

ESTUDIO DE LAS TÉCNICAS DE RECONSTRUCCIÓN DEL ESPECTRO PRIMARIO DE RAYOS X MEDIANTE EL CÓDIGO DE MONTE CARLO MCNP5

A. Querol¹ ♦, S. Gallardo¹, J. Ródenas¹, G. Verdú¹

¹Universidad Politécnica de Valencia, Departamento de Ingeniería Química y Nuclear, Camino de Vera s/n 46022, Valencia

RESUMEN

La caracterización del espectro primario de rayos X supone una herramienta muy útil para el Control de Calidad (QC) de equipos de radiodiagnóstico. No obstante, presenta dificultades importantes debido a la baja energía de los rayos X en estas aplicaciones, la alta fluencia de fotones y al limitado espacio disponible en las salas de radiodiagnóstico. Estos problemas pueden evitarse o reducirse mediante la utilización de un espectrómetro Compton. El proceso real se ha simulado mediante el programa MCNP5, basado en el método de Monte Carlo. Es necesario por otra parte, aplicar métodos matemáticos de reconstrucción de espectros para obtener el espectro primario del tubo. En este trabajo se analizan los resultados obtenidos con los métodos Modificado Truncado de Descomposición en Valores Singulares (MTSVD), Amortiguado de Descomposición en Valores Singulares (DSVD) y Tikhonov, comparando los resultados obtenidos con espectros teóricos de rayos X y estimando la eficacia de cada método de reconstrucción.

Palabras clave: Monte Carlo, técnicas de reconstrucción de espectros, control de calidad para rayos X.

ABSTRACT

A thorough knowledge of the primary spectrum is very important to perform a quality control (QC) of X-ray tubes, but it is difficult due to: low X-rays energy, high photon fluence and lack of space in the radiodiagnostic room. Using Compton spectrometry these problems can be avoided or reduced. The actual procedure has been simulated with the MCNP5 code based on the Monte Carlo method. On the other hand, it is necessary to apply some unfolding method to obtain the primary X-ray spectrum. In this work, results obtained with Modified Truncated Singular Values Decomposition (MTSVD), Dumped Singular Values Decomposition (DSVD) and Tikhonov methods have been analyzed. These results have been compared with theoretical spectra and the efficiency of each unfolding method has been assessed.

Keywords: Monte Carlo, spectrum unfolding techniques, X-ray quality control.

♦ anquevi@upvnet.upv.es.

1. Introducción

Los métodos de determinación del espectro primario de los equipos de rayos-X representan una herramienta muy útil para el control de calidad (QC) de dichos equipos, pero presentan muchas dificultades debido a la baja energía de los rayos-X (20-150 keV), la alta fluencia de fotones y la falta de espacio en las salas de radiodiagnóstico. En trabajos anteriores [1, 2] se ha presentado una metodología basada en un procedimiento mixto experimental-Monte Carlo (MC), en el que se utiliza el programa MCNP5 [3], para simular el proceso real de adquisición de espectros. Dicho modelo permite obtener la distribución de altura de impulsos (PHD) en el detector para el espectro primario y elaborar una matriz de respuesta del sistema. Dicha matriz de respuesta está mal condicionada, por lo que es necesario aplicar un método de reconstrucción adecuado. El objetivo de este trabajo es estudiar la validez de tres métodos matemáticos de reconstrucción: el método Modificado Truncado de Descomposición en Valores Singulares (MTSVD), el Amortiguado de Descomposición en Valores Singulares (DSVD) y el de Tikhonov, mediante el cálculo del error cuadrático medio (RMS) y de los parámetros de calidad del espectro. Los métodos se han aplicado a distintos espectros primarios, en los que se han modificado los parámetros de operación: voltaje, ángulo del ánodo y espesor de filtrado, obteniendo asimismo el valor mínimo necesario para diferenciar espectros próximos entre sí.

2. Metodología

2.1. Simulación del proceso

El modelo de MCNP5 utilizado para obtener las PHD incluye la fuente de rayos X, un detector y un espectrómetro Compton. Los espectros de rayos X se han extraído del catálogo IPEM-78 [4], variando ciertas condiciones de trabajo como el voltaje, el espesor de filtrado y el ángulo del ánodo. El detector de germanio simulado es un Ultra Low Energy Germanium (LEGe) de Canberra [5]. Dicho detector presenta una alta eficiencia de detección en el intervalo de bajas energías, desde 20 keV hasta 150 keV. Sus principales características son: 0,05 mm de espesor de la ventana de berilio, un área activa de 50 mm² y un espesor de aluminio de 5 mm. La resolución es de 145 eV (FWHM) a 5,9 keV (Fe-55) y 500 eV (FWHM) a 122 keV (Co-57). El espectrómetro Compton está compuesto por las cámaras de blindaje y dispersión, donde se encuentra la varilla dispersora de polimetilmetacrilato (PMMA) y el tubo del espectrómetro. En la varilla que se encuentra en el interior del espectrómetro tienen lugar dispersiones incoherentes Compton y mediante una serie de colimadores se obtiene un haz dispersado a 90° respecto del haz primario del tubo de rayos X. Este último haz, de menor fluencia, alcanza el detector.

Mediante el registro F8 del programa MCNP5, se simulan las PHD registradas en el detector real. Además, se ha utilizado la opción Gaussian Energy Broadening (GEB), la cual proporciona un mejor ajuste a la forma de los picos de la PHD. Los parámetros para la GEB se obtienen a partir de la resolución del detector y el ancho del pico a mitad altura, es decir, Full Width at Half Maximum (FWHM) proporcionados por el fabricante.

También se ha considerado la tarjeta MODE: P, E para simular el transporte de fotones y electrones y las tarjetas PHYS: P y PHYS: E que permiten fijar parámetros físicos como el límite superior de energía para los fotones y electrones así como la producción de electrones o fotones secundarios.

2.2. Obtención de la Matriz de Respuesta

La relación entre la PHD (\bar{m}) registrada en el detector y el espectro primario (\bar{s}) se define mediante la función de respuesta (R), expresada como una matriz

$$R\bar{s} = \bar{m} \quad (1)$$

La matriz de respuesta, se puede obtener utilizando el modelo de simulación de MCNP5 para estudiar la PHD producida por distintos haces primarios monoenergéticos. En este caso se han simulado 212 haces monoenergéticos, desde una energía de 15 keV hasta 120 keV, con una diferencia de 0,5 keV entre ellos. Conocida la matriz de respuesta, R , y la PHD, m , registrada en el detector, la ecuación (1) permite obtener el espectro primario mediante la inversa de la matriz de respuesta.

2.3. Métodos de reconstrucción

Se trata, en primer lugar, de realizar la descomposición en valores singulares (SVD) de la matriz de respuesta. Esta descomposición permite determinar los valores singulares de dicha matriz. La existencia de valores singulares próximos a 0 causa que la matriz esté mal condicionada y que el error producido al calcular su inversa sea muy importante, invalidando los métodos tradicionales de inversión matricial. Sin embargo, se puede elaborar una nueva matriz de respuesta R_k , eliminando de la solución los valores singulares más pequeños [6]. De esta forma se consigue mejorar en gran medida del número de condición de R_k .

En cualquier caso, el problema a resolver es de mínimos cuadrados en el que se intenta encontrar el mínimo de la seminorma del vector solución $\|\bar{s}\|_2$ al mismo tiempo que se minimiza la norma del residuo de dicha solución $\|R_k\bar{s} - \bar{m}\|_2$.

Existen variantes a este método como el método MTSVD [7], en el que la norma-2 $\|\bar{s}\|_2$ se sustituye por la seminorma $\|L_p\bar{s}\|_2$, siendo L_p una aproximación del operador de la derivada de orden p . Por tanto, el problema a resolver es:

$$\min \left\{ \|L_p\bar{s}\|_2 \right\} \text{ sujeto a } \min \left\{ \|R_k\bar{s} - \bar{m}\|_2 \right\} \quad (2)$$

Otra variante es el método DSVD [8], el cual en lugar de utilizar los factores de filtro 0 y 1 como en MTSVD, introduce una reducción más suave, por medio de factores de filtro, f_i , definidos como:

$$f_i = \frac{\sigma_i}{\sigma_i + \lambda} \text{ para } (L=I_n) \quad (3)$$

El último método estudiado es el de Tikhonov [8], el cual se basa en la modificación de la ecuación integral de Fredholm, con el fin de intentar estabilizar su solución. La idea consiste en definir a partir del siguiente funcional:

$$f(s) = \|R_k\bar{s} - \bar{m}\|_2^2 + k^2\|L\bar{s}\|_2^2 \quad (4)$$

la solución regularizada s que minimice la siguiente combinación de la norma residual:

$$s = \arg \min \left\{ \|R_k\bar{s} - \bar{m}\|_2^2 + k\|L\bar{s}\|_2^2 \right\} \quad (5)$$

donde k es el parámetro de regularización, que controla el peso dado a la minimización del residuo de la norma.

La calidad del resultado de los tres métodos depende del parámetro de regularización, k . Una manera de determinar el valor óptimo de dicho parámetro es mediante el criterio de la curva-L [9, 10]. Dicha curva recibe este nombre porque al representar la norma $\|\tilde{\mathbf{x}}_{L,k}\|$ del vector solución frente a la norma-2 del vector residuo $\|\mathbf{R}_k \tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{m}}\|$, se obtiene una línea vertical y otra horizontal, semejante a la letra L. La recomendación de dicho criterio es seleccionar como valor óptimo para el parámetro el correspondiente a la esquina de la curva-L, ya que se minimiza de manera simultánea la norma de la solución y el residuo.

3. Resultados y discusión

La Figura 1 muestra las curvas-L obtenidas para cada uno de los métodos citados de reconstrucción, así como sus respectivos valores para el parámetro de regularización. Para el método MTSVD el valor de k es 113, para el DSVD 0,02 y para el de Tikhonov 0,001.

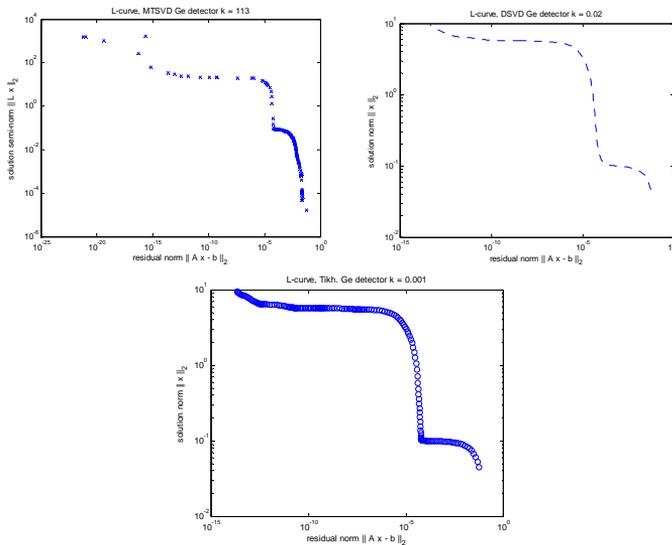


Fig. 1 Curva-L para los métodos de reconstrucción MTSVD, DSVD y Tikhonov.

Los métodos de reconstrucción se han aplicado a distintos espectros primarios, en los que se han modificado los parámetros de operación: voltaje, ángulo del ánodo y espesor de filtrado. En la Tabla 1 aparecen los casos estudiados.

Tabla No.1 Listado de los casos estudiados

	Voltaje	Ángulo del ánodo de tungsteno	Espesor filtrado (mm de aluminio)
Caso 1	78kV	12°	5
Caso 2	98kV	12°	5
Caso 3	102 kV	12°	5
Caso 4	110 kV	12°	5
Caso 5	100 kV	12°	2,5
Caso 6	100 kV	12°	3,5

Caso 7	100 kV	12°	4,5
Caso 8	90 kV	8°	2
Caso 9	90 kV	10°	2
Caso 10	90 kV	12°	2

Las Figuras 2, 3 y 4 muestran los espectros reconstruidos utilizando los métodos MTSVD, DSVD y Tikhonov junto con el espectro teórico correspondiente para algunos de los casos citados en la Tabla 1.

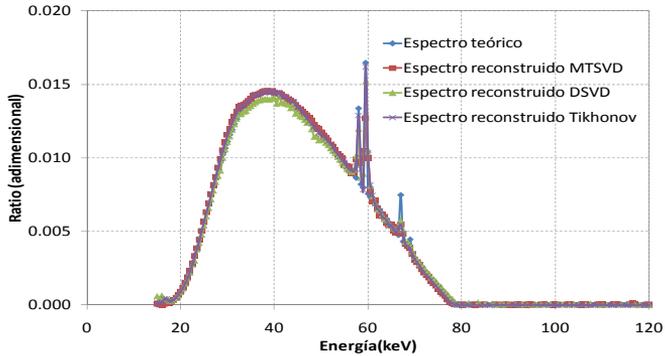


Fig. 2 Comparación de espectros para el Caso 1.

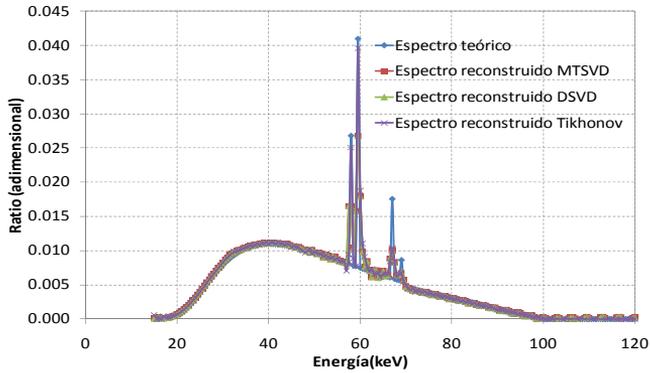


Fig. 3 Comparación de espectros para el Caso 6.

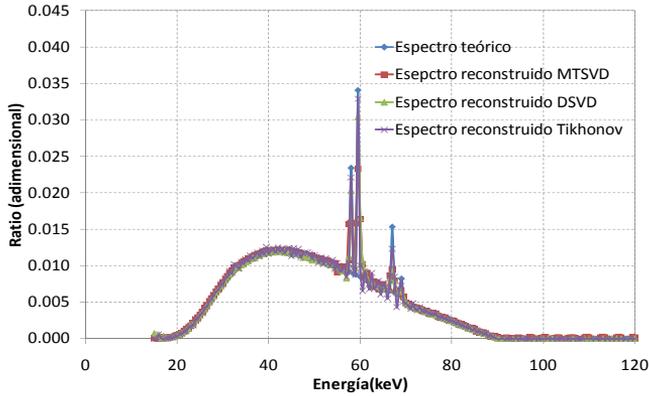


Fig. 4 Comparación de espectros para el Caso 8.

A la vista de las gráficas se observa que los espectros reconstruidos se ajustan bien al espectro teórico. Aunque existen diferencias entre ellos, sobre todo en las líneas características del tungsteno ($K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $K_{\beta 1}$ y $K_{\beta 2}$ a 58, 59,5, 67 y 69 keV respectivamente), ya que los métodos de reconstrucción obtienen unas líneas características por debajo del espectro teórico. Este efecto es más acusado para las líneas K_{β} .

Para cuantificar dichas diferencias, se ha calculado del error cuadrático medio (RMS) entre el espectro reconstruido y el teórico, mediante la ecuación (6). Los valores obtenidos se listan en la Tabla 2.

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum (x_{teórico} - x_{reconstruido})^2}{n}} \cdot 100 \tag{6}$$

$x_{reconstruido_{max}}$

Tabla No.2 Error cuadrático medio (%) para los tres métodos.

Casos	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
MTSVD	4,26	4,26	4,26	4,26	7,35	7,39	7,40	6,91	9,93	6,95
DSVD	6,18	6,18	6,18	6,18	3,47	7,39	7,40	3,63	3,45	3,71
Tikhonov	4,17	4,17	4,17	4,17	3,01	3,30	3,50	3,17	3,20	3,50

Puede observarse que los valores de RMS no superan, en ningún caso, el 10% y que son inferiores cuando se aplica el método de Tikhonov.

Se han calculado los parámetros de calidad del espectro: la primera y segunda capa de hemirreducción (CHR), el factor de homogeneidad y la energía media para todos los casos estudiados. La primera CHR se define como el espesor de aluminio necesario para reducir a la mitad el kerma en aire transmitido [11, 12]. Sus unidades son mm de aluminio y se calcula según la ecuación (7):

$$1/2 = \frac{\sum_i (\mu_{en}/\rho)_{air} N_i h\nu_i \exp(-\mu_{Al} HVL) \exp(-\mu_{Air} d)}{\sum_i (\mu_{en}/\rho)_{air} N_i h\nu_i \exp(-\mu_{Air} d)} \tag{7}$$

donde: $(\mu_{en}/\rho)_{air}$ es el coeficiente lineal de atenuación en aire [13], d es la distancia entre el foco de rayos-X y el detector, $h\nu_i$ es la energía de los fotones en el intervalo i^{th} , N_i es el número de fotones en el intervalo i^{th} de energía y μ_{Al} es el coeficiente lineal de atenuación en aluminio [13].

Cuando se miden distintas CHR, la segunda es mayor que la primera, ya que la energía media del espectro de rayos X se incrementa después de la primera CHR, lo que hace que los rayos X tengan más poder de penetración. El factor de homogeneidad se define como el cociente entre la primera y la segunda CHR para cada voltaje. La energía media del espectro representa la calidad energética del mismo y se calcula según la ecuación (8):

$$\overline{h\nu} = \frac{\sum_i N_i h\nu_i}{\sum_i N_i} \quad (8)$$

En la Tabla 3 se listan los valores obtenidos para estos cuatro parámetros de calidad utilizando los tres métodos de reconstrucción considerados en cada uno de los diez casos propuestos. Los errores relativos que se obtienen de comparar los valores obtenidos para los espectros reconstruidos y los de los respectivos espectros teóricos aparecen entre paréntesis.

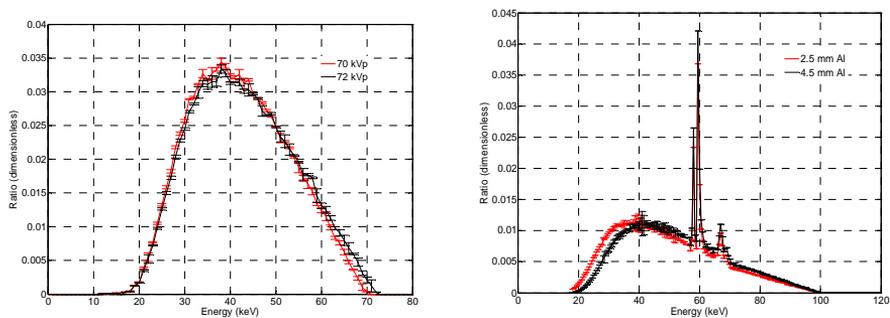
Tabla No.3 Primera y segunda CHR, factor de homogeneidad (FH) y energía media (EM) del espectro.

Casos		IPEM78	MTSVD	DSVD	TIKHONOV
1	1ª CHR	3,4000	3,3900 (0,29)	3,2100 (5,59)	3,2100 (5,59)
	2ª CHR	8,0300	8,0100 (0,25)	7,7300 (3,74)	7,7800 (3,11)
	FH	0,4234	0,4232 (0,05)	0,4153 (1,92)	0,4087 (3,47)
	EM	45,010	45,020 (-0,02)	45,330 (-0,71)	44,460 (1,22)
2	1ª CHR	4,3500	4,2900 (1,38)	4,0900 (5,98)	4,0900(5,98)
	2ª CHR	10,450	10,330 (1,15)	10,110 (3,25)	10,120 (3,16)
	FH	0,4163	0,4153 (0,23)	0,4045 (2,82)	0,4042 (2,91)
	EM	51,740	51,800 (-0,12)	51,430 (0,60)	52,540 (-1,55)
3	1ª CHR	4,5300	4,4700 (1,32)	4,2700 (5,74)	4,3200 (4,64)
	2ª CHR	10,910	10,780 (1,19)	10,560 (3,21)	10,600 (2,84)
	FH	0,4152	0,4147 (0,13)	0,4044 (2,62)	0,4075 (1,85)
	EM	52,920	52,970 (-0,09)	52,620 (0,57)	53,770 (-1,61)
4	1ª CHR	5,4100	5,320 (1,66)	5,0000 (7,58)	5,0100 (7,39)
	2ª CHR	12,750	12,540 (1,65)	12,130 (4,86)	12,150 (4,71)
	FH	0,4243	0,4242 (0,02)	0,4122 (2,85)	0,4123 (2,82)
	EM	56,400	56,450 (-0,09)	56,220 (0,32)	57,560 (-2,06)
5	1ª CHR	3,5600	3,5400 (0,56)	3,4200 (3,93)	3,4300 (3,65)
	2ª CHR	8,9600	8,8900 (0,78)	8,7500 (2,34)	8,7700 (2,12)
	FH	0,3973	0,3982 (-0,22)	0,3909 (1,63)	0,3911 (1,56)
	EM	49,970	50,070 (-0,20)	49,610 (0,72)	50,690 (-1,44)
6	1ª CHR	4,1600	4,120 (0,96)	4,1200 (0,96)	3,9400 (5,29)
	2ª CHR	10,160	10,050 (1,08)	10,040 (1,18)	9,8500 (3,05)
	FH	0,4094	0,4100 (-0,12)	0,4104 (-0,22)	0,4000 (2,31)
	EM	51,630	51,650 (-0,04)	51,650 (-0,04)	52,290 (-1,28)
7	1ª CHR	4,6900	4,6300 (1,28)	4,6300 (1,28)	4,4200 (5,76)
	2ª CHR	11,160	11,020 (1,25)	11,040 (1,08)	10,790 (3,32)
	FH	0,4203	0,4201 (0,03)	0,4194 (0,21)	0,4096 (2,53)
	EM	52,990	53,001 (-0,04)	53,010 (-0,04)	53,760 (-1,45)
8	1ª CHR	4,3200	4,2800 (0,93)	4,0500 (6,25)	4,0200 (6,94)
	2ª CHR	10,260	10,140 (1,17)	9,8500 (4,00)	9,8400 (4,09)

	FH	0,4211	0,4221 (-0,25)	0,4112 (2,35)	0,4085 (2,97)
	EM	50,360	50,500 (-0,28)	49,930 (0,85)	50,910 (-1,09)
9	1ª CHR	4,1200	4,0800 (0,97)	3,8800 (5,83)	3,8800 (5,83)
	2ª CHR	9,8200	9,7500 (0,71)	9,4700 (3,56)	9,4800 (3,46)
	FH	0,4196	0,4185 (0,26)	0,4097 (2,34)	0,4093 (2,45)
	EM	49,720	49,770 (-0,10)	49,950 (-0,46)	50,290 (-1,13)
10	1ª CHR	3,9700	3,9300 (1,01)	3,7100 (6,55)	3,7200 (6,30)
	2ª CHR	9,5300	9,4400 (0,94)	9,1500 (3,99)	9,1700 (3,78)
	FH	0,4166	0,4163 (0,06)	0,4055 (2,67)	0,4057 (2,62)
	EM	49,240	49,260 (-0,04)	48,820 (0,85)	49,780 (-1,10)

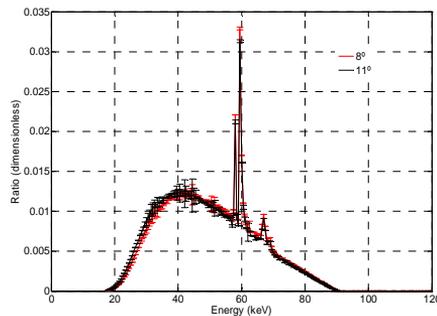
Los errores relativos para los parámetros de calidad calculados son siempre inferiores al 8%. Por último, se ha analizado la resolución de los tres métodos para las variables de operación consideradas: voltaje, espesor de aluminio y ángulo del ánodo. Se trata de determinar la mínima variación de estos parámetros que permite distinguir entre los distintos espectros. Para ello, se calcula el error relativo de los espectros reconstruidos respecto al teórico extraído del IPEM 78, utilizando la siguiente ecuación:

$$\text{Error relativo} = \frac{\text{Espectro teórico IPEM78} - \text{Espectro reconstruido}}{\text{Espectro teórico IPEM78}} \cdot 100 \quad (9)$$



a) voltaje

b) espesor de filtrado



c) ángulo del ánodo

Fig. 5 Representación error (2σ) para espectros reconstruidos.

Una ligera variación del voltaje produce pequeñas modificaciones en la zona de alta energía del espectro, mientras que la variación del espesor de filtrado o del ángulo del ánodo tiene su efecto en la zona de bajas energías. Por eso, los métodos de reconstrucción deben ser capaces de diferenciar entre espectros próximos en dichas zonas del espectro. En la Figura 5 se representan los espectros reconstruidos junto con las barras de error 2σ para los valores de 70 y 72 kV en la Figura 5a, 2,5 y 4,5 mm de aluminio en la 5b y ángulos de ánodo de 8° y 11° en la 5c. De este análisis se obtiene que se requieren diferencias mínimas de 2 kV en el voltaje, 2 mm de espesor de aluminio y 3° en el ángulo del ánodo para que los espectros reconstruidos puedan distinguirse entre sí.

4. Conclusiones

Los resultados obtenidos muestran un valor de RMS por debajo del 10% en todos los espectros estudiados. El método de Tikonov es el que mejor aproxima el espectro reconstruido al teórico ya que presenta un menor valor para el RMS. Para el cálculo de los parámetros de calidad se ha obtenido el error relativo respecto al espectro teórico, siendo en todos los casos inferior al 8%. Se ha estudiado también la influencia sobre los métodos de reconstrucción de las variables de operación: voltaje, espesor de filtrado y ángulo del ánodo. Para distinguir dos espectros muy próximos es necesaria una diferencia mínima de 2 kV para el voltaje, 2 mm para el espesor de filtrado y 3° para el ángulo del ánodo.

REFERENCIAS

- [1] S. Gallardo, J. Ródenas, G. Verdú, Monte Carlo simulation of the Compton scattering technique applied to characterise diagnostic X-ray spectra, *Med Phys* 2004, 31(7), 2082–2090.
- [2] S. Gallardo, D. Ginestar, G. Verdú, J. Ródenas, V. Puchades and J. I. Villaescusa, X-ray spectrum unfolding using a regularized truncated SVD method, *X-ray spectrometry* 2006, 35, 63–70.
- [3] X-5 Monte Carlo Team, 2005. MCNP—A general Monte Carlo N-Particle transport code, version 5, Los Alamos National Laboratory, 2003 (revised 10/03/2005).
- [4] IPEM Report 78, Catalogue of Diagnostic X-Ray Spectra & Other Data, Institute of Physics and Engineering in Medicine.
- [5] www.canberra.com
- [6] G. H. Golub, C.F. Van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press. Third edition, 1996.
- [7] P.C. Hansen, T. Sekii, H. Shibabhashi. The modified truncated SVD method for regularization in general form, *SIAM J. Sci. Comput.* 1992, 13, 1142-1150.
- [8] P.C. Hansen, Regularization tools Version 3.0 for Matlab 5.2, *Numer. Algorithms* 1999, 20, 195–196.
- [9] P. C. Hansen, Regularization Tools: A Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems, *Numerical Algorithms* 1994, 6, 1-35.
- [10] P.C. Hansen, *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, SIAM, Philadelphia. 1998.
- [11] W. Abdel-Rahman, E. B. Podgorsak, Energy transfer and energy absorption in photon interactions with matter revisited: A step-by-step illustrated approach, *Radiat. Phys. Chem.* 2010, 79[5], 552-566.
- [12] E. Mainegra-Hing and I. Kawrakow, Efficient x-ray tube simulations, *Med. Phys.* 2006, 33[8], 2683-2690.
- [13] X-Ray Attenuation and Absorption for Materials of Dosimetric Interest. National Institute of Standards and Technology, NIST.