer Termination der Optimierung über die Gradientenbedingung. Die Ergebnisse entsprechen dabei vom visuellen Eindruck her der Rekonstruktion bei zufälliger Phasenabtastung mit dem Projektor nach Siddon. Letztere ist in Abbildung 4.13 dargestellt. Im Vergleich zur ebenfalls abgebildeten Rekonstruktion mittels FBP aus drei Phasesteps bei je 120 Projektionswinkel zeigt sich, dass die SIR bei einem Phasestep pro Projektionswinkel zu deutlich verrauschteren Schnittbildern führt. Da die simulierten Daten unverrauscht waren, handelt es sich dabei um reines Rekonstruktionsrauschen. Damit kann die iterative Rekonstruktion vor allem bei einem Phasestep pro Projektionswinkel vom Einsatz sogenannter Regularisierungstechniken (Buzug, 2008) profitieren. Untersuchungen dazu finden sich in Abschnitt 4.3.2

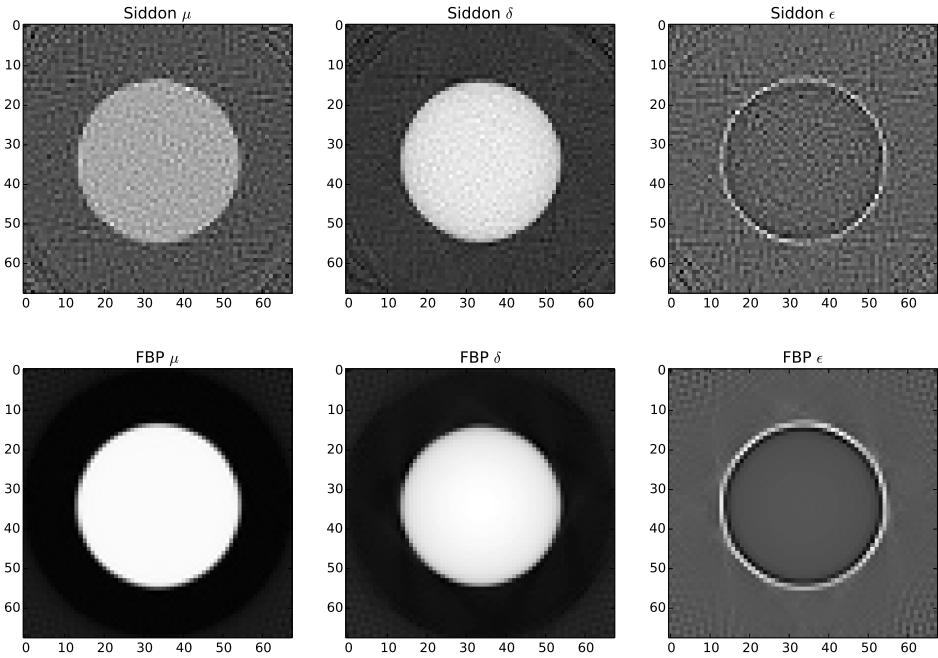


Abbildung 4.13: Tomographische Rekonstruktion eines Zylinders. Die obere Zeile zeigt die rekonstruierten Schnittbilder der SIR bei einem zufällig gewähltem Phasestep pro Projektionswinkel. In der unteren Zeile ist das Ergebnis einer FBP für die gleiche Anzahl an einzelnen Aufnahmen gezeigt.

4.2.2 Numerisches Phantom

Zusätzlich zu den simulierten Daten wurde der Rekonstruktionsalgorithmus anhand eines sogenannten numerischen Phantoms untersucht. Dazu wurde ein Shepp-Logan-Phantom aus dem Paket *scikit-image* (Van Der Walt et al., 2014) verwendet. Dieses wurde zunächst in Graustufen umgewandelt und von 400×400 auf 100×100 Pixel skaliert. Die Verteilungen der Bildkoeffizienten μ_j , δ_j und ϵ_j ergeben sich aus der Multiplikation der Grauwerte des Phantoms mit einem jeweils realistischen Skalierungsfaktor. Über das Vorwärtsmodell der SIR aus Gleichung 3.1 wurden Phasesteppingkurven generiert. Dies geschah für eine volle Rotation um 360° in 1° -Schritten bei jeweils 5 Phasesteps pro Projektionswinkel. Betrachtet wurde eine Zeile aus 140 Detektorpixeln, die in der Breite den Pixeln des Phantoms gleichen. Die perfekte Übereinstimmung der erzeugten Daten mit der Modellgebung der Rekonstruktion ist zwar unrealistisch, hat aber gegenüber der Evaluation anhand der simulierten Daten auch zwei Vorteile. Zum einen wird eine Betrachtung der Rekonstruktionsfehler für die Diffusionskoeffizienten ϵ_j ermöglicht. Zum anderen kann die Optimierung der Zielfunktion isoliert untersucht werden. Damit wird getestet, ob das verwendete CG-Verfahren zumindest prinzipiell in der Lage ist, das gesuchte Minimum der Zielfunktion zu finden.

Die iterative Rekonstruktion wurde für das numerische Phantom nur mit dem Projektor nach Siddon durchgeführt. Da die erzeugten Daten zu hundert Prozent dem Vorwärtsmodell entsprechen, werden keine nennenswerten Unterschiede zu den anderen Projektoren erwartet.

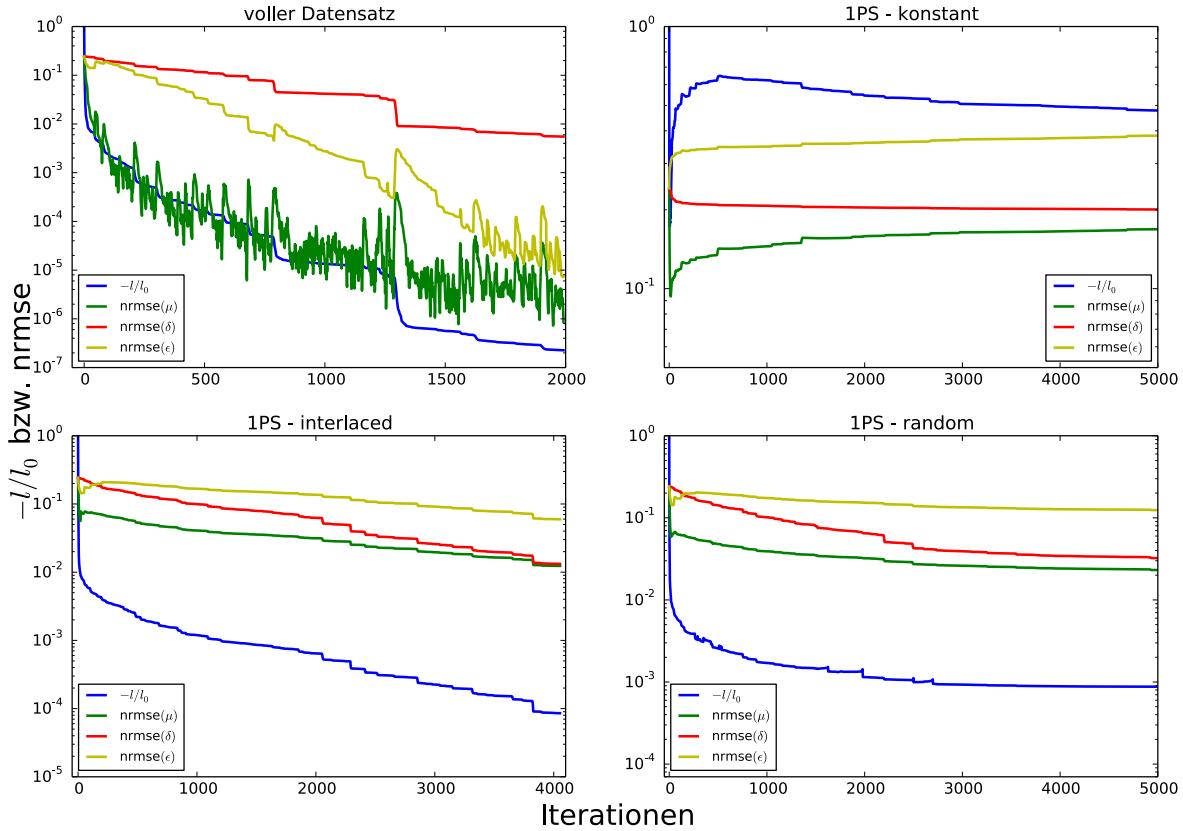


Abbildung 4.14: Verlauf der Log-Likelihood-Funktion sowie der NRMSE für alle Rekonstruktionen des numerischen Phantoms. Der Wert von $-l/l_0$ bezieht sich stets auf den vollen Datensatz.

Dem Phantom entsprechend, wurde auf einem Gitter aus 100×100 Voxeln rekonstruiert. Für den Startwert des CG-Verfahrens wurden wieder alle Bildkoeffizienten auf null gesetzt. Es galt $g_{\text{tol}} = 10^{-7}$ für die Abbruchbedingung an den Gradienten sowie $i_{\max} = 5000$ für die maximale Anzahl an Iterationen. Rekonstruktionen wurden mit dem kompletten Datensatz und über die drei in Abschnitt 4.2.1 vorgestellten Protokolle jeweils mit einem Phasestep pro Projektionswinkel durchgeführt. Wie im Fall der simulierten Daten, wurde die Zielfunktion nach jeder Iteration ausgewertet. Ebenso wurde der Fehler in jedem Bild in Form der NRMSE bestimmt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.14 dargestellt. Bei der Rekonstruktion über den vollen Datensatz nimmt die Zielfunktion um knapp sieben Größenordnungen ab. Nach ca. 2000 Iterationen unterschreitet der Gradient den Schwellenwert g_{tol} . Im Gegensatz zum entsprechenden Verlauf für die simulierten Daten in Abbildung 4.10 ist der Abfall hier aber weniger stark saturiert. Dies deutet darauf hin, dass das gesuchte Minimum der Zielfunktion, die benötigte Rechenzeit vorausgesetzt, beliebig genau erreicht werden kann. Das gleiche Verhalten zeigen die Fehler der Bilder. Das Absorptionsbild hat dabei den größten Einfluss auf die Log-Likelihood-Funktion, weshalb es am schnellsten konvergiert. Den größten relativen Fehler haben durchgehend die Bildkoeffizienten δ_j . Die finalen Werte der NRMSE von μ , δ

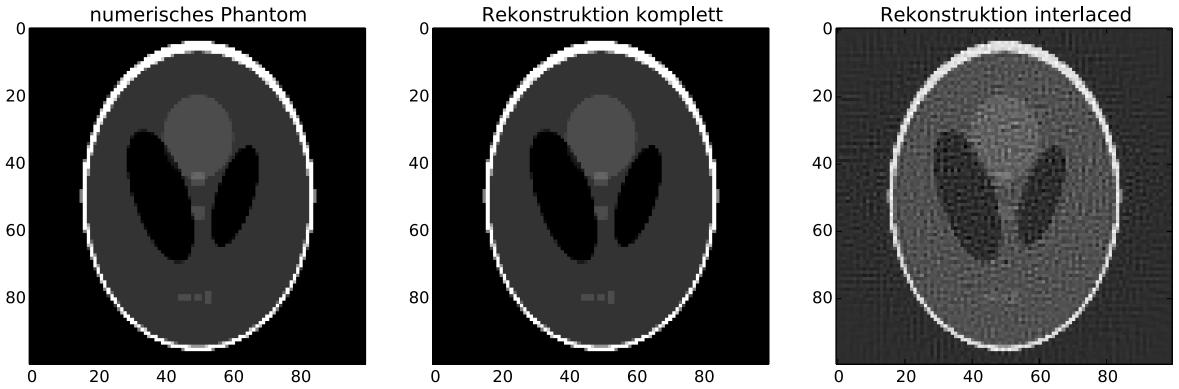


Abbildung 4.15: Verteilung des Diffusionskoeffizienten ϵ . Zwischen der wahren Verteilung im numerischen Phantom (links) und der Rekonstruktion mit der SIR über den vollen Datensatz ist kein Unterschied erkennbar. Die Rekonstruktion bei einem Phasestep pro Winkelschritt (rechts) ist dagegen deutlich verrauscht.

und ϵ sind ca. $9 \cdot 10^{-7}$, $6 \cdot 10^{-3}$ und $8 \cdot 10^{-6}$. Skaliert man die gesamte Grauskala bei der Darstellung der Bilder auf das Intervall zwischen dem minimalen und dem maximalen Wert, so sind diese Fehler im Vergleich zum tatsächlichen Phantom mit bloßem Auge nicht erkennbar, siehe dazu Abbildung 4.15. Auffällig sind die Schwankungen im Verlauf von $nrmse(\mu)$ und $nrmse(\epsilon)$. Während die Zielfunktion monoton abnimmt, steigen die Fehler in diesen beiden Bildern zum Teil auch wieder. Besonders ausgeprägt sind die Zunahmen, wenn der Fehler von δ stark abnimmt. Dies deutet darauf hin, dass die einzelnen Bildinformationen bei der Konvergenz der Log-Likelihood-Funktion zum Teil gegeneinander arbeiten.

Für die Rekonstruktionen bei einem Phasestep pro Winkelschritt wurde die Zielfunktion in Abbildung 4.14 für den kompletten Datensatz ausgewertet. Dadurch wird eine bessere Evaluation und ein einfacherer Vergleich der Rekonstruktionen ermöglicht, als durch den Verlauf von $-l/l_0$ bezogen auf die zugeschnittenen Daten, da dieser stets monoton abfällt. Wie im Fall der simulierten Daten in Abschnitt 4.2.1 eignet sich die Aufnahme mit fixiertem Analysatorgitter nicht zur Rekonstruktion. Die Fehler von μ und ϵ nehmen hier nach anfänglichem Abfall monoton zu. Ein besseres Konvergenzverhalten weisen die Protokolle ‘‘interlaced’’ und ‘‘random’’ auf. Auch wenn im zweitgenannten Schema die Rekonstruktion nach der maximalen Anzahl an Iterationen abbricht und die verbleibenden Fehler etwas größer sind, ähneln sich die beobachteten Verläufe in beiden Fällen. Die Fehler von μ und δ gleichen sich nahezu an, während $nrmse(\epsilon)$ um knapp eine Größenordnung darüber liegt. Im Vergleich zur wahren Verteilung des Phantoms sind die rekonstruierten Schnittbilder jedoch merklich verrauscht. Für den Diffusionskoeffizienten ϵ ist dies besonders ausgeprägt und in Abbildung 4.15 gezeigt. Zwischen feineren Strukturen, wie beispielsweise in der Mitte von Zeile 80 des Phantoms, und dem Bildrauschen lässt sich hier kaum differenzieren. Ein markanter Unterschied der Protokolle ‘‘interlaced’’ und ‘‘random’’ ist das Konvergenzverhalten ab ca. 2500 Iterationen. Während für die zufällige Phasenabtastung der Abfall der Zielfunktion bzw. der Fehler stagniert, ergeben sich im Schema ‘‘interlaced’’ auch in den letzten Iterationen noch Verbesserungen. Eine weitere Rekonstruktion mit einem niedrigeren Schwellenwert g_{tiol} und maximal 10^4 Iterationen bestätigt dies. Ähnlich zur Rekonstruktion über

den vollen Datensatz, scheint das Protokoll “interlaced” das Erreichen des gesuchten Minimums zu ermöglichen, wenn auch deutlich langsamer. Im Fall des Protokolls “random” konvergiert die Zielfunktion in eine verrauschte Lösung. Da der Wert der negativen Log-Likelihood-Funktion für diese Lösung jedoch größer ist als für die wahre Verteilung der Bildkoeffizienten im Phantom, handelt es sich dabei vermutlich um ein lokales Extremum. Derartige Bereiche im Lösungsraum können durch den Einsatz geeigneter Regularisierungstechniken bestraft werden. Letztere stellen damit eine vielversprechende Möglichkeit dar, die Konvergenz in das globale Extremum zu forcieren bzw. diese zu beschleunigen.

4.2.3 Messdaten

Simulationen und numerische Phantome bieten eine gute Plattform, Rekonstruktionsalgorithmen zu untersuchen und dabei mögliche Fehlerquellen isoliert zu betrachten. Dennoch ist es unerlässlich, entsprechende Analysen auch für experimentelle Daten durchzuführen, wie sie in späteren Anwendungen vorkommen. Hier wird dazu die Messung eines Phantoms bestehend aus drei Polymerzylindern verwendet. Die Zylinder bestehen aus PVC, PMMA und PTFE mit Durchmessern von 6 mm, 3 mm und 5 mm. Die Messung umfasst 1001 gleichmäßig über 360° verteilte Projektionen mit jeweils elf Phasesteps. Die Detektorpixel wurden zu Gruppen aus 6×6 Pixeln zusammengefasst. Zusätzliche Informationen zu dieser Messung finden sich bei Weber et al. (2015).

Aus dem gruppierten Datensatz wurde eine Detektorzeile für die Rekonstruktion eines Schnittbildes ausgewählt. Die iterativen Rekonstruktionen wurden mit $g_{\text{tol}} = 10^{-7}$ sowie $i_{\text{max}} = 3000$ durchgeführt und mit Startbildern initialisiert deren Bildkoeffizienten auf null gesetzt waren. Für die voxelbasierten Projektoren und die Referenzrekonstruktion mittels FBP wurde ein Gitter aus 60×60 Voxeln gewählt. Des Weiteren wurden zwei Rekonstruktionen über 60×60 Blobs – nachfolgend als Blobs (fein) bezeichnet – mit $a = 2,0 \cdot d_d$, $m = 3$ und $\alpha = 10,017$ sowie über 48×48 Blobs – nachfolgend als Blobs (grob) bezeichnet – mit $a = 2,5 \cdot d_d$, $m = 2$ und $\alpha = 10,826$ durchgeführt. Die Werte von α wurden dabei entsprechend Gleichung 4.42 gewählt. Eine Zusammenfassung der rekonstruierten Schnittbilder ist in Abbildung 4.16 gezeigt. Die SIR erzielt wie im Fall der simulierten Daten in Abschnitt 4.2.1 für alle drei Bildmodalitäten Ergebnisse, die vergleichbar mit denen der FBP sind. Sowohl über den Absorptions- als auch über den Phasenkontrast lassen sich die drei verschiedenen Materialien in allen Rekonstruktionen klar unterscheiden. Das Dunkelfeldbild zeigt ein starkes Signal an den Kanten der Zylinder. Zusätzlich weist der Zylinder aus PTFE ein konstantes Signal im Visibility-Kontrast auf. Es ist, aufgrund der starken Absorption innerhalb dieses Objekts, auf Strahlauflösung zurückzuführen. Das Bildrauschen ist für die voxelbasierten Projektoren stärker ausgeprägt. Über die in Abschnitt 4.1.3 diskutierten Eigenschaften der Blobs zeigt vor allem die Rekonstruktion Blobs (grob) trotz fehlender Regularisierung eine Art inhärente Glättung. Vom Rauschverhalten gleicht sie der FBP dadurch deutlich mehr als die Resultate über die anderen beiden Projektoren. Eine quantitative Beurteilung des Rauschens erfolgt gegen Ende dieses Abschnitts anhand der CNRs in den rekonstruierten Schnittbildern.

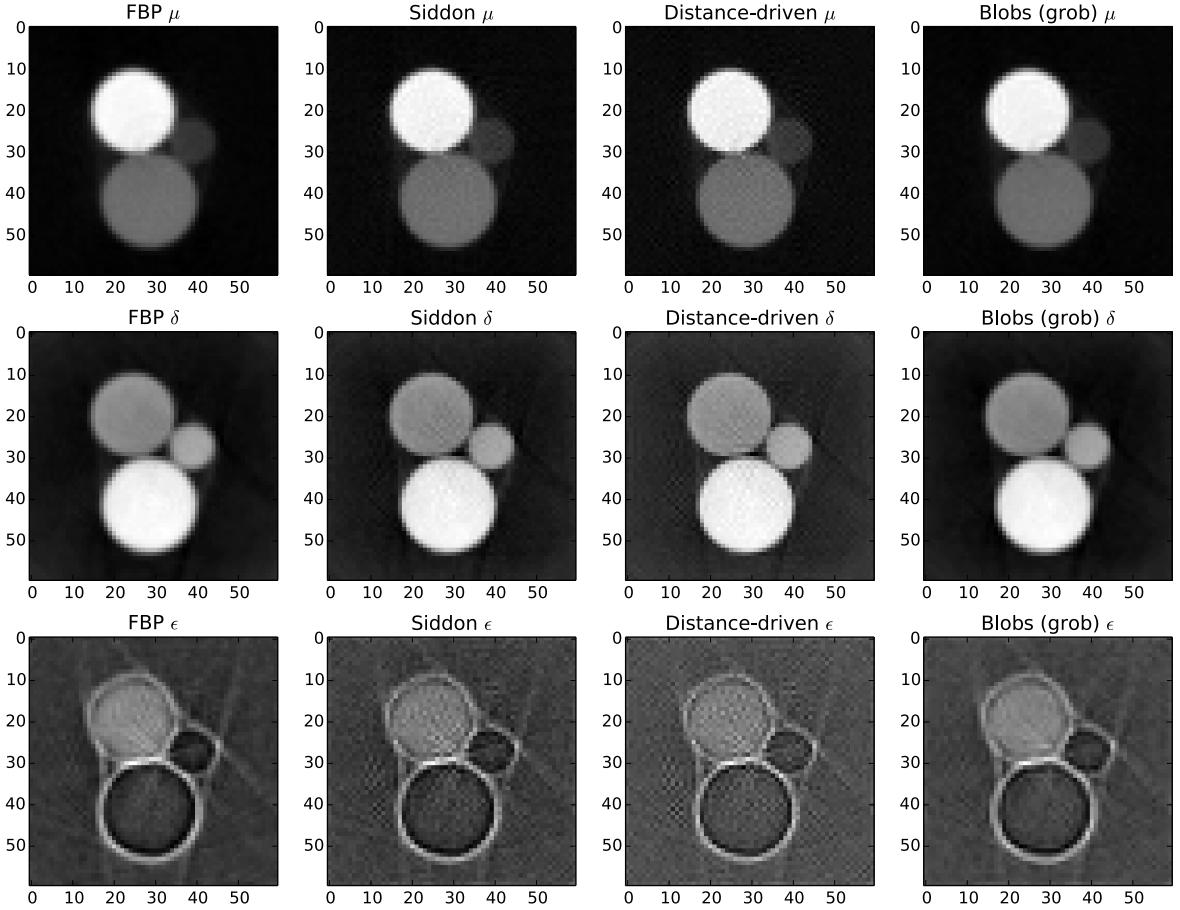


Abbildung 4.16: Rekonstruierte Schnittbilder des Phantoms. Gezeigt sind die Verteilungen von μ , δ und ϵ aus der FBP, aus den Rekonstruktionen mit der Methode nach Siddon und dem distance-driven Projektor sowie aus der Rekonstruktion Blobs (grob).

Konvergenz

Zur Analyse der Konvergenz wurde, analog zu den vorherigen Untersuchungen, die Zielfunktion $-l/l_0$ für das Zwischenergebnis nach jeder Iteration des Algorithmus ausgewertet. Wie in Abbildung 4.17 zu sehen ist, unterscheiden sich die Verläufe der Log-Likelihood-Funktion, verglichen für die verschiedenen Projektoren, kaum voneinander. Die Zielfunktion fällt innerhalb der ersten 10 Iterationen sehr steil um ungefähr zwei Größenordnungen ab. Anschließend nimmt die Steilheit des Abfalls rapide ab und nach ca. 500 Iterationen erreicht die Log-Likelihood-Funktion nahezu ihren finalen Wert. Auffallend ist, dass die Rekonstruktionen über Blobs im Vergleich zu den voxelbasierten Projektoren in etwa die doppelte Anzahl an Iterationen benötigen bis der Gradient den vorgegebenen Schwellenwert g_{tol} unterschreitet.

Ein besseres Verständnis des Konvergenzverhaltens liefert die einzelne Betrachtung der drei Bilder nach jeder Iteration. Da für die Messdaten keine wahre Verteilung der Bildkoeffizienten vorliegt und eine solche aufgrund spektraler Effekte auch nur schwierig und ungenau zu bestimmen wäre, erfolgt die Betrachtung der Konvergenz in den einzelnen Bildern \mathbf{f} hier nicht

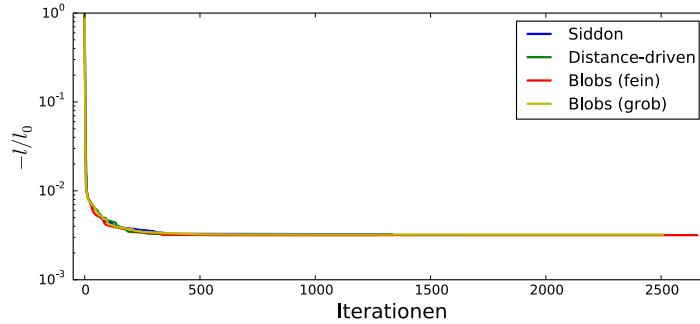


Abbildung 4.17: Verlauf der Zielfunktion in Abhängigkeit der verschiedenen Projektoren

über den NRMSE, sondern über den Korrelationskoeffizienten

$$\text{CC}(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{final}}) = \frac{\text{Cov}(\mathbf{f}, \mathbf{f}_{\text{final}})}{\sigma(\mathbf{f})\sigma(\mathbf{f}_{\text{final}})}. \quad (4.46)$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{f}_{\text{final}}$ das jeweils finale Bild am Ende einer Rekonstruktion, Cov die Kovarianz zweier und σ die Standardabweichung eines Bildes. Der Korrelationskoeffizient wurde unter anderem von Li et al. (2011) zur Quantifizierung der Ähnlichkeit zweier Bilder eingesetzt. Er nimmt Werte aus dem Intervall $[-1, 1]$ an, wobei größere Werte eine bessere Übereinstimmung signalisieren. Abbildung 4.18 zeigt den Verlauf der Korrelationskoeffizienten für die durchgeföhrten iterativen Rekonstruktionen. Für alle Projektoren konvergiert der Korrelationskoeffizient des Absorptionsbildes innerhalb der ersten Iterationen gegen eins. Er ist folglich für den anfänglichen steilen Abfall der Zielfunktion verantwortlich. Das Dekrement δ erreicht diesen Wert nach ungefähr 600 Iterationen. Die größten Variationen zeigt der Korrelationskoeffizient von ϵ . Während im Fall der voxelbasierten Projektoren hier bereits nach ca. 300 Iterationen ein dem Endresultat sehr ähnliches Bild vorliegt, dauert dies bei den Rekonstruktionen über Blobs mit mehr als 1400 Iterationen ungleich länger. Die Betrachtung des Gradienten der Zielfunktion ergibt, dass trotz der schnellen Konvergenz im Absorptionsbild die Komponenten $\partial l / \partial \mu_j$ im Mittel die größten Werte aufweisen und als letztes unter den Schwellenwert g_{tol} fallen. Jedoch bewegen sich die Maximalwerte der Komponenten $\partial l / \partial \epsilon_j$ für die Rekonstruktionen über Blobs in der gleichen Größenordnung. Der Gradient in den voxelbasierten Rekonstruktionen liegt hier im Mittel um eine Größenordnung darunter. Damit lässt sich festhalten, dass in diesem Fall die Repräsentation durch Blobs für das Dunkelfeld schlechter abschneidet als die durch Voxel. Die Vermutung, dass dies durch den größeren Träger erstgenannter Bildbasisfunktion im Zusammenspiel mit den scharf begrenzten Kantensignalen bedingt ist, konnte final nicht bestätigt werden.

Konvergenz bei einem Phasestep pro Projektionswinkel

Die Möglichkeit der CT-Rekonstruktion bei einem Phasestep pro Winkelschritt wurde auch für den experimentellen Datensatz untersucht. Dabei wurden die Daten, wie in Abschnitt 4.2.1 beschrieben, gemäß den Aufnahmeschemata ‘‘interlaced’’ und ‘‘random’’ zugeschnitten. Iterative Rekonstruktionen wurden mit allen drei Projektoren durchgeführt. Die verwendeten

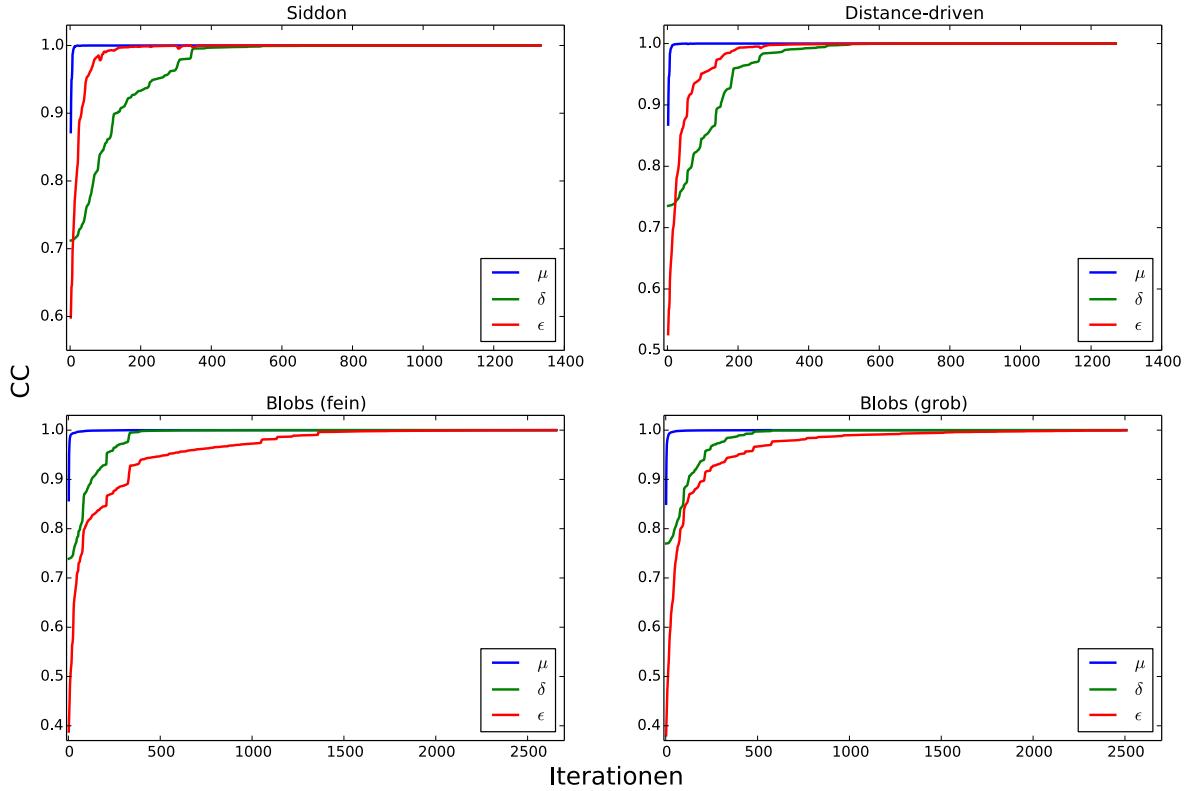


Abbildung 4.18: Verlauf der berechneten Korrelationskoeffizienten für die verschiedenen Bildmodalitäten und Projektoren

Einstellungen entsprachen den Rekonstruktionen über den kompletten Datensatz. Im Fall der Blobs wurden die Parameter der Rekonstruktion Blobs (grob) herangezogen. Zur Untersuchung des Konvergenzverhaltens wurde die Zielfunktion $-l/l_0$ nach jeder Iteration für den kompletten Datensatz ausgewertet. Ebenso wurde der Korrelationskoeffizient über Gleichung 4.46 jeweils bezüglich der Rekonstruktionsergebnisse $\mathbf{f}_{\text{final}}$ des vollen Datensatzes berechnet. Die Ergebnisse zeigt Abbildung 4.19. Der Verlauf der Zielfunktion weist keine großen Abweichungen im Vergleich zu den Rekonstruktionen über den kompletten Datensatz auf. Gleiches gilt für die Korrelationskoeffizienten von μ und δ . Beide erreichen unabhängig vom verwendeten Projektor Werte sehr nahe von eins. Dabei schneidet das Aufnahmeschema ‘‘random’’ stets minimal besser ab als ‘‘interlaced’’. Für den Diffusionskoeffizienten des Dunkelfeldes nimmt der Korrelationskoeffizient Werte zwischen 0,6 und 0,9 an. Die größeren Abweichungen zu den Schnittbildern aus Abbildung 4.16 ergeben sich aufgrund eines verstärkten Rauschens, wie ein Vergleich mit Abbildung 4.20 zeigt. Für die Rekonstruktion der dort gezeigten Schnittbilder wurde zufällig je einer der elf vorhandenen Phasesteps gewählt. Die applizierte Dosis beträgt damit nur ein Elftel derjenigen, die für die Rekonstruktionen aus Abbildung 4.16 aufgewandt wurde. Als Referenz dient wiederum eine Rekonstruktion mittels FBP. Damit diese bezüglich der applizierten Dosis den zugeschnittenen Datensätzen der SIR entspricht, wurde nur jeder elfte Winkelschritt, insgesamt also 91 Projektionen, betrachtet. Dadurch nimmt der Rauschpegel

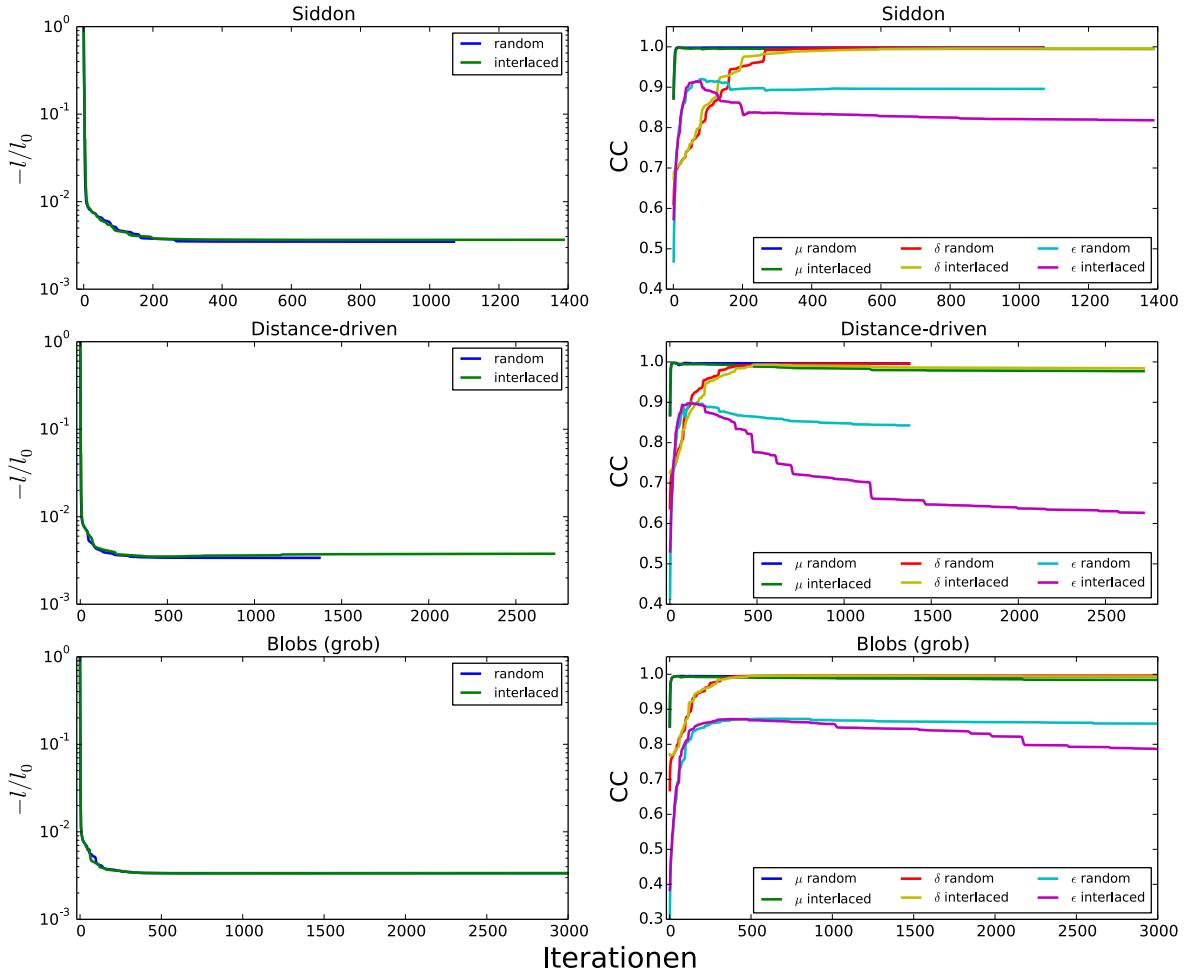


Abbildung 4.19: Verlauf der berechneten Korrelationskoeffizienten für die Rekonstruktionen mit einem verwendeten Phasestep pro Projektionswinkel

in den Bildern zu. Wie bereits für die Rekonstruktionen über alle Messdaten, ähnelt das Rauschverhalten der Rekonstruktion mittels Blobs der gefilterten Rückprojektion am meisten.

CNRs

Der Kontrast in einem Bild ist ein Maß für die unterschiedliche Signalstärke in zwei seiner Bereiche. Er stellt eine wichtige Größe zur Bewertung der Bildqualität dar, da die zugänglichen Informationen eines Bildes, unabhängig vom bildgebenden Verfahren, in der erzeugten Signaldifferenz unterschiedlicher Objekte liegen (Brahme, 2014). Die Erkennbarkeit eines vorliegenden Kontrastes ist eng mit der Stärke des Rauschens in den entsprechenden Bildbereichen verknüpft. Aussagekräftiger als der Kontrast alleine ist folglich das sogenannte Kontrast-Rausch-Verhältnis (Bushberg et al., 2002)

$$CNR = \frac{|S_A - S_B|}{\sigma}. \quad (4.47)$$

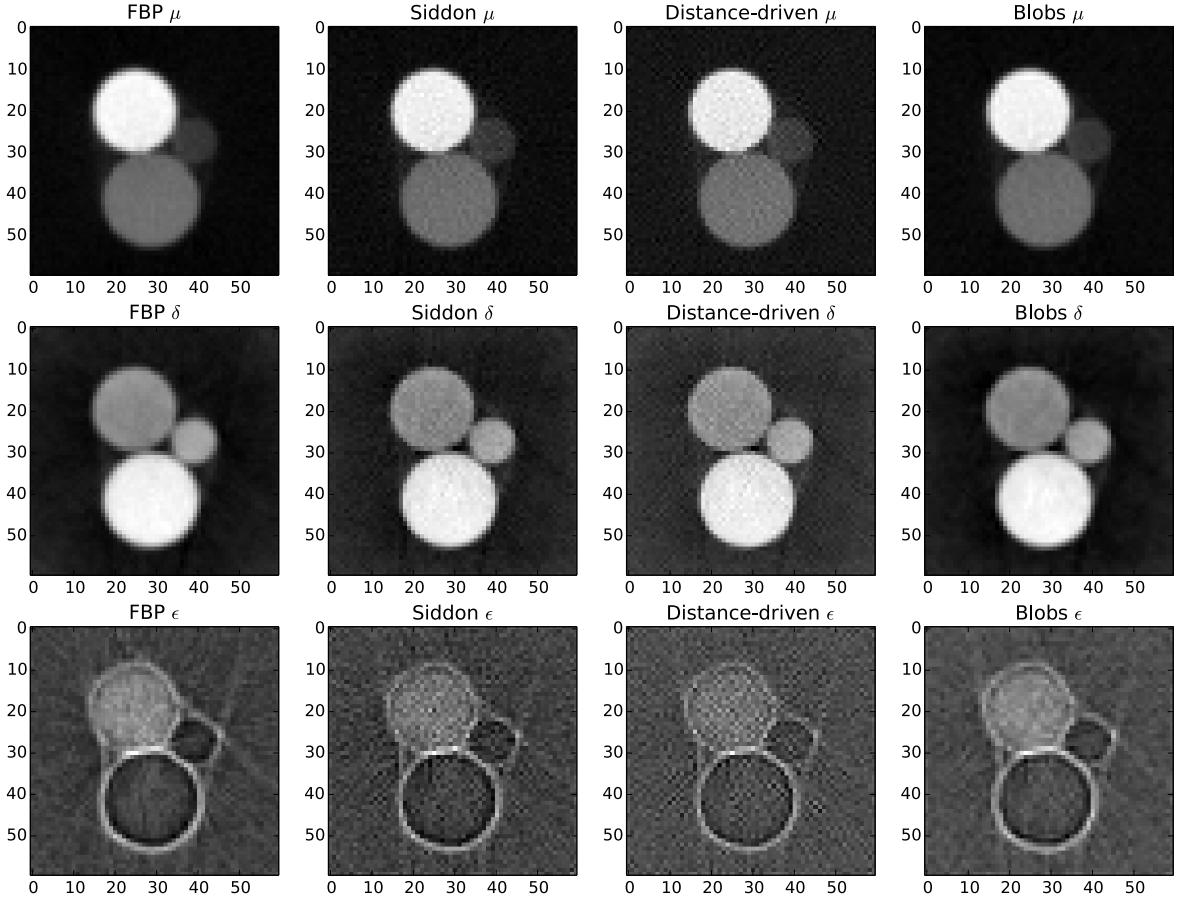


Abbildung 4.20: Rekonstruierte Schnittbilder des Phantoms. Für die gefilterte Rückprojektion wurde nur jeder elfte Winkelschritt berücksichtigt, während die Rekonstruktionen mittels der SIR einen zufällig gewählten Phasestep pro Projektionswinkel verwenden.

Dabei bezeichnet S_A bzw. S_B das jeweils mittlere Signal aus dem entsprechenden Bildbereich (ROI für *region of interest*) und

$$\sigma = \sqrt{\sigma_A^2 + \sigma_B^2} \quad (4.48)$$

die Standardabweichung des kombinierten Rauschens beider Bereiche.

Das gemessene Phantom eignet sich aufgrund der erwarteten konstanten Signalstärke in jedem Zylinder gut zur Bestimmung der CNRs. In den rekonstruierten Schnittbildern wurden dazu in jedem Zylinder und im Hintergrund eine ROI von jeweils 7×7 Voxeln ausgewählt, siehe Abbildung 4.21. Über Gleichung 4.47 wurden die Kontrast-Rausch-Verhältnisse zwischen diesen Bereichen bestimmt. Sie sind in Tabelle 4.1 für alle durchgeführten Rekonstruktionen aufgeführt. Die Rekonstruktionen über die gefilterte Rückprojektion zeigen durchweg höhere CNR-Werte als die Ergebnisse der SIR. Damit bestätigt sich der visuelle Eindruck, dass letztere mehr Bildrauschen aufweisen. Unter den verschiedenen Projektoren der SIR zeigen die Rekonstruktionen auf Basis der Blobs das beste Rauschverhalten, gefolgt von der Methode nach Siddon und dem *distance-driven* Projektor. Dies ist auf die in Abschnitt 4.1.3 diskutierten Eigenschaf-

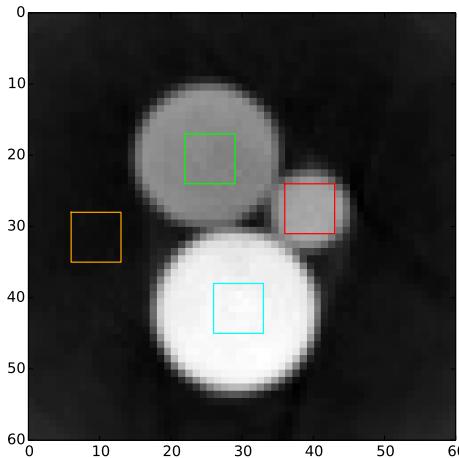


Abbildung 4.21: Schnittbild von δ mit den ROIs zur Bestimmung der CNRs. Im Hintergrund (orange) sowie im PTFE- (grün), im PMMA- (rot) und im PVC-Zylinder (türkis) besteht die ROI aus jeweils 7×7 Voxeln.

ten der Blobs zurückzuführen, nämlich ihre effektive Bandbegrenzung und ihren paarweisen Überlapp im Bild. Vergleicht man die beiden Rekonstruktionen Blobs (fein) und Blobs (grob), so führt der größere Radius der Blobs in der letztgenannten Rekonstruktion zu einer stärkeren Bandbegrenzung. Die infolgedessen zunehmende Glättung geht wohl mit einer Abnahme der Auflösung einher, da letztere durch den Radius der Blobs limitiert ist.

Im Fall der Rekonstruktionen bei verminderter Dosis, das heißt bei Verwendung eines Phasesteps pro Projektion in der SIR und einer Rekonstruktion über lediglich 91 Projektionswinkel mittels FBP, fällt auf, dass die relative Abnahme der CNR-Werte vor allem für die voxelbasierten Projektoren in der SIR deutlich größer ist als für die FBP. Des Weiteren schneidet die zufällige Phasenabtastung für die voxelbasierten Projektoren einheitlich besser ab als das Aufnahmeschema ‘‘interlaced’’, während dies bei den Blobs von Materialkombination zu Materialkombination variiert.

Tabelle 4.1: Kontrast-Rausch-Verhältnisse in den Rekonstruktionen der Polymerzyylinder. Die erste Spalte gibt die jeweils verwendete Rekonstruktionsmethode an. In den restlichen Spalten sind die gemessenen CNR-Werte der Bildmodalitäten für die möglichen Materialkombinationen aufgeführt. Bezüglich des Streukoeffizienten ϵ des Dunkelfeldes wurde lediglich die Kombination PTFE/Luft betrachtet, da die anderen Zylinder ausschließlich an ihren Kanten einen Visibilitätsverlust aufweisen. Für die Rekonstruktionen mit Regularisierung (+ Reg.) siehe Abschnitt 4.3.2.

Methode	PMMA/Luft		PMMA/PVC		PMMA/PTFE		PVC/Luft		PVC/PTFE		PTFE/Luft		
	μ	δ	μ	δ	μ	δ	μ	δ	μ	δ	μ	δ	ϵ
FBP	13,32	27,85	15,34	14,25	52,57	4,85	37,90	67,83	46,01	24,37	88,99	29,35	7,82
Siddon	6,96	18,90	8,52	10,09	27,30	3,57	21,89	32,00	24,68	13,66	47,11	14,41	3,54
Distance-driven	6,23	16,72	7,10	9,29	24,12	3,05	16,88	28,66	19,37	11,93	40,63	12,22	2,39
Blobs (fein)	8,98	21,85	9,98	12,35	33,54	4,35	22,41	42,83	25,14	19,61	52,57	20,17	3,39
Blobs (grob)	12,81	24,79	15,11	13,90	49,54	5,10	37,74	51,64	42,44	24,61	84,93	25,79	6,89
FBP (91 Proj.)	10,68	26,15	13,98	13,12	44,87	4,57	27,80	52,82	36,97	21,21	60,31	26,17	5,03
Siddon interlaced	3,03	11,31	3,50	6,04	13,06	2,45	7,17	17,80	9,35	8,21	19,48	8,15	1,81
Siddon random	4,44	12,23	5,75	6,70	17,50	2,36	12,75	23,01	14,69	9,70	25,70	10,04	2,11
Distance-driven interlaced	1,32	6,29	1,57	3,63	5,97	1,25	3,65	9,52	5,22	4,43	10,60	4,41	0,93
Distance-driven random	3,66	10,72	4,45	5,94	13,90	2,08	10,13	18,91	11,32	8,26	21,02	8,46	1,47
Blobs (grob) interlaced	9,36	20,85	10,22	11,46	38,13	4,03	19,97	35,39	24,98	16,15	53,18	17,06	4,04
Blobs (grob) random	9,02	19,18	10,81	10,64	36,23	3,72	21,60	43,66	26,50	18,35	50,13	20,05	3,66
Siddon + Reg.	14,61	18,16	18,65	12,16	61,68	3,16	53,10	57,72	67,95	29,43	121,67	33,52	7,21
Siddon interlaced + Reg.	13,99	15,98	17,78	10,46	61,06	3,01	44,36	46,67	59,83	24,33	109,79	28,40	5,64
Siddon random + Reg.	12,46	14,77	16,59	10,56	57,95	2,62	41,28	55,23	64,62	28,66	105,44	29,29	4,76

4.3 Verbesserungen des Rekonstruktionsalgorithmus

Die Betrachtungen in Abschnitt 4.2 haben gezeigt, dass die SIR verglichen mit der FBP zwei wesentliche Nachteile hat. Zum einen terminiert sie erst nach mehreren hundert bis tausend Iterationen. Damit ist sie langsam und mit einem hohen Rechenaufwand verbunden. In diesem Abschnitt soll diesbezüglich untersucht werden, inwieweit die Konvergenz des CG-Verfahrens durch die Wahl geeigneter Startwerte beschleunigt werden kann. Zum anderen weisen die iterativ rekonstruierten Schnittbilder ein bisweilen stark ausgeprägtes Rekonstruktionsrauschen auf. Bedingt ist dies einerseits durch Diskrepanzen zwischen der Modellierung des Messvorgangs und den eigentlichen Daten, die dazu führen, dass verrauschte Verteilungen der Bildkoeffizienten zu einem besseren Wert der Likelihood-Funktion führen. Andererseits können, wie in Abschnitt 4.2.2 gesehen, derartig verrauschte Verteilungen aufgrund der mangelnden Konvexität der Zielfunktion auch lokale Extrema im Lösungsraum darstellen, welche der Optimierungsalgorithmus anläuft. Im zweiten Teil dieses Abschnitts wird die Zielfunktion um einen sogenannten Regularisierungsterm erweitert, welcher verrauschte Lösungen bestrafen, und somit das Erreichen der wahren Verteilungen forcieren sowie eventuell beschleunigen soll.

4.3.1 Wahl von Startwerten für die SIR

Für die in Abschnitt 4.2 durchgeführten Rekonstruktionen wurde das CG-Verfahren mit Verteilungen gestartet in denen alle Bildkoeffizienten auf null gesetzt waren. Es ist zu erwarten, dass sich die Konvergenz beschleunigt, wenn die verwendeten Startwerte bereits näher am Endresultat liegen. Dazu bietet es sich an, die iterative Optimierung mit dem Ergebnis einer gefilterten Rückprojektion zu starten. Diese Vorgehensweise ist zunächst nur praktikabel, wenn mindestens drei Phasenabtastpunkte pro Winkelschritt vorliegen, sodass eine Phasenrekonstruktion durchgeführt werden kann.

Bei der Rekonstruktion über Blobs gilt es, diesbezüglich eine Schwierigkeit zu beachten. Der Prozess, das durch die Blobs repräsentierte Schnittbild auf einem Gitter abzutasten, kann durch eine lineare Gleichung beschrieben werden, ist im Allgemeinen aber nicht invertierbar. Um diese Tatsache zu umgehen, wird über die Methode *linalg.pinv* aus *SciPy* die sogenannte Moore-Penrose-Inverse (Penrose, 1955) der Matrix bestimmt, welche die lineare Gleichung beschreibt. Unter Verwendung dieser Pseudoinversen kann das Ergebnis der FBP approximativ auf ein Gitter aus Blobs übertragen werden, welches dann seinerseits als Startwert für die iterative Rekonstruktion fungieren kann.

Das Abschätzen von Startwerten erschwert sich, wenn die Phasenabtastung eine direkte Phasenrekonstruktion nicht erlaubt. Für die nachfolgend präsentierten Ergebnisse wurden dazu aus den zugeschnittenen Daten der Objektmessung pixelweise Phasesteppingkurven durch eine zweidimensionale Interpolation über den Projektionswinkel γ und die Phase $2\pi x_s$ der Abtastposition bestimmt. In Abbildung 4.22 findet sich ein Vergleich des Ergebnisses einer solchen Interpolation mit dem vollen Datensatz. Der Startwert für die SIR ergibt sich aus einer Phasenrekonstruktion der interpolierten Daten und einer anschließenden FBP. Für den Messdatensatz aus Abschnitt 4.2.3 lieferte bereits eine einfache Nächster-Nachbar-Interpolation stabil verwendbare Ergebnisse, siehe Abbildung 4.23. Ob diese Methode auch für komplexere Messobjekte verwendbar ist, muss in zukünftigen Arbeiten verifiziert werden.

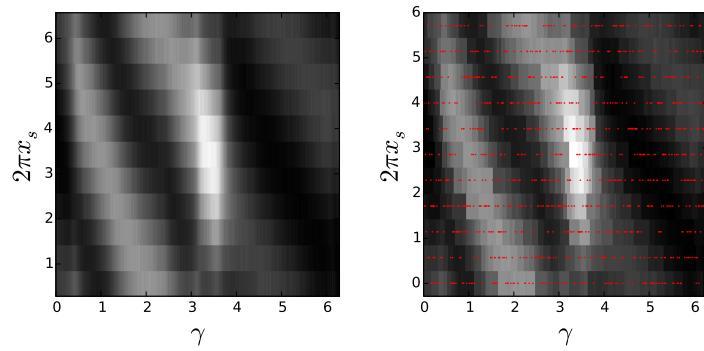


Abbildung 4.22: Gemessene Intensitätswerte eines Detektorpixels aufgetragen gegen den Projektionswinkel γ und die Phase $2\pi x_s$ der Position des G2-Gitters. Das linke Bild stellt den vollen Datensatz dar. Rechts sind die entsprechenden Werte aus einer Nächster-Nachbar-Interpolation abgebildet. Die dabei verwendeten Stützstellen aus jeweils einem zufällig gewählten Phasestep pro Projektionswinkel sind durch die roten Punkte gekennzeichnet.

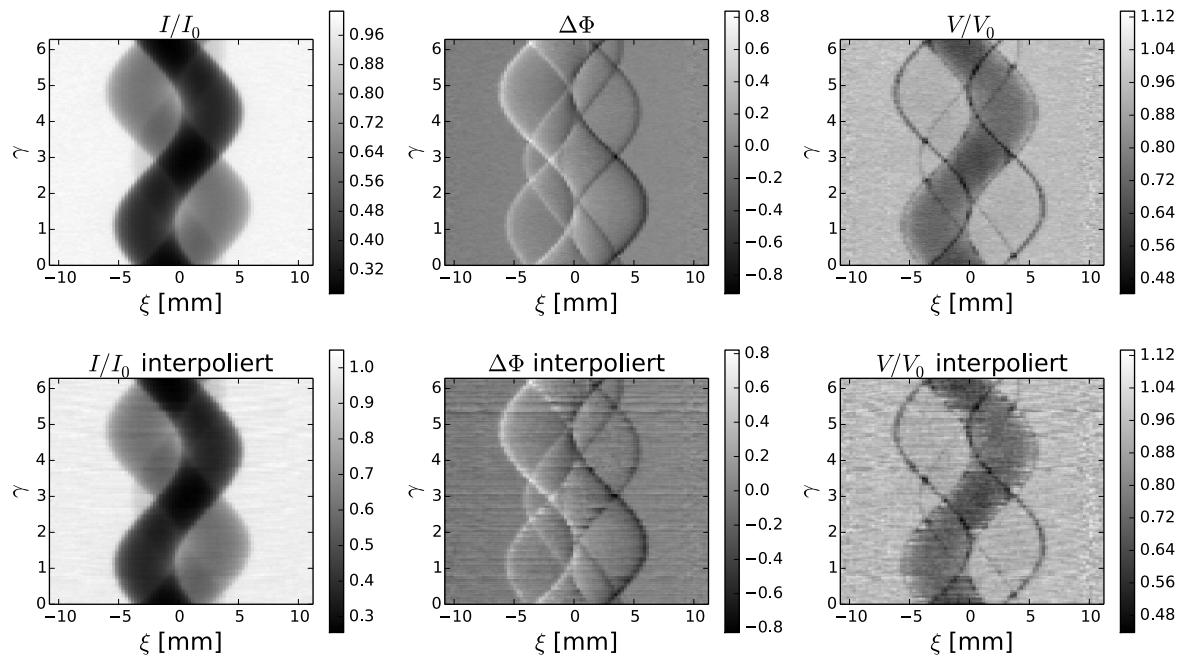


Abbildung 4.23: Sinogramme der Transmission I/I_0 , des differentiellen Phasenkontrasts $\Delta\Phi$ und des Dunkelfelds V/V_0 . Die erste Zeile zeigt die Resultate aus dem vollen Datensatz, die zweite die Ergebnisse bei einem zufällig gewählten Phasestep pro Winkelschritt nach Verwendung der pixelweisen Interpolation aus Abbildung 4.22.

Analog zu Abschnitt 4.2.3 wird das Konvergenzverhalten der einzelnen Schnittbilder anhand des Verlaufs der Korrelationskoeffizienten betrachtet. Rekonstruktionen mit einem Startwert aus der gefilterten Rückprojektion wurden für den vollen Datensatz und für einen zufällig ausgewählten Phasestep pro Winkelschritt durchgeführt. In Abbildung 4.24 sind die entsprechenden Verläufe

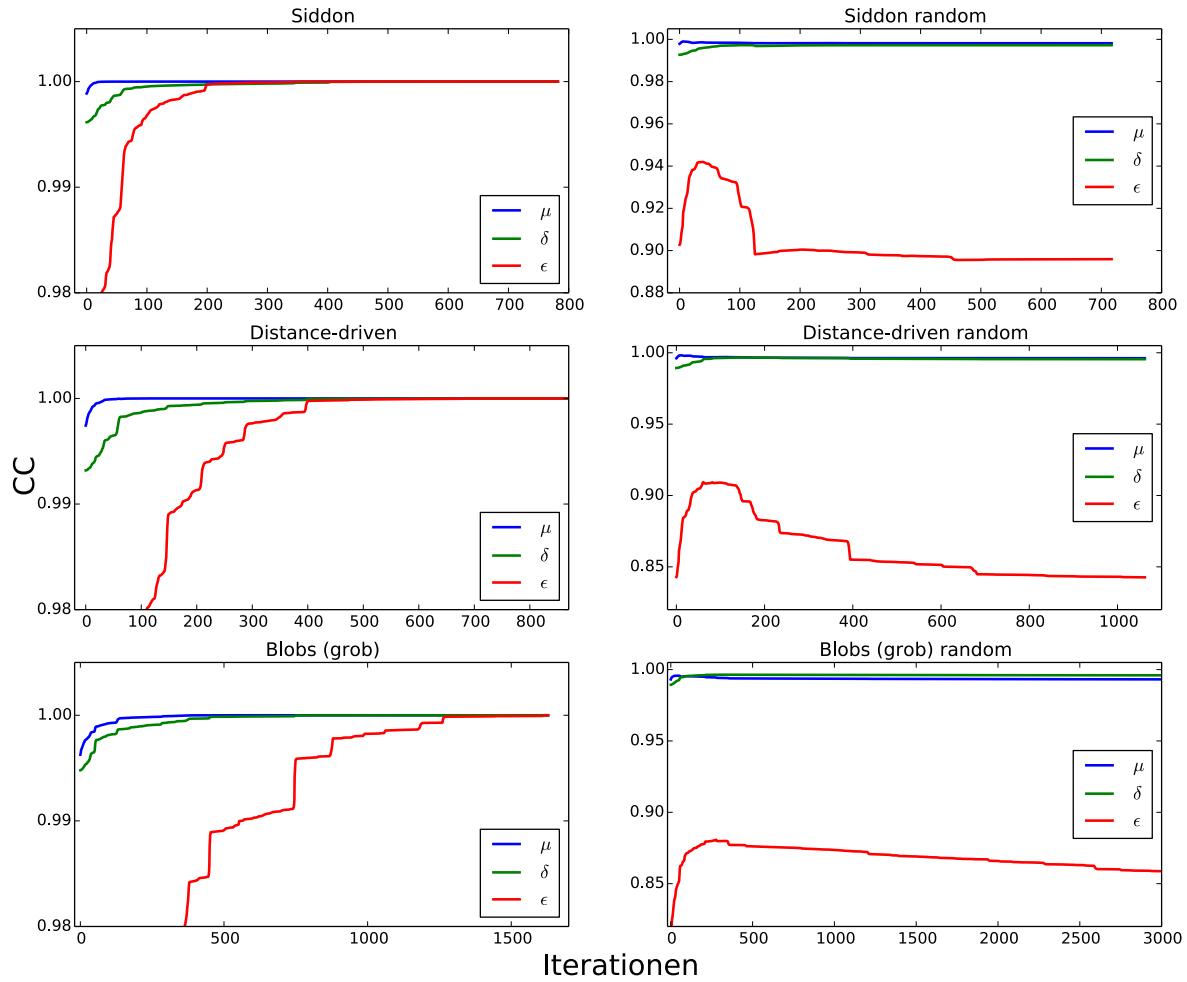


Abbildung 4.24: Verlauf der Korrelationskoeffizienten bei Verwendung eines Startwertes aus der FBP für den vollen Datensatz (links) und die Rekonstruktion für einen zufällig ausgewählten Phasestep pro Projektionswinkel (rechts)

dargestellt. Um zu bestimmen, inwieweit die Verwendung des Startwertes die Konvergenz beschleunigt, müssen die Verläufe mit ihren jeweiligen Gegenstücken aus Abbildung 4.18 bzw. 4.19 verglichen werden. Dazu ist anzumerken, dass in allen Rekonstruktionen die Abbruchbedingungen über g_{tol} und i_{max} derart gewählt waren, dass sich die Schnittbilder am Ende der Rekonstruktion über mehrere hundert Iterationen hinweg nicht mehr erkennbar veränderten. In der Praxis hätten die Rekonstruktionen damit schon deutlich früher abgebrochen werden können.

Für beide voxelbasierte Projektoren konvergiert, wie in Abbildung 4.18 zu sehen, bei der Rekonstruktion über den vollen Datensatz das δ -Bild zuletzt. Bei Verwendung des Startwertes aus der FBP hingegen, nähert sich das Dunkelfeldbild seiner finalen Verteilung am langsamsten an. Das Dekrement δ profitiert also stärker von der Verwendung des Startwertes. Für den *distance-driven* Projektor kann so die benötigte Anzahl an Iterationen von ca. 600 auf 400, für

den Projektor nach Siddon sogar auf 200 reduziert werden. Im Fall der Rekonstruktion über Blobs ist, unabhängig vom verwendeten Startwert, das Dunkelfeld die limitierende Bildmodalität für die Konvergenz. Hier konnte die Anzahl der benötigten Iterationen durch Verwendung des Startwertes aus der FBP um fast 50 % reduziert werden.

Die Analyse für die Rekonstruktionen bei einem Phasestep pro Projektionswinkel gestaltet sich komplizierter. Der Korrelationskoeffizient von ϵ fällt, wie auch in Abbildung 4.19, nach anfänglichem Anstieg wieder ab. Er wurde hier entsprechend der Auswertung in Abschnitt 4.2.3 in Bezug auf das Ergebnis aus der jeweiligen Rekonstruktion über den vollen Datensatz berechnet. Der Startwert weist zum Teil eine größere Ähnlichkeit zu diesem Ergebnis auf als das Resultat der SIR. Gleichermaßen ergibt sich auch für das Absorptionsbild gegenüber der Startverteilung nur eine minimale Verbesserung des Korrelationskoeffizienten. Die besten Ergebnisse würde hier ein Abbruch des Verfahrens nach grob 100 Iterationen im Fall der voxelbasierten Projektoren sowie nach ca. 250 Iterationen für die Rekonstruktion Blobs (grob) ergeben.

4.3.2 Regularisierung

Mit Hilfe sogenannter Regularisierungstechniken können unrealistische Verteilungen der Bildkoeffizienten im Lösungsraum vermieden werden. Die Zielfunktion des Optimierungsverfahrens, also die negative Log-Likelihood-Funktion, wird dabei um einen zusätzlichen Term ergänzt, das heißt

$$-l(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon} | \mathbf{n}) \rightarrow -l(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon} | \mathbf{n}) + R_t(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon}). \quad (4.49)$$

Durch den Regularisierungsterm R_t kann so der Wert der Zielfunktion für bestimmte Verteilungen von $\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\delta}$ und $\boldsymbol{\epsilon}$ erhöht werden.

Gleichung 4.49 kann anschaulich über den Begriff der bedingten Wahrscheinlichkeit und den Satz von Bayes interpretiert werden, siehe dazu auch Hahn (2014). Ziel der SIR ist es, die A-posteriori-Wahrscheinlichkeit $p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon} | \mathbf{n})$ zu maximieren. Nach dem Satz von Bayes ergibt diese sich zu

$$p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon} | \mathbf{n}) = \frac{p(\mathbf{n} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon}) \cdot p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon})}{p(\mathbf{n})}. \quad (4.50)$$

Die bedingte Wahrscheinlichkeit $p(\mathbf{n} | \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon})$ für die Messwerte \mathbf{n} , unter der Bedingung, dass die Verteilungen $\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\delta}$ und $\boldsymbol{\epsilon}$ vorliegen, entspricht dabei laut Gleichung 3.12 der Likelihood-Funktion, $p(\mathbf{n})$ ist die A-priori-Wahrscheinlichkeit der Messwerte und $p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon})$ die A-priori-Wahrscheinlichkeit für die Verteilungen der Bildkoeffizienten. Im Ausdruck $p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon})$ sind somit Vorwissen bzw. Vermutungen über das gemessene Objekt kodiert. Der Schätzer für die Verteilungen $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon})$ lautet dann

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{n}) \cdot \frac{p(\boldsymbol{\theta})}{p(\mathbf{n})}. \quad (4.51)$$

Die Wahrscheinlichkeit $p(\mathbf{n})$ hängt nicht von den gesuchten Verteilungen ab und kann daher in der Maximierung vernachlässigt werden. Nimmt man den Logarithmus von Gleichung 4.51 so führt das mit

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} l(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{n}) + \ln(p(\boldsymbol{\theta})) \quad (4.52)$$

zu einem Ausdruck, der äquivalent zur Formulierung in Gleichung 4.49 ist. Dieser Schätzer maximiert nun die A-posteriori-Wahrscheinlichkeit. Für den Fall, dass keine Vorkenntnisse über das Messobjekt existieren, $p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon})$ also einen konstanten Wert annimmt, reduziert sich Gleichung 4.52 auf die bisherige Maximierung der Log-Likelihood-Funktion.

Eine häufige Annahme bei der Regularisierung in der Computertomographie ist die Stetigkeit des Messobjekts (Buzug, 2008). Der Regularisierungsterm wird daher so gewählt, dass verrauschte Schnittbilder eine kleinere A-priori-Wahrscheinlichkeit erhalten. In den meisten Ansätzen werden dazu die Abweichungen zwischen benachbarten Bildbasisfunktionen bestraft. Der Regularisierungsterm für ein Schnittbild nimmt dann die Form

$$R(\mathbf{f}) = \lambda \sum_i \sum_{j \in \mathcal{N}_i} w_{ij} \psi(f_i - f_j) \quad (4.53)$$

an, vergleiche Hahn (2014). Dabei läuft die erste Summe über alle Bildbasisfunktionen des Schnittbildes \mathbf{f} und die zweite Summe über alle Nachbarn der i -ten Bildbasisfunktion. Letztere sind durch die Menge \mathcal{N}_i gegeben. Die Funktion ψ gibt dann vor, in welcher Form die Abweichung der entsprechenden Bildkoeffizienten beträgt. Der Parameter λ bestimmt dabei die Stärke des Regularisierungsterms im Vergleich zur Log-Likelihood-Funktion. Über die Gewichtungsfaktoren w_{ij} kann zusätzlich der jeweilige Einfluss der Bildbasisfunktionen aus \mathcal{N}_i angepasst werden. Um die Optimierung der Zielfunktion nicht zu destabilisieren, empfiehlt es sich, für ψ eine konvexe Funktion zu wählen. In dieser Arbeit wird für ψ die nach Huber (1964) benannte und abschnittsweise definierte Funktion

$$\psi(x; \sigma) = \begin{cases} \frac{x^2}{2\sigma^2} & \text{für } |x| \leq \sigma \\ \frac{|x| - \sigma/2}{\sigma} & \text{für } |x| > \sigma \end{cases} \quad (4.54)$$

verwendet. Der Parameter σ markiert dabei den Übergang von einer quadratischen zu einer linearen Bestrafung der Abweichungen $x = f_i - f_j$. Im Vergleich zu einer rein quadratischen Funktion sollen so große Differenzen benachbarter Bildbasisfunktionen – sie resultieren wahrscheinlich aus Kanten im Messobjekt – weniger stark bestraft und der Kontrast zwischen unterschiedlichen Bereichen im Bild erhalten werden.

Wird die Zielfunktion des Optimierungsverfahrens, hier die negative Log-Likelihood-Funktion, wie in Gleichung 4.49 additiv um einen Regularisierungsterm ergänzt, so muss diese Änderung auch im CG-Verfahren berücksichtigt werden. Bezuglich des Gradienten der Zielfunktion wird dann die Ersetzung

$$-\frac{\partial l}{\partial \theta_j} \rightarrow -\frac{\partial l}{\partial \theta_j} + \frac{\partial R_t}{\partial \theta_j} \quad (4.55)$$

durchgeführt. Hat der Regularisierungsterm eines Schnittbildes die Form aus Gleichung 4.53 und wird für ψ die Huber-Funktion aus Gleichung 4.54 verwendet, ergibt sich sein Gradient zu

$$\frac{\partial R}{\partial f_j}(\mathbf{f}) = 2\lambda \sum_{i \in \mathcal{N}_j} w_{ji} \begin{cases} \frac{f_j - f_i}{\sigma^2} & \text{für } |f_j - f_i| \leq \sigma \\ \frac{\operatorname{sgn}(f_j - f_i)}{\sigma} & \text{für } |f_j - f_i| > \sigma \end{cases}. \quad (4.56)$$

Tabelle 4.2: Wahl der Regularisierungsparameter

Rekonstruktion	λ_μ	λ_δ	λ_ϵ	σ_μ	σ_δ	σ_ϵ
voller Datensatz	125	20	40	0,005	0,02	0,02
interlaced/random	12,5	2	4	0,005	0,02	0,02

Der gesamte Regularisierungsterm R_t setzt sich über

$$R_t(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\epsilon}) = \lambda_\mu \sum_i \sum_{j \in \mathcal{N}_i^\mu} w_{ij}^\mu \psi(\mu_i - \mu_j; \sigma_\mu) + \lambda_\delta \sum_i \sum_{j \in \mathcal{N}_i^\delta} w_{ij}^\delta \psi(\delta_i - \delta_j; \sigma_\delta) \\ + \lambda_\epsilon \sum_i \sum_{j \in \mathcal{N}_i^\epsilon} w_{ij}^\epsilon \psi(\epsilon_i - \epsilon_j; \sigma_\epsilon) \quad (4.57)$$

aus den Regularisierungen der drei einzelnen Schnittbilder zusammen. Die Parameter λ und σ , die Menge \mathcal{N}_i sowie die Gewichtungsfaktoren w_{ij} können für jede Bildmodalität separat festgesetzt werden. Sie sind daher mit einem entsprechenden Index versehen.

Ein erster Test der Regularisierungsmethode erfolgte anhand des Messdatensatzes aus Abschnitt 4.2.3. Rekonstruktionen wurden mit dem Projektor nach Siddon für den vollen Datensatz sowie für die Aufnahmeschemata ‘‘random’’ und ‘‘interlaced’’ durchgeführt. Die dabei verwendeten Parameter des Regularisierungsterms sind in Tabelle 4.2 aufgeführt. Der Schwellenwert σ wurde jeweils knapp oberhalb der Amplitude des Bildrauschens gewählt. Aufgrund der geringeren Anzahl an vorliegenden Messwerten nimmt die Likelihood-Funktion bei den Aufnahmeschemata ‘‘interlaced’’ und ‘‘random’’ im Vergleich zum vollen Datensatz größere Werte an. Da die negative Log-Likelihood-Funktion damit in einem niedrigeren Wertebereich liegt, wurde die relative Stärke des Regularisierungsterms über die Parameter λ um jeweils eine Größenordnung reduziert. Die Mengen \mathcal{N}_i^μ und \mathcal{N}_i^ϵ beinhalten die nächsten Nachbarn der i -ten Bildbasisfunktion in vertikaler, horizontaler sowie diagonaler Richtung. Die δ -Bilder weisen überwiegend Rauschen bei niedrigen Frequenzen auf (Raupach & Flohr, 2011). Durch die Ergänzung von \mathcal{N}_i^δ um die zweitnächsten Nachbarn in allen Richtungen wurde versucht, dieser Tatsache in der Regularisierung gerecht zu werden. Die Gewichtungsfaktoren der einzelnen Elemente von $\mathcal{N}_i^{\mu, \delta, \epsilon}$ wurden in diesem ersten Test der Regularisierung nicht berücksichtigt, sodass $w_{ij}^{\mu, \delta, \epsilon} = 1$ galt. Die mit Regularisierung rekonstruierten Schnittbilder sind in Abbildung 4.25 gezeigt. Im Vergleich zu den Rekonstruktionen ohne Regularisierung aus Abschnitt 4.2.3 wurde der Schwellenwert g_{tol} des Gradienten mit 935 anstelle von 1332 Iterationen für die Rekonstruktion über den vollen Datensatz bzw. mit 977 statt 1387 Iterationen im Fall des Aufnahmeschemas ‘‘interlaced’’ merklich schneller erreicht. Für die Rekonstruktion über einen zufällig gewählten Phasestep pro Winkelschritt geschieht dies mit 1107 statt 1070 Iterationen allerdings etwas langsamer. Im Vergleich zu den Schnittbildern aus Abbildung 4.16 und 4.20 sind die finalen Verteilungen der Bildkoeffizienten deutlich unverrauscht. Zur Quantifizierung der Rauschreduktion wurden die CNRs in den Schnittbildern über Gleichung 4.47 bestimmt, analog zu Abschnitt 4.2.3. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.1 auf Seite 66 ebenda aufgeführt. Für die Rekonstruktion über den vollen Datensatz ergeben sich Steigerungen der CNRs zwischen 110 % und 175 % in der Absorption sowie Änderungen von −11 % bis 132 % im Phasenkontrast. Im

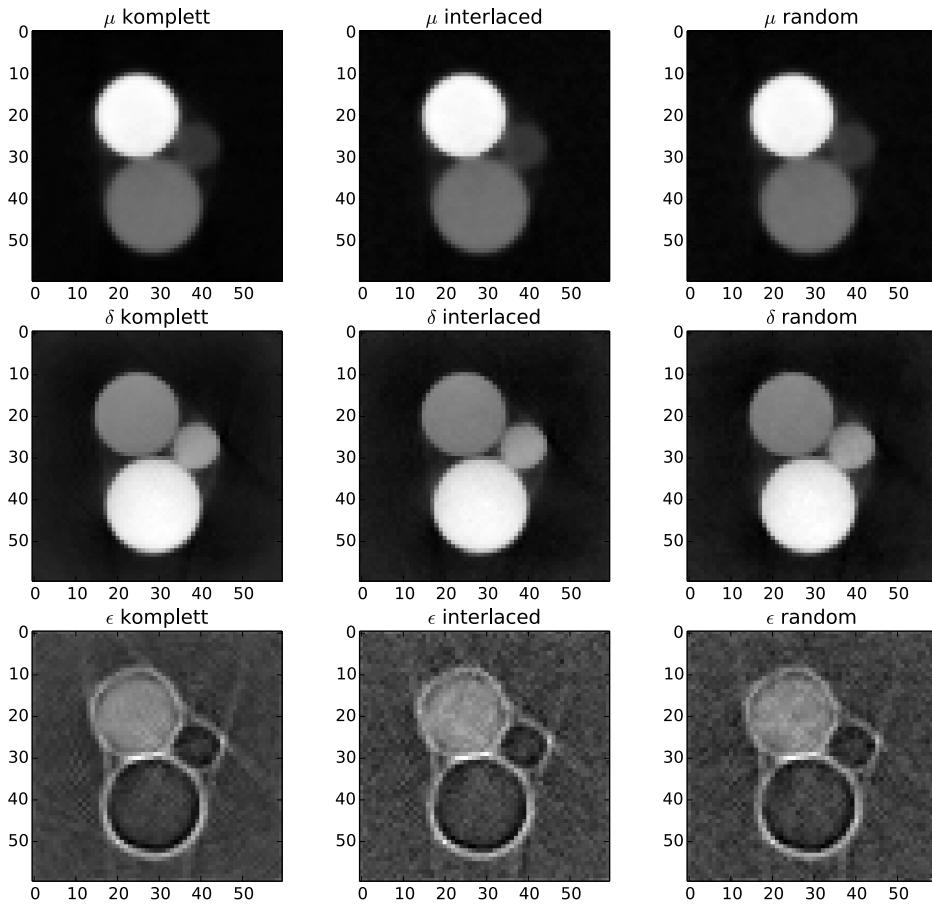


Abbildung 4.25: Rekonstruierte Schnittbilder des Zylinderphantoms mit Regularisierung

Fall der Aufnahmeschemata ‘‘interlaced’’ bzw. ‘‘random’’ liegen die Steigerungen im Bereich 361 % – 539 % bzw. 180 % – 340 % für μ sowie bei 23 % – 248 % bzw. 11 % – 195 % für δ . Insgesamt liefert die Regularisierung damit die besten relativen Verbesserungen im Absorptionsbild. Hier ergeben sich nun höhere CNR-Werte als für die gefilterte Rückprojektion. Im Fall von δ wird dies nur für zwei Materialkombinationen erreicht. Die unterschiedlich starken Auswirkungen der Regularisierung auf die Bildmodalitäten kann in der Tatsache $\lambda_\mu > \lambda_\delta$ begründet sein. Die Wahl eines entsprechend größeren Wertes für λ_δ führt jedoch bereits zu einem Kontrastverlust im Bild. Hier lohnt es sich, nach Alternativen zur Huber-Regularisierung zu suchen, die das Rauschverhalten im Phasenkontrast sowie dessen differentiellen Beitrag in der Vorrärtsrechnung stärker berücksichtigen.

4.4 Erweiterung der Modellgebung – Kantensignale

Eine grundlegende Annahme in der gitterbasierten Röntgenbildgebung ist, dass sich der vom Messobjekt verursachte Phasenschub räumlich nur langsam ändert. Die Wellenfront kann dann über ein Pixel des Detektors als ebene Welle approximiert werden und Gleichung 2.26 ist gültig.

Für scharfe Objektkanten divergiert der differentielle Phasenschub jedoch, was eine allgemeine Beschreibung erforderlich macht. Das Signalverhalten des Wellenfeldes nach Transmission durch derartige Strukturen ist deshalb Gegenstand aktueller Forschung. Yashiro & Momose (2015) geben mittels Beugungstheorie Ausdrücke für die verschiedenen Bildsignale an. In der Arbeit von Wolf et al. (2015) wird das Kantensignal im Dunkelfeld über Diskrepanzen in der Periode des Talbotmusters und des Gitters G2 beschrieben. Da die meisten Anwendungen der Dunkelfeldbildung auf die Detektion von Mikrostrukturen abzielen, diese jedoch schwer zu erkennen sind, wenn sie von einer Kante überlagert sind, wäre es wünschenswert, die verschiedenen Kontrastursachen unterscheiden zu können. Die referenzierten Arbeiten schlagen hierzu Verschiebungen des Messobjekts bzw. ein Rebinning auf virtuelle Detektorpixel vor. In der Computertomographie sind die angesprochenen Überlagerungseffekte weniger problematisch als in der projektiven Bildgebung. Jedoch könnte auch sie von einer Unterscheidung profitieren. Die anisotropen Kantensignale – die Visibilität fällt hier nur ab, wenn die Kante tangential zur Strahlrichtung liegt – führen zusammen mit der isotropen Beschreibung durch Gleichung 2.29 zu Inkonsistenzen und damit zu Fehlern in den Rekonstruktionen. So weisen die rekonstruierten Schnittbilder in Abbildung 4.8 bzw. 4.16 innerhalb von den Kanten der Zylinder einen schmalen Bereich mit Werten von $\epsilon < 0$ auf, welche den Visibilitätsverlust durch die Koeffizienten ϵ_j an der Kante bei nicht tangentialem Strahlrichtung kompensieren. Eine korrekte Modellierung des Kantensignals im Dunkelfeldbild könnte solche Artefakte eliminieren. Zudem haben die Simulationen in Abschnitt 4.2.1 gezeigt, dass Kanten auch im differentiellen Phasenbild zu Werten führen, die nicht mit dem mittleren differentiellen Phasenschub des Objekts übereinstimmen. In der Tomographie führt dies im ganzen Objekt zu falsch rekonstruierten Werten des Dekrements δ .

In diesem Abschnitt finden sich zunächst Simulationen zu den Kantensignalen. Anschließend werden zwei Modelle präsentiert und mit den simulierten Werten verglichen. Mit dem sogenannten “komplexen Dunkelfeldkontrast” wird versucht, eines dieser Modelle in das Vorwärtsmodell der SIR einzubinden.

4.4.1 Kantensignale in der Simulation

Die Simulationen zu den Kantensignalen beruhen auf der Konfiguration aus Abschnitt 4.2.1. Als Messobjekt dient ebenfalls der dort implementierte Zylinder. Dieser wurde in Schritten von $0,5 \mu\text{m}$ um insgesamt $230 \mu\text{m}$ in negative ξ -Richtung verschoben. Betrachtet wurde der Pixel des Detektors, durch den sich dabei seine Kante bewegt. Abbildung 4.26 zeigt beispielhaft eine simulierte Intensitätsverteilung des Talbotmusters an der Stelle des Gitters G2. Im Detektorkoordinatensystem befand sich die Kante des Zylinders dabei an der Stelle $\xi = -2,040 \text{ mm}$, während sich der betrachtete Pixel von $\xi_{p-} = -2,075 \text{ mm}$ bis $\xi_{p+} = -1,975 \text{ mm}$ erstreckt. Die Betrachtung des Talbotmusters erlaubt bereits eine qualitative Diskussion der Kantensignale. Die mittlere Intensität nimmt für größere Werte von ξ ab. Hier sinkt die Transmission aufgrund der zunehmenden Dicke des Objekts. Außerhalb des Objekts manifestiert sich der Beugungseffekt der Kantenanhebung. Die Intensität der Objektmessung ist hier im Vergleich zur Referenzaufnahme leicht erhöht. Die Amplitude des Talbotmusters ist in den vom Objekt bedeckten Bereichen des Pixels merklich erniedrigt. Gleichzeitig liegt hier keine konstante Phasenverschiebung zwischen Objekt- und Referenzmessung vor. Mit der Divergenz

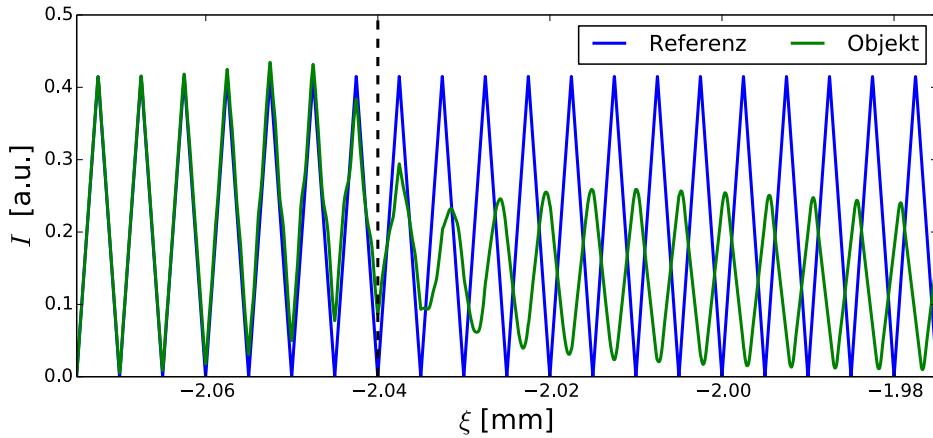


Abbildung 4.26: Simulierte Intensitätsverteilungen des Talbotmusters über der Breite eines Pixels. Die Position der Kante des Zylinders während der Objektmessung ist durch die schwarz gestrichelte, vertikale Linie gekennzeichnet.

des differentiellen Phasenschubs an der Kante ist dessen Änderung in diesem Bereich so groß, dass sich die Phase in der Objektmessung von Periode zu Periode des Talbotmusters merklich ändert. In Wolf et al. (2015) wird dies durch eine größere Periodenlänge der Intensitätsverteilung beschrieben. Bei der Abtastung des Talbotmusters beeinflussen diese Effekte die Parameter der Phasestepplingkurven und folglich die rekonstruierten Bilder. Im Folgenden bezeichnen $A_a(\xi)$ bzw. $\Phi_a(\xi)$ die Amplitude bzw. die Phase des Talbotmusters außerhalb der Kante und $A_i(\xi)$ sowie $\Phi_i(\xi)$ die entsprechenden Werte in den vom Zylinder bedeckten Bereichen. Im Phasenbild wird $\Delta\Phi$ wegen $A_a > A_i$ durch die Phase des Talbotmusters Φ_a dominiert. Damit entsprechen die Werte von $\Delta\Phi$ nicht mehr dem mittleren differentiellen Phasenschub. Stattdessen sind sie deutlich zu niedrig und es wirkt so, als sähe der Pixel das Messobjekt fast nicht, wie in Abbildung 4.11 beobachtet. Die Tatsache, dass $\Phi_i(\xi)$ nicht konstant ist, führt dazu, dass die Visibility der Phasestepplingkurve nicht der mittleren Visibility des Talbotmusters entspricht. Abbildung 4.27 zeigt den Verlauf des jeweiligen Bildsignals im betrachteten Pixel in Abhängigkeit von der Position des Zylinders. Die Auftragung der Kantenposition ergibt sich aus der Differenz der Position ξ_{p+} der rechten Pixelgrenze und ξ_{Kante} der linken Zylinderkante. Neben den Werten der Transmission I/I_0 , des Dunkelfeldes V/V_0 und des Phasenversatzes $\Delta\Phi$ ist für letztere Kurve auch der aus dem mittleren differentiellen Phasenschub erwartete Verlauf $\overline{\Delta\Phi}$ aufgetragen. Er bestimmt sich aus Gleichung 2.26 und dem Integral des differentiellen Phasenschubs über den betrachteten Pixel zu

$$\begin{aligned} \overline{\Delta\Phi} &= \frac{\lambda z_T}{g_2} \cdot \frac{1}{d_d} \int_{\max\{\xi_{Kante}, \xi_{p-}\}}^{\xi_{p+}} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} d\xi \\ &= \frac{\lambda z_T}{g_2} \cdot \frac{\varphi(\xi_{p+}) - \varphi(\max\{\xi_{Kante}, \xi_{p-}\})}{d_d}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

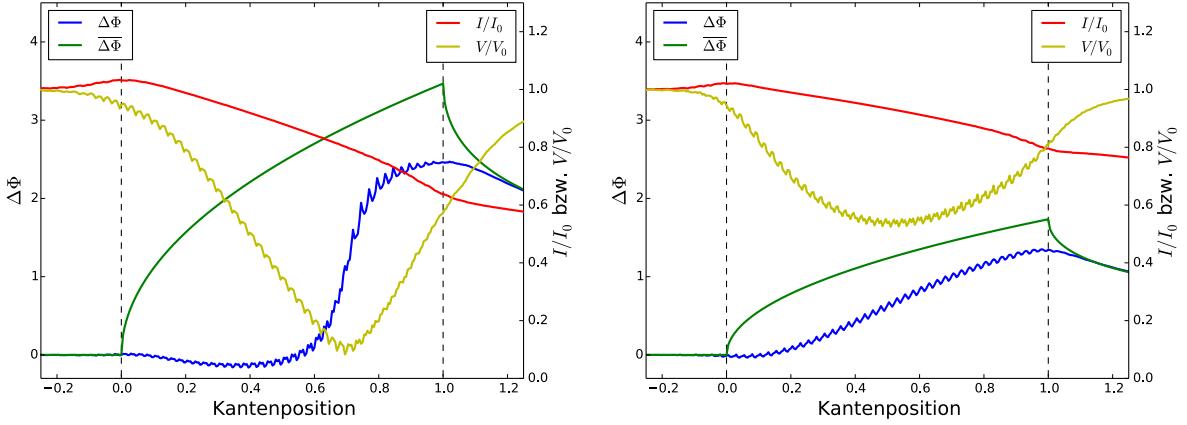


Abbildung 4.27: Verlauf von Transmission, Dunkelfeld und Phasenversatz gegenüber der Kantenposition des Zylinders. Rechts wurde die Dichte des Zylinders auf die Hälfte des eigentlichen Wertes gesetzt.

Für den Phasenschub eines homogenen Zylinders gilt dabei

$$\varphi(\xi) = \begin{cases} 2k\delta\sqrt{r^2 - (\xi - \xi_0)^2} & \text{für } \xi - \xi_0 < r \\ 0 & \text{für } \xi - \xi_0 \geq r \end{cases} \quad (4.59)$$

mit r seinem Radius, ξ_0 der ξ -Koordinate seines Mittelpunktes und δ dem Dekrement seines Brechungsindex. In Abbildung 4.27 ist der beobachtete Phasenversatz zwischen den Phase-steppingkurven aus Objekt- und Referenzmessung stets kleiner als es der mittlere differentielle Phasenschub erwarten lässt. Dies ist, wie im vorigen Absatz beschrieben, auf die unterschiedlichen Amplituden im Talbotmuster zurückzuführen, welche bei der Phasenabtastung eine stärkere Gewichtung der Bereiche im Freifeld zur Folge haben. Ferner erzeugt die Kante auch einen starken Visibilitätsverlust. Dieser nimmt zum Mittelpunkt des Objekts hin langsamer ab, als nach außen hin. Die Simulationen zeigen außerdem, dass die Kanten signale in nicht trivialer Weise vom Material des Objekts abhängen. Dazu wurde die Dichte des Aluminiumzylinders in einer zweiten Simulation auf die Hälfte des eigentlichen Wertes reduziert. Vergleicht man die Ergebnisse beider Simulationen, so führt die niedrigere Dichte zu einem schwächer ausgeprägtem Visibilitätsverlust, dessen Maximum sich zudem zu niedrigeren Werten der Kantenposition verschiebt. Im Verlauf von $\Delta\Phi$ ergeben sich ebenfalls merkliche Unterschiede. Während im Fall der gewöhnlichen Dichte $\Delta\Phi$ mit Eintritt des Objekts in den Pixel erst sogar leicht abfällt, um dann bei $\xi_{p+} - \xi_{\text{Kante}} \approx 0,6$ steil anzusteigen, nimmt der Phasenversatz für die halbe Dichte gleichmäßiger mit der Kantenposition zu. In beiden Simulationen weisen die Kurven von $\Delta\Phi$ und V/V_0 eine fast regelmäßige Modulation geringer Amplitude auf. Dies ist vermutlich durch die starke Deformation der Wellenfront an der Kante bedingt, welche sich an dieser Stelle auf das Talbotmuster überträgt, siehe Abbildung 4.26.

4.4.2 Betrachtungen zum Einfluss der zweiten Ordnung des Phasenschubs

Die Betrachtung von Abbildung 4.26 hat gezeigt, dass sich die Phasenlage des Talbotmusters in der Nähe der Objektkante innerhalb einer Pixelbreite verändert. In der folgenden Modellrechnung

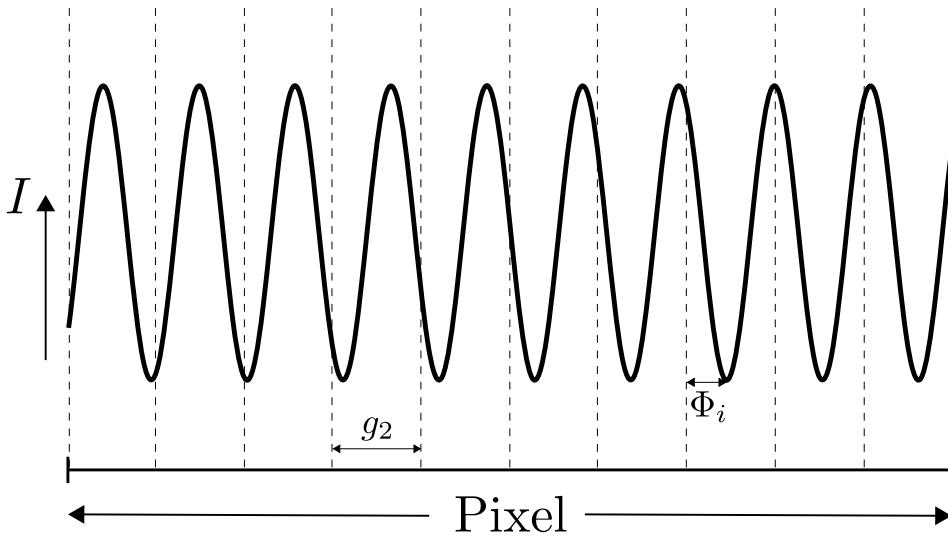


Abbildung 4.28: Talbotmuster mit Änderung der Phasenlage. Der Pixel ist in Abschnitte der Breite g_2 eingeteilt. In jedem dieser Periodenabschnitte wird dem Talbotmuster die relative Phase Φ_i zugeordnet.

soll diese Änderung durch die zweite Ableitung des vom Messobjekt erzeugten Phasenverlaufs $\varphi(\xi)$ beschrieben werden. Dazu wird der betrachtete Pixel zunächst in Abschnitte mit der Breite der G2-Periode g_2 eingeteilt. Dies ist in Abbildung 4.28 dargestellt. In jedem dieser sogenannten Periodenabschnitte kann man der Intensitätsverteilung eine relative Phase Φ_i zuordnen. Über Gleichung 2.26 ist diese Phase mit der ersten Ableitung des Phasenverlaufs $\varphi(\xi)$ verknüpft. Für die Änderung $\delta\Phi_i = \Phi_{i+1} - \Phi_i$ gilt damit

$$\begin{aligned}\delta\Phi_i &= \frac{\lambda z_T}{g_2} \cdot \left[\frac{\partial \varphi}{\partial \xi}(\xi_{i+1}^{\text{pa}}) - \frac{\partial \varphi}{\partial \xi}(\xi_i^{\text{pa}}) \right] \\ &\approx \lambda z_T \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2}(\xi_i^{\text{pa}})\end{aligned}\quad (4.60)$$

mit ξ_i^{pa} der ξ -Koordinate des jeweiligen Periodenabschnitts.

Die im gesamten Pixel gemessene Intensität ergibt sich in Abhängigkeit der Abtastposition x_s aus der Summe

$$I = \sum_{n=1}^N \frac{A}{N} \sin(2\pi x_s + \Phi_n) + \bar{I} \quad (4.61)$$

über alle seine Periodenabschnitte. Dabei wurde angenommen, dass die Amplitude A und die mittlere Intensität \bar{I} des Talbotmusters in jedem Abschnitt den gleichen Wert haben. Setzt man ferner voraus, dass die Änderungen $\delta\Phi_i$ annähernd konstant sind und durch einen effektiven mittleren Wert $(\partial^2 \varphi / \partial \xi^2)_{\text{eff}}$ der zweiten Ableitung des Phasenverlaufs approximiert werden

können, so lässt sich die Summe in Gleichung 4.61 ausführen. Man erhält mit

$$\begin{aligned} I - \bar{I} &= \sum_{n=1}^N \frac{A}{N} \sin(2\pi x_s + \Phi_0 + n\delta\Phi) \\ &= \sum_{n=1}^N \frac{A}{N} [\sin(2\pi x_s + \Phi_0) \cos(n\delta\Phi) + \cos(2\pi x_s + \Phi_0) \sin(n\delta\Phi)] \end{aligned} \quad (4.62)$$

einen Ausdruck in dem sich die Summen über $\cos(n\delta\Phi)$ bzw. $\sin(n\delta\Phi)$ über die geometrische Reihe berechnen lassen. Es gilt:

$$\sum_{n=1}^N \sin(n\delta\Phi) = \frac{\sin(N\delta\Phi/2) \sin((N+1)\delta\Phi/2)}{\sin(\delta\Phi/2)} \quad (4.63)$$

$$\sum_{n=1}^N \cos(n\delta\Phi) = \frac{\sin(N\delta\Phi/2) \cos((N+1)\delta\Phi/2)}{\sin(\delta\Phi/2)}. \quad (4.64)$$

Einsetzen in Gleichung 4.62 liefert

$$\begin{aligned} I - \bar{I} &= \frac{A \sin(N\delta\Phi/2)}{N \sin(\delta\Phi/2)} \left[\sin(2\pi x_s + \Phi_0) \cos\left(\frac{N+1}{2}\delta\Phi\right) + \cos(2\pi x_s + \Phi_0) \sin\left(\frac{N+1}{2}\delta\Phi\right) \right] \\ &= \frac{A \sin(N\delta\Phi/2)}{N \sin(\delta\Phi/2)} \cdot \sin\left(2\pi x_s + \Phi_0 + \frac{N+1}{2}\delta\Phi\right). \end{aligned} \quad (4.65)$$

Verglichen mit dem Fall $\delta\Phi = 0$ ist die Amplitude der Phasestepplingkurve reduziert. Folglich kommt es zu einem Signal im Dunkelfeld von

$$D = \frac{V}{V_0} = \left| \frac{\sin(N\delta\Phi/2)}{N \sin(\delta\Phi/2)} \right|. \quad (4.66)$$

In Kleinwinkelnäherung, das heißt $\sin(\delta\Phi/2) \approx \delta\Phi/2$, sowie unter Verwendung des Zusammenhangs $N = d_d/g_2$ zwischen der Anzahl an Periodenabschnitten, der Pixelbreite und der G2-Periode stimmt Gleichung 4.66 mit dem von Yang & Tang (2012) gefundenen Ausdruck für den Visibilitätsverlust durch die zweite Ableitung des Phasenverlaufs überein. Im Gegensatz zu der hier verwendeten Modellrechnung erfolgt die Herleitung von Yang & Tang (2012) dabei über eine Wellenfeldberechnung durch das Talbot-Interferometer mittels Fresnel-Beugung. Der finale Ausdruck für das Dunkelfeldsignal lautet

$$D = \frac{V}{V_0} = \left| \text{sinc} \left(N \frac{\lambda z_T}{2\pi} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} \right)_{\text{eff}} \right) \right| \quad (4.67)$$

mit $\text{sinc}(x) = \sin(\pi x)/\pi x$ dem Kardinalsinus.

In der Arbeit von Yang & Tang (2012) ergibt sich für $(\partial^2 \varphi / \partial \xi^2)_{\text{eff}}$ der Wert der zweiten Ableitung des Phasenverlaufs in der Mitte des betrachteten Pixels. Letzterer kann grundsätzlich durch den Differenzenquotient zweiter Ordnung angenähert werden, das heißt

$$\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} \right)_{\text{eff}} = \frac{\varphi(\xi_{p+}) + \varphi(\xi_{p-}) - 2\varphi(\xi_p)}{(d_d/2)^2}. \quad (4.68)$$

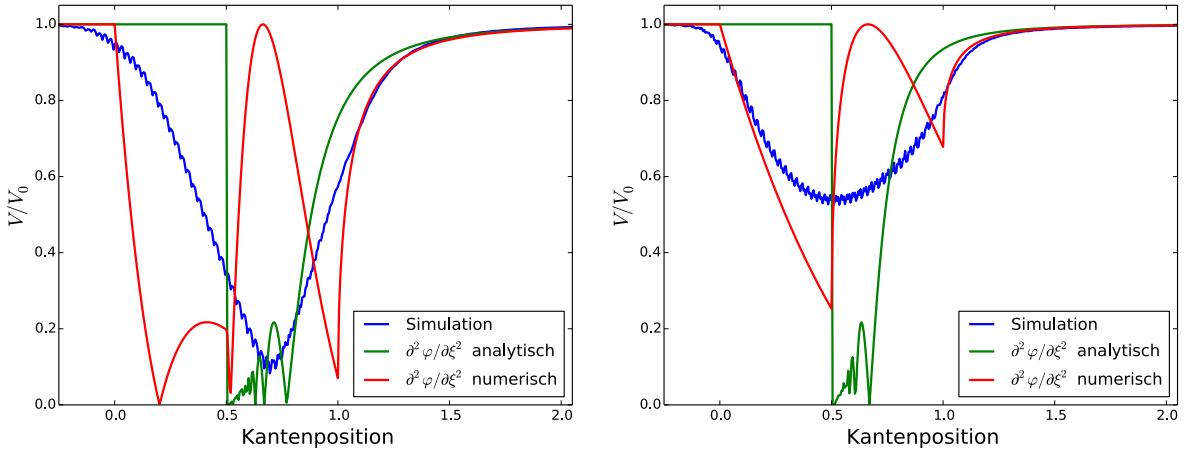


Abbildung 4.29: Verlauf des Dunkelfeldsignals gegenüber der Kantenposition des Zylinders verglichen mit der Vorhersage über Gleichung 4.67. Rechts wurde die Dichte des Zylinders auf die Hälfte des eigentlichen Wertes gesetzt.

Im Fall des hier verwendeten Messobjekts, kann die zweite Ableitung an dieser Stelle alternativ auch analytisch berechnet werden. Aus Gleichung 4.59 folgt mit

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2}(\xi) = \begin{cases} -2k\delta r^2 / \left(\sqrt{r^2 - (\xi - \xi_0)^2} \right)^3 & \text{für } \xi - \xi_0 < r \\ 0 & \text{für } \xi - \xi_0 > r \end{cases} \quad (4.69)$$

ein Ausdruck, der allerdings für $\xi - \xi_0 \rightarrow r$ divergiert. Ebenso ist bereits die erste Ableitung des Phasenverlaufs an der Zylinderkante nicht definiert, sodass eine Berechnung der mittleren zweiten Ableitung in Analogie zu Gleichung 4.58 über

$$\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} \right)_{\text{eff}} = \frac{1}{d_d} \int_{\max\{\xi_{\text{Kante}}, \xi_{p-}\}}^{\xi_{p+}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} d\xi \quad (4.70)$$

nicht möglich ist, solange $\xi_{\text{Kante}} \geq \xi_{p-}$ gilt.

Abbildung 4.29 zeigt den simulierten Verlauf der Dunkelfeldsignale aus Abbildung 4.27. Zum Vergleich sind dazu die über Gleichung 4.67 berechneten, aus der zweiten Ableitung des Phasenverlaufs erwarteten Verläufe aufgetragen. Dabei wurde die zweite Ableitung am Pixelmittelpunkt sowohl numerisch über Gleichung 4.68 als auch analytisch über Gleichung 4.69 bestimmt. Solange der Pixel die Kante sieht, das heißt für Werte der Kantenposition zwischen null und eins, sagt die Modellrechnung zwar starke Visibilitätsverluste voraus, jedoch stimmt der berechnete Verlauf nicht mit den simulierten Signalen überein. Zur Übereinstimmung der simulierten und berechneten Verläufe kommt es erst bei Kantenpositionen zwischen 1,1 und 1,5, wobei die numerische Approximation der zweiten Ableitung hier die etwas bessere Wahl für den Effektivwert $(\partial^2 \varphi / \partial \xi^2)_{\text{eff}}$ darzustellen scheint. Wie auch in Yang & Tang (2012) beobachtet, können die absoluten Werte des Dunkelfeldsignals für den direkten Kantenbereich nicht korrekt über die Beiträge der zweiten Ableitung wiedergegeben werden. Dafür sind die Annahmen, dass

die Amplitude A und die Änderungen $\delta\Phi_i$ in der Phasenlage der Periodenabschnitte konstant sind, zu restriktiv. Außerdem stimmt die in Gleichung 4.65 aus der Modellrechnung bestimmte Phase $\Phi_0 + (N + 1)\delta\Phi/2$ unter diesen Annahmen noch mit dem Wert aus dem mittleren differentiellen Phasenschub überein. Insgesamt ermöglicht die Betrachtung der zweiten Ableitung des Phasenschubs somit zwar die Vorhersage, wo Objektkanten zu einem Visibilitätsverlust führen, jedoch eignet sie sich nicht zur Elimination der Artefakte im Dunkelfeldbild bzw. zur Korrektur der Fehler im Phasenbild. Im Folgenden soll daher eine weitere Modellierung des Dunkelfeldsignals betrachtet werden.

4.4.3 Komplexer Dunkelfeldkontrast

In den meisten dem Autor bekannten Arbeiten zur Theorie des Dunkelfeldkontrasts, zum Beispiel bei Nesterets (2008), Yashiro et al. (2010) oder Lynch et al. (2011), wird hinsichtlich des Dekrements δ des Brechungsindex zwischen einem gleichmäßigen, auflösbaren Anteil δ_s und einer feinkörnigen, nicht auflösbaren Komponente δ_f unterschieden. Damit einher geht die Annahme, dass das Dunkelfeldsignal durch δ_f bestimmt wird, wohingegen die gemessene Phasenverschiebung $\Delta\Phi$ allein von δ_s abhängt. Die Beobachtungen in Abschnitt 4.4.1 deuten auf Korrelationen zwischen Visibilitätsverlust und Phasenversatz hin, sodass eine einfache Separation des Dekrements δ des Brechungsindex hinsichtlich seiner Beiträge zu den verschiedenen Bildmodalitäten nicht sinnvoll erscheint. Eine theoretische Untersuchung der Beiträge von δ zu beiden Bildmodalitäten findet sich bei Yang & Tang (2014). Dunkelfeldsignal und Phasenverschiebung werden hier durch eine komplexe Größe ausgedrückt, daher die Bezeichnung ‘komplexer Dunkelfeldkontrast’.

Zur Herleitung des komplexen Dunkelfeldkontrasts

Anstatt auf der Separation von δ in die beiden obig beschriebenen Anteile, fußt die Arbeit von Yang & Tang (2014) auf der Annahme, dass sowohl der Phasenschub $\Delta\varphi$ als auch die Projektion $\Lambda = \int \mu(\xi, \eta) d\eta$ des Absorptionskoeffizienten auf Größenskalen variieren, die nicht kleiner als die G2-Periode g_2 und die charakteristische Länge

$$d_c = \frac{\lambda z_T}{g_2} = m_T \frac{g_2}{2} \quad (4.71)$$

sind. Über eine Wellenfeldrechnung mittels Fresnel-Beugung in paraxialer Näherung expandieren Yang & Tang (2014) die Intensitätsverteilung, über eine Pixelfläche in der Detektorebene gesehen, in eine Fourierreihe und berechnen die Fourierkoeffizienten nullter und erster Ordnung. Dabei beschreiben sie die einfallende Röntgenstrahlung als ebene, monochromatische Welle der Amplitude E_0 und gehen von ideal phasenschiebenden bzw. absorbierenden Gittern mit einem Tastverhältnis von jeweils 1/2 aus. Die Transmission des Wellenfeldes durch das Messobjekt wird über die Projektionsnäherung (vgl. Gleichung 2.10) bestimmt. Durch die Bedingung an $\Delta\varphi$ und Λ über die charakteristische Länge d_c kann das bei der Propagation von G1 nach G2 auftretende Beugungsintegral vereinfacht und für $\Delta\varphi$ und Λ entsprechende Taylorentwicklungen eingesetzt werden. Die Details finden sich im Anhang von Yang & Tang (2014). Die Ergebnisse für die Fourierkoeffizienten finden sich in Gleichung (18) und (19) ebenda. In der Notation der

vorliegenden Arbeit lauten sie

$$C_0 = \frac{|E_0|^2}{2d_d^2} \int_{\xi_p-d_d/2}^{\xi_p+d_d/2} \int_{y_p-d_d/2}^{y_p+d_d/2} \exp[-\Lambda(\xi, y)] dy d\xi \quad (4.72)$$

und

$$C_1 = -i \frac{2|E_0|^2}{\pi^2 d_d^2} \int_{\xi_p-d_d/2}^{\xi_p+d_d/2} \int_{y_p-d_d/2}^{y_p+d_d/2} \exp \left[-\Lambda(\xi, y) - i \frac{\Delta\varphi(\xi + d_c, y) - \Delta\varphi(\xi - d_c, y)}{2} \right] \cdot \cos \left[\frac{\Delta\varphi(\xi + d_c, y) + \Delta\varphi(\xi - d_c, y) - 2\Delta\varphi(\xi, y)}{2} \right] dy d\xi \quad (4.73)$$

mit ξ_p bzw. y_p den Koordinaten des betrachteten Pixelmittelpunktes. Im Folgenden wird die y-Koordinate, wie im bisherigen Verlauf dieser Arbeit, unter der Annahme von Homogenität in ebendiese Richtung zugunsten einer vereinfachten Notation vernachlässigt.

Durch einen Vergleich der komplexen Fourierkoeffizienten C_0 und C_1 mit den Parametern der Phasestepplingkurve aus Gleichung 2.22, welche der Darstellung einer Fourierreihe in Amplituden-Phasen-Form (Hoffmann, 2011) entspricht, können sie mit den Bildmodalitäten verknüpft werden. Es gilt

$$C_0 = \bar{I} \quad (4.74)$$

und

$$C_1 = \frac{A}{2} \exp \left[i \left(\Phi - \frac{\pi}{2} \right) \right]. \quad (4.75)$$

Die Information über die beiden Bildmodalitäten $\Delta\Phi$ und D ist dann in der komplexen Größe

$$D_c = \frac{C_1/C_0}{C_1^{\text{ref}}/C_0^{\text{ref}}} \quad (4.76)$$

kodiert, dem komplexen Dunkelfeldkontrast (Yang & Tang, 2014). Dabei bezeichnet C_i den jeweiligen Fourierkoeffizienten der Objektmessung und C_i^{ref} denjenigen der entsprechenden Referenzaufnahme. Einsetzen von Gleichung 4.74 und 4.75 in Gleichung 4.76 ergibt

$$\begin{aligned} D_c &= \frac{A/\bar{I}}{A_0/\bar{I}_0} \exp[i(\Phi - \Phi_0)] \\ &= \frac{V}{V_0} \exp[i(\Phi - \Phi_0)]. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Folglich erhält man den differentiellen Phasenkontrast aus der komplexen Phase von D_c , das heißt

$$\Delta\Phi = \arg(D_c), \quad (4.78)$$

und das Dunkelfeldbild aus dem Betrag des komplexen Dunkelfeldkontrasts, also

$$D = |D_c|. \quad (4.79)$$

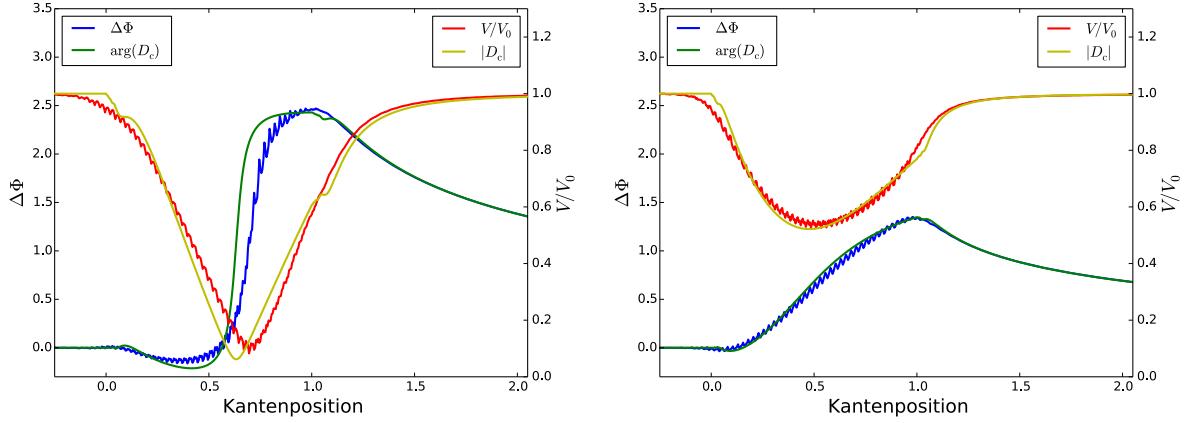


Abbildung 4.30: Verlauf der Kantensignale des Zylinders. Neben den Werten aus der Simulation wurden $\Delta\Phi$ und V/V_0 über Gleichung 4.78 und 4.79 aus Gleichung 4.82 berechnet und aufgetragen. Rechts wurde die Dichte des Zylinders auf die Hälfte des eigentlichen Wertes gesetzt.

Durch Einsetzen von Gleichung 4.72 und 4.73 in Gleichung 4.76 erhält man die Abhängigkeit des komplexen Dunkelfeldkontrasts von den Verteilungen von μ und δ zu

$$D_c = \frac{\frac{1}{d_d} \int_{\xi_p - d_d/2}^{\xi_p + d_d/2} \exp \left[-\Lambda(\xi) - i \frac{\Delta\varphi(\xi + d_c) - \Delta\varphi(\xi - d_c)}{2} \right] \cos \left[\frac{\Delta\varphi(\xi + d_c) + \Delta\varphi(\xi - d_c) - 2\Delta\varphi(\xi)}{2} \right] d\xi}{\frac{1}{d_d} \int_{\xi_p - d_d/2}^{\xi_p + d_d/2} \exp [-\Lambda(\xi)] d\xi}. \quad (4.80)$$

Vergleich mit den simulierten Kantensignalen

Im Hinblick auf eine mögliche Implementierung des komplexen Dunkelfeldkontrasts in die SIR gilt es, Gleichung 4.80 noch weiter zu vereinfachen. Yang & Tang (2014) nehmen an, dass die Projektion $\Lambda(\xi)$ des Absorptionskoeffizienten durch ihren Mittelwert über der Pixelfläche ersetzt und folglich aus dem Integral herausgezogen werden kann. Nimmt man weiterhin an, dass

$$\Delta\varphi(\xi + d_c) - \Delta\varphi(\xi) \approx \Delta\varphi(\xi) - \Delta\varphi(\xi - d_c) \quad (4.81)$$

gilt, so erhält man für Gleichung 4.80 nach Ersetzen des cos-Terms durch Exponentialfunktionen

$$D_c \approx \frac{1}{d_d} \int_{\xi_p - d_d/2}^{\xi_p + d_d/2} \exp [-i(\Delta\varphi(\xi) - \Delta\varphi(\xi - d_c))] d\xi. \quad (4.82)$$

Man beachte, dass dieser Ausdruck sensitiv auf Nichtlinearitäten im Phasenverlauf ist. Im Fall einer linearen Abhängigkeit $\Delta\varphi(\xi) \propto \xi$ nimmt die Exponentialfunktion einen konstanten Wert an, was gemäß Gleichung 4.79 zu einem Wert von $V/V_0 = 1$ im Dunkelfeld führt.

In Abbildung 4.30 sind die über Gleichung 4.78 und 4.79 aus Gleichung 4.82 berechneten Verläufe von $\Delta\Phi$ und D zum Vergleich mit den Werten aus der Simulation gegenüber der Kantenposition

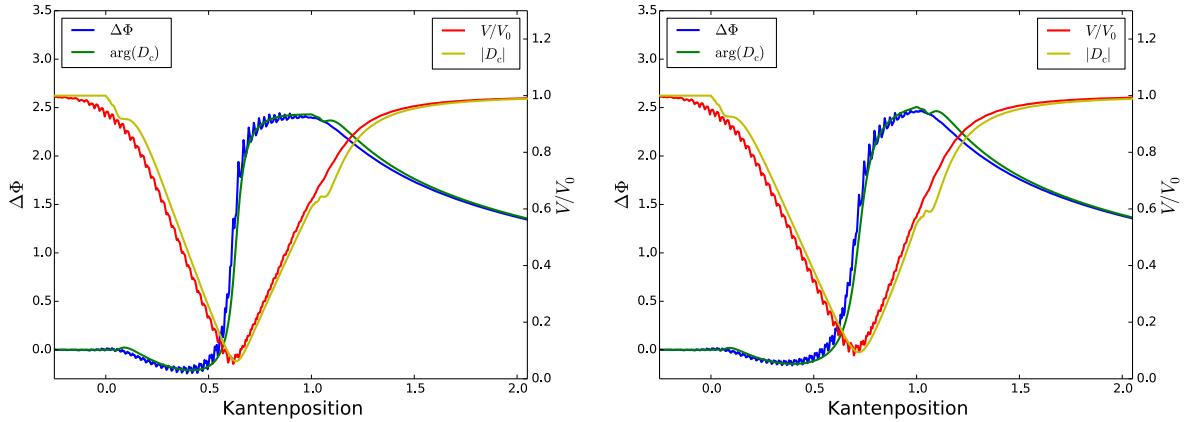


Abbildung 4.31: Simulierte Kantensignale und Berechnungen über den komplexen Dunkelfeldkontrast ohne Absorption (links) und bei Berücksichtigung deren Einflusses mittels Gleichung 4.83.

des Zylinders aufgetragen. Das Integral in Gleichung 4.82 wurde dabei numerisch durch eine Summe approximiert. Im Gegensatz zur Modellierung des Dunkelfeldes über die zweite Ableitung des Phasenverlaufs, siehe Abbildung 4.29, stimmt hier der aus der Modellrechnung vorhergesagte Verlauf relativ gut mit den simulierten Werten überein. Ebenso reproduziert der komplexe Dunkelfeldkontrast den Verlauf des Phasenversatzes besser als die Abschätzung über den mittleren differentiellen Phasenschub in Abbildung 4.27.

Für beide Simulationen zeigen sich Abweichungen zu den Signalverläufen aus dem komplexen Dunkelfeldkontrast. So sind die Kantenpositionen des maximalen Visibilitätsverlusts leicht verschoben, ebenso die Stellen des maximalen Anstiegs von $\Delta\Phi$. Diese Abweichungen nehmen im Fall der reduzierten Dichte des Messobjekts ab, was die Vermutung nahelegt, dass die obig beschriebene Ersetzung von $\Lambda(\xi)$ durch seinen Mittelwert nur für schwach absorbierende Objekte bis zu einem gewissen Schwellenwert gültig ist. Diese Vermutung bestätigt eine weitere Simulation, in der der Absorptionskoeffizient von Aluminium auf null gesetzt wurde. Die Abweichungen zwischen simulierten und berechneten Verläufen – auf letztere hat der verschwindende Absorptionskoeffizient keinen Einfluss – sind in diesem Fall deutlich reduziert, siehe Abbildung 4.31. Verzichtet man auf die Vereinfachung von Yang & Tang (2014) bezüglich der Projektion $\Lambda(\xi)$, so lässt sich Gleichung 4.80 annähern durch

$$D_c \approx \frac{\frac{1}{d_d} \int_{\xi_p - d_d/2}^{\xi_p + d_d/2} \exp[-\Lambda(\xi) - i(\Delta\varphi(\xi) - \Delta\varphi(\xi - d_c))] d\xi}{\frac{1}{d_d} \int_{\xi_p - d_d/2}^{\xi_p + d_d/2} \exp[-\Lambda(\xi)] d\xi}. \quad (4.83)$$

Wie Abbildung 4.31 zeigt, führt dies im Vergleich zu der Näherung über Gleichung 4.82 in Abbildung 4.30 zu einer besseren Übereinstimmung zwischen Simulation und Berechnung der Kantensignale.

Verwendung in der SIR

Im Folgenden soll der komplexe Dunkelfeldkontrast in die SIR eingebunden werden. Zugunsten einer geringeren Komplexität bei der Berechnung der Log-Likelihood-Funktion und ihres Gradienten, wird Gleichung 4.82 zur Approximation der Größe D_c verwendet. Zwar wies sie im Vergleich zu Gleichung 4.83 vor allem bei stärker absorbierenden Objekten größere Abweichungen zu den simulierten Kantensignalen auf, jedoch kann dies im Fall der CT-Rekonstruktion gegenüber anderen limitierenden Faktoren in der Modellierung, beispielsweise die diskretisierte Darstellung des Messobjekts oder die approximative Beschreibung des Messvorgangs über die Projektoren, wohl vernachlässigt werden.

Das Vorwärtsmodell aus Gleichung 3.1 zur Bestimmung des Erwartungswertes $\bar{N}_{i,s}$ nimmt die Form

$$\bar{N}_{i,s} = N_i^0 T_i [1 + V_i^0 D_i |D_i^c| \cos(\Phi_{i,s}^0 + \arg(D_i^c))] \quad (4.84)$$

an. Das Integral in Gleichung 4.82 wird numerisch durch eine Summe approximiert, das heißt

$$\begin{aligned} D_i^c &= \sum_{l=1}^{n_l} \frac{1}{n_l} \exp[-i(\Delta\varphi(\xi_{i,l}) - \Delta\varphi(\xi_{i,l} - d_c))] \\ &= \sum_{l=1}^{n_l} \frac{1}{n_l} \exp \left[i \sum_j \Delta M_{ij}^{(l)} \delta_j \right]. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Die Punkte $\xi_{i,l}$ seien dabei äquidistant über die Breite des Pixels mit Mittelpunkt ξ_i verteilt. Der Phasenschub $\Delta\varphi$ kann analog zu Λ in der Transmission, siehe Abschnitt 3.1.1, über den Vorwärtsprojektor M_{ij} ausgedrückt werden. Gemäß Gleichung 2.12 muss letzterer dazu mit der Wellenzahl skaliert werden, das heißt $M_{ij} \rightarrow kM_{ij}$. Die Differenz der in ξ -Richtung um d_c verschobenen Phasenschübe wird dann durch die Differenz ΔM_{ij} des jeweiligen Paares Koeffizientenmatrizen beschrieben. Dies ist schematisch in Abbildung 4.32 dargestellt. Es ist fraglich, inwieweit die Diskretisierung des Messobjekts und die limitierte Auflösung des abbildenden Systems es erlauben, die benötigten Differenzen des Phasenschubs – d_c ist gemäß Gleichung 4.71 von der Größenordnung der G2-Periode – während der Rekonstruktion zu reproduzieren. Dies ist eine Herausforderung der Methode. Ferner gilt es zu beachten, dass Gleichung 4.84 mit D_i die Beschreibung des Visibilitätsverlusts durch den Streukoeffizienten ϵ beinhaltet. Laut den Annahmen in der Herleitung des komplexen Dunkelfeldkontrasts, würde dieser nun das Dunkelfeld von Strukturen beschreiben, die auf Größenskalen kleiner g_2 bzw. d_c variieren.

Durch das neue Vorwärtsmodell aus Gleichung 4.84 ändert sich der Gradient ∇l der Log-Likelihood-Funktion. Insbesondere die Komponenten $\partial l / \partial \delta_j$ erfordern eine komplette Neurechnung. Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \delta_j} l &= \sum_{i,s} \left(\frac{n_{i,s}}{\bar{N}_{i,s}} - 1 \right) N_i^0 T_i V_i^0 D_i \left[\cos(\Phi_{i,s}^0 + \arg(D_i^c)) \frac{\partial}{\partial \delta_j} |D_i^c| \right. \\ &\quad \left. - |D_i^c| \sin(\Phi_{i,s}^0 + \arg(D_i^c)) \frac{\partial}{\partial \delta_j} \arg(D_i^c) \right]. \end{aligned} \quad (4.86)$$

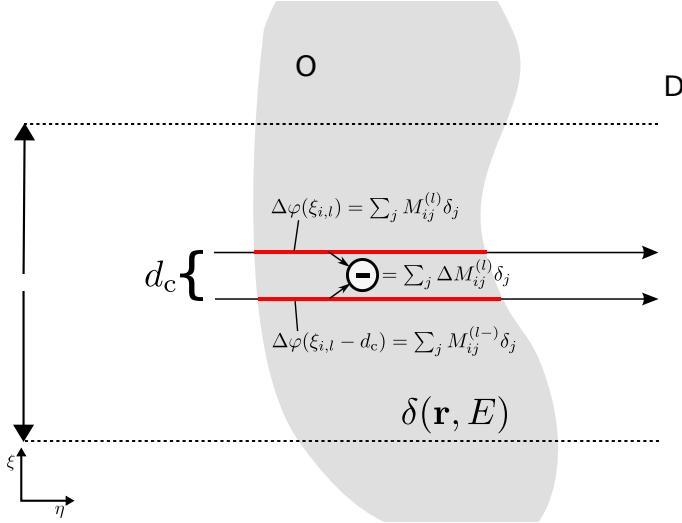


Abbildung 4.32: Schematische Darstellung zur Berechnung von D_c . Der Projektator $\Delta M_{ij}^{(l)}$ liefert die Differenz der Phasenschübe bei $\xi_{i,l}$ und $\xi_{i,l} - d_c$. Der komplexe Dunkelfeldkontrast ergibt sich aus der Mittelung einer komplexen Exponentialfunktion mit dieser Differenz im Argument über den Detektorpixel.

Die Ableitungen des Betrags und des Arguments von D_i^c können über

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln D_i^c = \frac{1}{D_i^c} \frac{\partial D_i^c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \ln |D_i^c| + i \frac{\partial}{\partial x} \arg(D_i^c) = \frac{1}{|D_i^c|} \frac{\partial |D_i^c|}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial x} \arg(D_i^c) \quad (4.87)$$

durch den Real- bzw. den Imaginärteil der Ableitung von D_i^c ausgedrückt werden. Man erhält

$$\frac{\partial}{\partial x} |D_i^c| = |D_i^c| \operatorname{Re} \left(\frac{1}{D_i^c} \frac{\partial}{\partial x} D_i^c \right) \quad (4.88)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial x} \arg(D_i^c) = \operatorname{Im} \left(\frac{1}{D_i^c} \frac{\partial}{\partial x} D_i^c \right). \quad (4.89)$$

Insgesamt ergibt sich der Gradient damit zu

$$\frac{\partial}{\partial \mu_j} l = \sum_{i,s} (\bar{N}_{i,s} - n_{i,s}) \cdot M_{ij}, \quad (4.90)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \delta_j} l &= \sum_{i,s} \left(\frac{n_{i,s}}{\bar{N}_{i,s}} - 1 \right) N_i^0 T_i V_i^0 D_i |D_i^c| \left[\cos(\Phi_{i,s}^0 + \arg(D_i^c)) \operatorname{Re} \left(\frac{1}{D_i^c} \frac{\partial}{\partial \delta_j} D_i^c \right) \right. \\ &\quad \left. - \sin(\Phi_{i,s}^0 + \arg(D_i^c)) \operatorname{Im} \left(\frac{1}{D_i^c} \frac{\partial}{\partial \delta_j} D_i^c \right) \right], \end{aligned} \quad (4.91)$$

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon_j} l = \sum_{i,s} \left(1 - \frac{n_{i,s}}{\bar{N}_{i,s}} \right) N_i^0 T_i V_i^0 D_i |D_i^c| \cos(\Phi_{i,s}^0 + \arg(D_i^c)) \cdot M_{ij}, \quad (4.92)$$

mit

$$\frac{\partial}{\partial \delta_j} D_i^c = \sum_{l=1}^{n_l} \frac{1}{n_l} \exp \left[i \sum_k \Delta M_{ik}^{(l)} \delta_k \right] \cdot i \Delta M_{ij}^{(l)}. \quad (4.93)$$

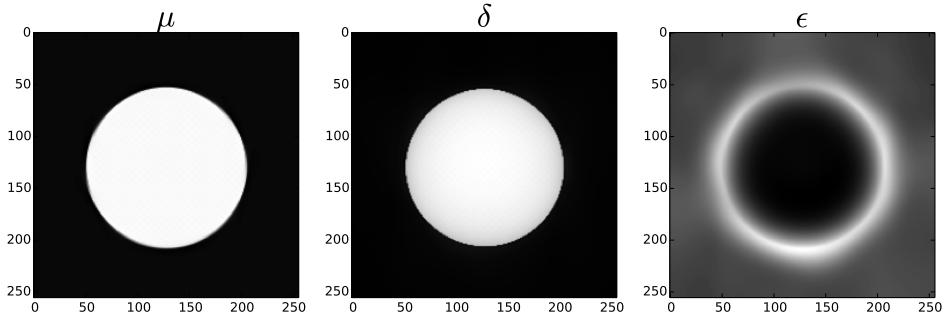


Abbildung 4.33: Rekonstruktion über den komplexen Dunkelfeldkontrast auf einem Gitter aus 220×220 Blobs mit den Rekonstruktionsparametern $R = 0,386$, $m = 2$ und $\alpha = 4,58$

Ein erster Test der SIR unter Berücksichtigung des komplexen Dunkelfeldkontrasts erfolgte anhand des simulierten Datensatzes aus Abschnitt 4.2.1. Eingangs wurde mit den dort aufgeführten Parametern rekonstruiert. Zur Approximation von D_i^c über Gleichung 4.85 wurde $n_l = 50$ gewählt. Die Rekonstruktionen terminierten erfolgreich. Allerdings gelingt es der neuen Modellgebung nicht, den Visibilitätsverlust komplett ohne Beiträge durch die Streukoeffizienten ϵ_j zu reproduzieren. Ebenso wenig führt der komplexe Dunkelfeldkontrast, verglichen mit den Ergebnissen aus Abbildung 4.11, zu einer Reduktion der Fehler im δ -Bild. Beide Ergebnisse stehen im Widerspruch zu den vorangegangenen Betrachtungen, wo die Modellierung durch den komplexen Dunkelfeldkontrast gut mit den simulierten Kantensignalen übereinstimmt. Als möglicher Grund für das Misslingen in der Rekonstruktion kommt die Diskretisierung des Messobjekts in Frage. In den Ergebnissen aus Abbildung 4.30 und 4.31 konnte der Phasenschub aufgrund der einfachen Struktur des Messobjekts beliebig genau berechnet werden. Bei einer Darstellung des Zylinders über Voxel oder Blobs ist dies nicht möglich. Diesbezüglich ist zudem festzuhalten, dass die Kanten der Voxel Artefakte in den projizierten Werten D_c hervorrufen können. Eine alternative Möglichkeit ist, dass die komplexere Modellbildung zu Problemen des Optimierungsalgorithmus bei der Minimierung der Zielfunktion führt und dadurch die wahre Lösung nicht erreicht wird.

Zur Prüfung der ersten Erklärung wurde versucht, die Rekonstruktion auf einem feineren Gitter an Bildbasisfunktionen durchzuführen, was eine präzisere Modellierung der Variationen im Phasenschub erlauben sollte. Aufgrund der beobachteten Artefakte in der Abschätzung des komplexen Dunkelfeldkontrasts bei Verwendung der voxelbasierten Projektoren kam hierbei ein Gitter aus 220×220 Blobs zum Einsatz. Damit die größere Anzahl an Basisfunktionen nicht zu einem stärkeren Rekonstruktionsrauschen führt, wurde die Zielfunktion um den Regularisierungsterm aus Abschnitt 4.3.2 ergänzt. Wie in Abbildung 4.33 gezeigt, können die angestrebten Verbesserungen im Phasen- und Dunkelfeldbild auch mittels der feineren Diskretisierung nicht erreicht werden. Die Frage, ob dies ein Problem der diskreten Modellierung oder der numerischen Optimierung ist, konnte hier abschließend nicht geklärt werden. Da weitere Verfeinerungen des Rekonstruktionsgitters zu einem immer größer werdenden Rechenaufwand führen, bieten sich diesbezüglich eventuell Untersuchungen in einer höheren Talbotordnung an, was eine Zunahme der charakteristischen Länge d_c bewirkt und somit eine Betrachtung der Variationen des Phasenschubs bei größeren Abständen.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Untersuchungen zu einer neuartigen iterativen Rekonstruktionsmethode für die Computertomographie im Feld der gitterbasierten Röntgenbildgebung durchgeführt. Anders als herkömmliche Verfahren operiert der Rekonstruktionsalgorithmus direkt auf den gemessenen Intensitätswerten. Schätzwerte für die drei Bildmodalitäten der Talbot-Lau-Röntgenbildgebung werden dabei simultan mittels Likelihood-Maximierung erhalten. Das untersuchte Rekonstruktionsverfahren eignet sich insbesondere für Datensätze bzw. Aufnahmen mit unvollständigen Phasestepplingdaten. In dieser Arbeit wurden dazu drei mögliche Aufnahmeschemata untersucht, in denen pro Winkelschritt der CT nur eine Aufnahme gemacht wird: das Schema “konstant” mit fester Position des Analysatorgitters, das Konzept “random” mit einer zufälligen Abtastposition in jeder Projektion und das Protokoll “interlaced”, in welchem mit den Winkelschritten zyklisch durch die vorgegebenen Gitterpositionen eines Phasesteppling-Scans iteriert wird.

Die Methode wurde anhand der Messdaten eines Phantoms, über künstlich mit Hilfe einer Wellenfeldsimulation generierte Datensätze sowie mittels eines numerischen Phantoms evaluiert. Bei Rekonstruktionen mit vollständigen Phasestepplingdaten erzielte das iterative Verfahren dabei stets Ergebnisse, die vergleichbar mit denen einer gefilterten Rückprojektion sind. Für die simulierten Daten hat sich gezeigt, dass Effekte wie die Kantenanhebung in den iterativen Rekonstruktionen einen größeren Einfluss auf die Ergebnisse haben. Sie müssten in der Vorwärtsrechnung berücksichtigt werden, sollten sie auch in Realität in Erscheinung treten. Für den Messdatensatz wurden in den rekonstruierten Schnittbildern zudem die Kontrast-Rausch-Verhältnisse bestimmt. Die Resultate der neuen Methode wiesen dabei im Vergleich zu ihren Gegenstücken aus der FBP ein merklich stärkeres Bildrauschen auf. Betrachtungen zur Konvergenz der iterativen Optimierung konnten zeigen, dass der Absorptionskoeffizient die Likelihood-Funktion deutlich stärker beeinflusst als das Dekrement des Brechungsindex oder der Streukoeffizient des Dunkelfelds. Entsprechend konvergierte er wesentlich schneller als die anderen beiden Bildmodalitäten.

Analoge Untersuchungen wurden für die drei vorgeschlagenen Aufnahmeprotokolle mit einem Phasestep pro Projektionswinkel durchgeführt. Das Schema “konstant” führte dabei in keinem Fall zu einer erfolgreichen Rekonstruktion. Bezuglich der anderen beiden Varianten konnte gezeigt werden, dass die entsprechend reduzierten Datensätze prinzipiell noch die für eine erfolgreiche Rekonstruktion benötigte Information enthalten. Die Qualität der Ergebnisse variiert dabei. Sie profitiert von einer möglichst breiten Phasenabtastung in einem möglichst kleinen Winkelbereich. Das Absorptionsbild konvergiert auch hier am schnellsten, die Konvergenz des Streukoeffizienten verläuft am langsamsten. Er weist auch die größten verbleibenden Fehler bzw. Abweichungen zu den Rekonstruktionen über den jeweils vollen Datensatz auf. Für die Protokolle “random” und “interlaced” haben die Betrachtungen zum numerischen Phantom – anders als im Fall vollständiger Phasestepplingdaten – gezeigt, dass sich allein aufgrund der

mangelnden Konvexität der Zielfunktion Ergebnisse ergeben können, die merklich von den wahren Verteilungen der Bildkoeffizienten abweichen.

Bei der Evaluation des Rekonstruktionsverfahrens wurden drei verschiedene Projektoren in der Vorwärtsrechnung eingesetzt: der Projektor nach Siddon, der *distance-driven* Projektor sowie eine Methode auf Basis von Blobs. Die letzten beiden wurden im Verlauf dieser Arbeit in die Rekonstruktionsumgebung implementiert. Die Methode nach Siddon lieferte das beste Konvergenzverhalten, das heißt eine erfolgreiche Termination des Optimierungsverfahrens nach möglichst wenigen Iterationen. Die Repräsentation der Schnittbilder durch Blobs führt dagegen zu einer inhärenten Glättung und ermöglicht eine direkte Implementierung der differentiellen Projektion. Die Konvergenz des Streukoeffizienten ist im Vergleich zu den anderen beiden Projektoren um ein Vielfaches langsamer. In zukünftigen Arbeiten biete sich daher eventuell eine Mischform aus zwei Projektoren an, in der Absorption und Phasenkontrast durch Blobs, der Streukoeffizient hingegen durch Voxel diskretisiert wird.

Die größten Nachteile der iterativen Methode sind die mit ihrem hohen Rechenaufwand verknüpfte Rekonstruktionsdauer sowie das im Vergleich zur FBP verstärkte Bildrauschen. Es wurde gezeigt, dass die Konvergenz des Optimierungsverfahrens durch die Wahl von Startwerten aus einer FBP beschleunigt werden kann. Für den Fall unvollständiger Phasesteppingdaten, die keine Phasenrekonstruktion und somit keine direkte Rekonstruktion über die FBP erlauben, wurde mit einer pixelweisen Interpolation der Intensitätswerte die Möglichkeit geschaffen, dennoch Startwerte für das iterative Verfahren zu generieren. Diese Methode gilt es in nachfolgenden Arbeiten gezielt zu evaluieren. Des Weiteren können Änderungen am Optimierungsalgorithmus zu Verbesserungen des Konvergenzverhaltens führen. So berichteten Brendel et al. (2016) kürzlich über eine im Vergleich zum CG-Algorithmus schnellere Konvergenz bei Verwendung eines einfachen Gradientenverfahrens, welches die Zielfunktion stets nur bezüglich eines Bildes optimiert und dabei zwischen den drei Bildmodalitäten alterniert.

Zur Reduktion des Bildrauschens wurde die Zielfunktion um einen Regularisierungsterm, basierend auf der Huber-Funktion, ergänzt. Die Kontrast-Rausch-Verhältnisse in den Rekonstruktionen konnten dadurch erhöht werden. Die prägnantesten Verbesserungen ergeben sich dabei im Absorptionsbild, wohingegen es im Phasenkontrast zu Kontrasteinbußen kommen kann. Diesbezüglich lohnt es sich nach alternativen Funktionen für die Regularisierung zu suchen.

In weiteren Untersuchungen wurden die Auswirkungen von Objektkanten auf das Signalverhalten in den einzelnen Bildmodalitäten analysiert. Im Dunkelfeldbild ergeben sich richtungsabhängige Visibilitätsverluste, was zusammen mit der isotropen Beschreibung durch den Streukoeffizienten zu Inkonsistenzen in den Rekonstruktionen führt. Bezuglich des Phasenkontrast hat sich gezeigt, dass der einfache Zusammenhang zwischen differentiellem Phasenschub und Phasenversatz der Phasesteppingkurven an Kanten nicht mehr gültig ist, was in der Computertomographie falsch rekonstruierte Werte für das gesamte Messobjekt nach sich zieht. Die Signale beider Bildmodalitäten konnten mittels Simulationen qualitativ über das Verhalten von Amplitude und Phase des Talbotmusters erklärt werden. Von den im Anschluss daran untersuchten Modellen erwies sich der von Yang & Tang (2014) eingeführte komplexe Dunkelfeldkontrast als geeignet, die simulierten Kantensignale zu reproduzieren. Die Integration dieses Modells in die Vorwärtsrechnung der Rekonstruktionsumgebung erbrachte allerdings nicht die gewünschten

Verbesserungen in den Schnittbildern. Ob dies an der Diskretisierung des Messobjekts oder dem Optimierungsalgorithmus scheitert, konnte final nicht geklärt werden.

Aufgrund der Möglichkeit, mit einer Aufnahme pro Winkelschritt zu rekonstruieren, wäre es ein Fernziel der vorgestellten Methode, die Talbot-Lau-Phasenkontrastbildgebung auf kontinuierlich rotierenden Scan-Einheiten zu etablieren. Dazu sei betont, dass in allen in dieser Arbeit durchgeführten Rekonstruktionen die Freifeld-Phasesteppingkurven bekannt waren. Es werden also Verfahren benötigt, die es erlauben, Veränderungen in den Freifeldsignalen, bedingt etwa durch thermische Effekte, zuverlässig aus einer einmaligen Messung vorherzusagen. Dies kann durch die Betrachtung von Bereichen der Objektmessung unterstützt werden, die nicht vom Messobjekt verdeckt sind. Bezuglich der Modellgebung gilt es, weitere Korrelationen zwischen den einzelnen Bildern zu berücksichtigen. So bestimmen sich der Absorptionskoeffizient und das Dekrement des Brechungsindex aus der Elektronendichte und der (effektiven) Kernladungszahl des jeweiligen Materials (Qi et al., 2010). Ferner wäre die Einbeziehung spektraler Effekte, wie der Strahlaufhärtung oder der Strahldispersion, wünschenswert. Im Hinblick auf die Ergebnisse bei der Modellierung des komplexen Dunkelfeldkontrasts in der Rekonstruktion, empfiehlt es sich diesbezüglich, kompliziertere Modelle nicht direkt in die Vorwärtsrechnung und damit auch in das Optimierungsschema einzubinden. Stattdessen kann versucht werden, derlei Effekte über Vor- bzw. Nachbearbeitungsschritte der Datensätze zu behandeln. Eine Überladung des eigentlichen Rekonstruktionsalgorithmus wird dann vermieden.

Literaturverzeichnis

- Als-Nielsen J., McMorrow D., 2001, Elements of Modern X-ray Physics, Wiley
- Bayer F.L., Hu S., Maier A., et al., 2014, Reconstruction of scalar and vectorial components in X-ray dark-field tomography., Proceedings of the National Academy of Sciences 111, 12699
- Bech M., Bunk O., Donath T., et al., 2010, Quantitative x-ray dark-field computed tomography., Physics in Medicine and Biology 55, 5529
- Beister M., Kolditz D., Kalender W.A., 2012, Iterative reconstruction methods in X-ray CT., Physica Medica 28, 94
- Benedicks M., 1985, On Fourier transforms of functions supported on sets of finite Lebesgue measure., Journal of Mathematical Analysis and Applications 106, 180
- Bethge K., Walter G., Wiedemann B., 2013, Kernphysik: Eine Einführung, Springer-Lehrbuch, Springer Berlin Heidelberg
- Bonse U., Hart M., 1965, An X-ray interferometer., Applied Physics Letters 6, 155
- Bracewell R.N., 1956, Strip integration in radio astronomy., Australian Journal of Physics 9, 198
- Brahme A., 2014, Comprehensive Biomedical Physics, Elsevier Science
- Brendel B., von Teuffenbach M., Noël P.B., et al., 2016, Penalized maximum likelihood reconstruction for x-ray differential phase-contrast tomography., Medical Physics 43, 188
- Bronnikov A.V., 2002, Theory of quantitative phase-contrast computed tomography., JOSA A 19, 472
- Bushberg J.T., Seibert J.A., Leidholdt Jr E.M., Boone J.M., 2002, The Essential Physics of Medical Imaging, Lippincott Williams & Wilkins
- Buzug T., 2008, Computed Tomography: From Photon Statistics to Modern Cone-Beam CT, Springer
- De Man B., Basu S., 2002, In: Nuclear Science Symposium Conference Record, 2002 IEEE, Vol. 3., IEEE, p.1477
- De Man B., Basu S., 2004, Distance-driven projection and backprojection in three dimensions., Physics in Medicine and Biology 49, 2463
- Deans S., 2007, The Radon Transform and Some of Its Applications, Dover Books on Mathematics Series, Dover Publications
- Faris G.W., Byer R.L., 1988, Three-dimensional beam-deflection optical tomography of a supersonic jet., Applied Optics 27, 5202
- Fisher R.A., 1922, On the mathematical foundations of theoretical statistics., Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character 309–368
- Gödel K.C., 2011, Röntgen-Phasenkontrast-Bildgebung: Abhängigkeit des Dunkelfeldsignals von der Objektdicke, Bachelorarbeit, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

- Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M., 2007, Table of integrals, series, and products, Elsevier/Academic Press, Amsterdam Translated from the Russian, Translation edited by Alan Jeffrey and Daniel Zwillinger
- Hahn D., 2014, Statistical Iterative Reconstruction for X-ray Phase-Contrast Computed Tomography, Dissertation, Technische Universität München
- Hoffmann J., 2011, Spektrale Analyse mit MATLAB und Simulink: Anwendungsorientierte Computer-Experimente, Oldenbourg Verlag
- Hounsfield G.N., 1973, Computerized transverse axial scanning (tomography): Part 1. Description of system., The British Journal of Radiology 46, 1016
- Huber P.J., 1964, Robust Estimation of a Location Parameter., The Annals of Mathematical Statistics 35, 73
- Jones E., Oliphant T., Peterson P., et al., 2001, SciPy: Open source scientific tools for Python, <http://www.scipy.org/> [Online; Stand 6. Dezember 2015]
- Kaczmarz S., 1937, Angenäherte auflösung von systemen linearer gleichungen., Bulletin International de l'Academie Polonaise des Sciences et des Lettres 35, 355
- Kalender W., 2000, Computertomographie: Grundlagen, Gerätetechnologie, Bildqualität, Anwendungen, Publicis-MCD-Verlag
- Köhler T., Brendel B., Roessl E., 2011, Iterative reconstruction for differential phase contrast imaging using spherically symmetric basis functions., Medical Physics 38, 4542
- Lau E., 1948, Beugungerscheinungen an Doppelrastern., Annalen der Physik 437, 417
- Lewitt R.M., 1990, Multidimensional digital image representations using generalized Kaiser-Bessel window functions., JOSA A 7, 1834
- Lewitt R.M., 1992, Alternatives to voxels for image representation in iterative reconstruction algorithms., Physics in Medicine and Biology 37, 705
- Li X., Luo S., Talbert A., et al., 2011, A compressed sensing-based iterative algorithm for CT reconstruction and its possible application to phase contrast imaging., BioMedical Engineering OnLine 10, 1
- Long Y., Fessler J., Balter J.M., et al., 2010, 3D forward and back-projection for X-ray CT using separable footprints., IEEE Transactions on Medical Imaging 29, 1839
- Lynch S.K., Pai V., Auxier J., et al., 2011, Interpretation of dark-field contrast and particle-size selectivity in grating interferometers., Applied Optics 50, 4310
- Matej S., Lewitt R.M., 1996, Practical considerations for 3-D image reconstruction using spherically symmetric volume elements., IEEE Transactions on Medical Imaging 15, 68
- Michel T., Rieger J., Anton G., et al., 2013, On a dark-field signal generated by micrometer-sized calcifications in phase-contrast mammography., Physics in Medicine and Biology 58, 2713
- Momose A., Fukuda J., 1995, Phase-contrast radiographs of nonstained rat cerebellar specimen., Medical Physics 22, 375
- Momose A., Kawamoto S., Koyama I., et al., 2003, Demonstration of X-ray Talbot interferometry., Japanese Journal of Applied Physics 42, L866
- Momose A., Takeda T., Itai Y., Hirano K., 1996, Phase-contrast X-ray computed tomography for observing biological soft tissues., Nature Medicine 2, 473
- Nesterets Y.I., 2008, On the origins of decoherence and extinction contrast in phase-contrast imaging., Optics Communications 281, 533

- Nocedal J., Wright S., 2006, Numerical Optimization, Springer Science & Business Media
- Paganin D., 2006, Coherent X-Ray Optics, Oxford Series on Synchrotron Radiation, OUP Oxford
- Patorski K., 1983, Incoherent superposition of multiple self-imaging Lau effect and moiré fringe explanation., *Journal of Modern Optics* 30, 745
- Penrose R., 1955, A generalized inverse for matrices., *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 51, 406
- Pfeiffer F., Bech M., Bunk O., et al., 2008, Hard-X-ray dark-field imaging using a grating interferometer., *Nature Materials* 7, 134
- Pfeiffer F., Weitkamp T., Bunk O., David C., 2006, Phase retrieval and differential phase-contrast imaging with low-brilliance X-ray sources., *Nature Physics* 2, 258
- Polak E., Ribiere G., 1969, Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées., *Revue française d'informatique et de recherche opérationnelle*, série rouge 3, 35
- Qi Z., Zambelli J., Bevins N., Chen G.H., 2010, Quantitative imaging of electron density and effective atomic number using phase contrast CT., *Physics in Medicine and Biology* 55, 2669
- Radon J., 1917, Über die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte längs gewisser Mannigfaltigkeiten., *Verh. Sächs. Akad. Wiss. Leipzig, Math. Phys. Klass.* 69, 262
- Raupach R., Flohr T.G., 2011, Analytical evaluation of the signal and noise propagation in x-ray differential phase-contrast computed tomography., *Physics in Medicine and Biology* 56, 2219
- Ritter A., 2015, X-ray Talbot-Lau interferometry: Simulation and optimization, Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
- Ritter A., Anton G., Bayer F., et al., 2014a, Simulation of dark-field imaging of micro-calcifications in human breast tissue with X-ray Talbot-Lau interferometry., *Journal of Instrumentation* 9, C05028
- Ritter A., Bartl P., Bayer F., et al., 2014b, Simulation framework for coherent and incoherent X-ray imaging and its application in Talbot-Lau dark-field imaging., *Optics Express* 22, 23276
- Ritter A., Bayer F., Durst J., et al., 2013, Simultaneous maximum-likelihood reconstruction for x-ray grating based phase-contrast tomography avoiding intermediate phase retrieval., arXiv preprint arXiv:1307.7912
- Röntgen W.C., 1898, Über eine neue Art von Strahlen., *Annalen der Physik* 300, 1
- Schuster M., 2016, Design und Charakterisierung eines Talbot-Interferometers mit Mikrofokus-Röntgenröhre, Masterarbeit, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
- Shewchuk J.R., 1994, An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain, <https://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf> [Online; Stand 3. Dezember 2015]
- Siddon R.L., 1985, Fast calculation of the exact radiological path for a three-dimensional CT array., *Medical Physics* 12, 252
- Suleski T.J., 1997, Generation of Lohmann images from binary-phase Talbot array illuminators., *Applied Optics* 36, 4686
- Talbot H.F., 1836, LXXVI. Facts relating to optical science. No. IV., *The London and Edinburgh Philosophical Magazine and Journal of Science* 9, 401

- Van Der Walt S., Schönberger J.L., Nunez-Iglesias J., et al., 2014, scikit-image: image processing in Python., PeerJ 2, e453
- Van Rossum G., Drake F.L., 2011, The python language reference manual, Network Theory Ltd.
- Watson G., 1944, A Treatise on the Theory of Bessel Functions, Cambridge University Press
- Weber T., 2013, Untersuchungen zur gitterbasierten Phasenkontrast-Röntgenbildgebung in polychromatischen Strahlungsfeldern, Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
- Weber T., Bartl P., Bayer F., et al., 2011, Noise in x-ray grating-based phase-contrast imaging., Medical Physics 38, 4133
- Weber T., Pelzer G., Rieger J., et al., 2015, Report of improved performance in Talbot–Lau phase-contrast computed tomography., Medical Physics 42, 2892
- Weitkamp T., Diaz A., David C., et al., 2005, X-ray phase imaging with a grating interferometer., Optics Express 13, 6296
- Wilkins S., Gureyev T., Gao D., et al., 1996, Phase-contrast imaging using polychromatic hard X-rays., Nature 384, 335
- Wolf J., Sperl J.I., Schaff F., et al., 2015, Lens-term-and edge-effect in X-ray grating interferometry., Biomedical Optics Express 6, 4812
- Yang Y., Tang X., 2012, The second-order differential phase contrast and its retrieval for imaging with x-ray Talbot interferometry., Medical Physics 39, 7237
- Yang Y., Tang X., 2014, Complex dark-field contrast and its retrieval in x-ray phase contrast imaging implemented with Talbot interferometry., Medical Physics 41, 101914
- Yashiro W., Momose A., 2015, Effects of unresolvable edges in grating-based X-ray differential phase imaging., Optics Express 23, 9233
- Yashiro W., Terui Y., Kawabata K., Momose A., 2010, On the origin of visibility contrast in x-ray Talbot interferometry., Optics Express 18, 16890
- Zanette I., Bech M., Pfeiffer F., Weitkamp T., 2011, Interlaced phase stepping in phase-contrast x-ray tomography., Applied Physics Letters 98, 094101
- Zernike F., 1935, Das Phasenkontrastverfahren bei der mikroskopischen Beobachtung., Z. tech. Phys 16, 454
- Zhihua Q., Guang-Hong C., 2008, Direct fan-beam reconstruction algorithm via filtered backprojection for differential phase-contrast computed tomography., X-Ray Optics and Instrumentation 2008

Danksagung

Dem Dank entfliehen, verrät ein Herz, dem Danken Mühe macht.
— Paul von Heyse (1830-1914)

An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei all jenen bedanken, die mich fachlich oder persönlich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben. Im Besonderen geht mein Dank an

- Prof. Dr. Gisela Anton für die Überlassung des Themas, die gute Betreuung und den ein oder anderen neuen Anstoß.
- meinen Betreuer André Ritter, der trotz erhöhter Belastung durch die eigene Doktorarbeit meist ein offenes Ohr für meine Fragen und Probleme hatte.
- Max Schuster, meinen Weggefährten durch das gesamte Physikstudium, für die unzähligen fachlichen und außerfachlichen Gespräche in Bus, Bahn oder bei Kaffee sowie speziell für das Korrekturlesen dieser Arbeit.
- die gesamte *MedPhys*-Gruppe sowie insbesondere an meine Raumteiler Andreas Artinger, Christian Hauke, Patrick Hufschmidt, Sebastian Lachner, Jonas Pfeiffer und Judith Schneider für die entspannte Arbeitsatmosphäre und für so manche Zerstreuung.
- die Mitarbeiter des Rechenzentrums für die Bereitstellung und Unterhaltung der HPC-Systeme.
- meine Familie für ihre uneingeschränkte Unterstützung.

Erklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich diese Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Erlangen, den 13. 04. 2016

Andreas Wolf