

Aplicación del Método de Monte Carlo en el Análisis de Materiales

Utilizados en Detectores Flat Panel para Obtener Espectros de Rayos X.

Sergio Gallardo, Fausto Pozuelo, Andrea Querol, José Ródenas, Gumersindo Verdú
Departamento de Ingeniería Química y Nuclear, Universitat Politècnica de València
sergalbe@iqn.upv.es; faupona@etsii.upv.es; anquevi@upvnet.upv.es;
jrodenas@iqn.upv.es gverdu@iqn.upv.es

Resumen – En este trabajo se propone el uso de un detector flat panel junto a una cuña de polimetilmetacrilato (PMMA) para estimar el espectro de rayos X utilizando el método de Monte Carlo y técnicas de reconstrucción. El código MCNP5 se ha utilizado para modelar distintos flat panel y obtener las curvas de dosis y las funciones respuesta del sistema. La mayor parte de los flat panel actuales utilizan materiales que presentan discontinuidades debidas al borde K en el coeficiente másico de absorción de energía lo que influye en la matriz de respuesta y, por tanto, en los espectros reconstruidos. Distintos métodos de reconstrucción se han utilizado para obtener el espectro de rayos X conociendo la curva de dosis y la función respuesta. Los resultados demuestran que el método truncado modificado de descomposición de valores singulares (MTSVD) es apropiado para reconstruir los espectros de rayos X con los materiales centelleadores estudiados en el presente trabajo.

1. INTRODUCCIÓN

Obtener el espectro primario de rayos X presenta dificultades importantes debido a la alta fluencia de fotones y a la baja energía de las partículas emitidas por el tubo. Sin embargo, puede ser estimado utilizando un detector de flat panel y un material atenuante. El funcionamiento del flat panel se basa en la transformación de los rayos X absorbidos en transportadores de carga por medio de métodos directos o indirectos en función del material empleado. En los equipos directos se emplea Selenio amorfo (a:Se) para transformar directamente la fluencia de fotones en corriente, mientras que en los equipos indirectos un material centelleador absorbe los rayos X convirtiéndolos en fotones de luz visible que pasan a una matriz de fotodiodos. Una lámina de material semiconductor, normalmente Silicio, convierte los fotones de luz visible en transportadores de carga. Normalmente, es preferible el silicio amorfo para conseguir una mayor eficiencia en la detección (DQE). Los rayos X inciden en primer lugar sobre el centelleador, normalmente compuesto de oxisulfuro de gadolinio (GOS). El poder de frenado, velocidad y luminosidad son las principales características a tener en cuenta en un buen centelleador. El poder de frenado se mejora conforme aumenta la densidad y el número atómico. Por eso, altos valores de densidad y poder de frenado permiten reducir la cantidad necesaria de material centelleador [1]. Otros materiales que están siendo investigados para su uso como centelleadores por su elevado poder de frenado son el Telurio de Cadmio (CdTe) y el Yoduro de Mercurio (HgI₂) [2]. Teniendo en cuenta estas consideraciones se han analizado distintos detectores flat panel con distintos materiales centelleadores.

Como resultado de la irradiación del flat panel se obtiene una imagen en escala de grises de la que se obtiene una curva de dosis utilizando el código de Monte Carlo MCNP5 [3]. Con el modelo de MCNP5 se puede analizar el comportamiento de los diferentes materiales centelleadores y determinar su función respuesta tras simular diversos rayos X monocromáticos y calculando sus respectivas curvas de dosis. Conocida la función respuesta del sistema y la curva de dosis se puede reconstruir el espectro de rayos X, sin

embargo las matrices de respuesta están mal condicionadas y requieren de métodos de regularización, la mayoría basados en la descomposición en valores singulares (SVD) [4]: método truncado de descomposición en valores singulares (TSVD), el método modificado truncado de descomposición de valores singulares (MTSVD) [5], el método amortiguado de descomposición de valores singulares (DSVD) [5], y el método Tikhonov [6]. Los resultados obtenidos se han comparado con las curvas de dosis obtenidas para distintos espectros de rayos X extraídos del catálogo de espectros IPEM 78 [7].

2. MODELO MCNP5

El modelo de MCNP5, mostrado en la Figura 1, incluye una fuente de rayos X (IPEM 78), un detector flat panel, y una cuña de PMMA situada entre la fuente y el detector. Se han desarrollado diferentes modelos en los que se ha variado el material centelleador del flat panel a:Se y CdTe. En la Figura 1, también se muestra el esquema de todos los materiales que forman parte de un flat panel genérico.

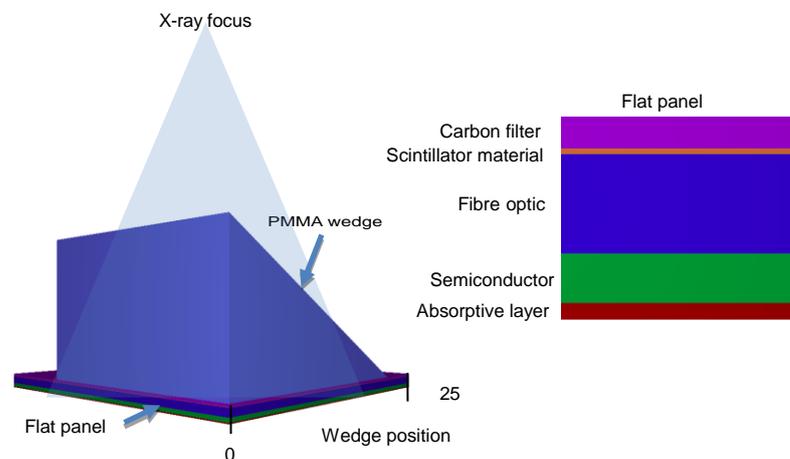


Figura 1. Geometría del modelo. Materiales del flat panel

En el flat panel se registra el gradiente de la dosis absorbida debido a la atenuación sufrida por los rayos X en la cuña de PMMA. Dicho gradiente de dosis se relaciona directamente con el espectro de rayos X mediante una función respuesta, la cual puede ser aproximada a una matriz y obtenida con el modelo de MCNP5 descrito. Para obtener la dosis absorbida, se utiliza el registro F4MESH de MCNP5 que mide la fluencia de fotones en la capa de centelleador. Se han considerado 25 posiciones distintas a lo largo del eje X. Dicha fluencia se convierte en dosis absorbida utilizando el coeficiente másico de absorción (μ_{en}/ρ) que se obtiene del *National Institute of Standards and Technology* (NIST) [2]. La Figura 2 muestra los coeficientes másicos de absorción para el CdTe y el a:Se. Como se puede ver, el CdTe presenta un borde K a 26,7 y 31,8 keV, mientras que el a:Se no presenta ninguna discontinuidad en el intervalo de energías estudiado (entre 5 y 120 keV). Los espesores que se han considerado en el modelo de MCNP5 para cada material en sus respectivos modelos de MCNP5 son: 0,2 mm para el CdTe [8] y 1 mm para el a:Se [9].

En la Figura 3 se muestran las curvas de dosis absorbida en μGy por fotón emitido, que se obtienen para cada material variando el voltaje (60, 70, 80, 90 and 100 kVp). Como se puede observar, en el caso del CdTe hay algunas bandas de energía donde las curvas de dosis están separadas y otras bandas de energía donde las curvas de dosis se solapan. Además, en el caso del CdTe se puede ver como la dosis absorbida que se

obtiene para el espectro de 100 kVp es inferior de la que se obtiene a 90 kVp. Este hecho supone un gran inconveniente a la hora de reconstruir el espectro primario de rayos X a partir de la curva de dosis absorbida como se observa en el apartado de resultados del presente trabajo. Al representar las curvas de dosis absorbida que se obtienen para cada voltaje variando el material centelleador, se obtiene que el CdTe presenta una mayor eficiencia de absorción.

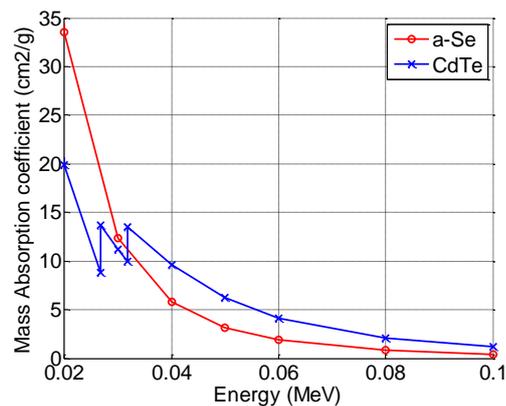


Figura 2: Coeficientes máscicos de absorción CdTe y a:Se.

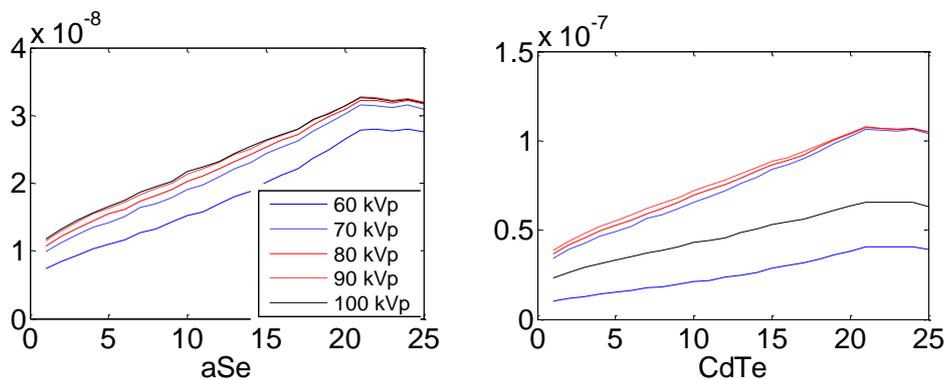


Figura 3: Curvas de dosis absorbida para cada material y cada voltaje.

El modelo de MCNP5 se ha utilizado para determinar las distintas matrices de respuesta del sistema, una para cada material. Para ello se han simulado diferentes haces monocromáticos y se han obtenido sus respectivas curvas de dosis absorbida. En la Figura 4, donde se muestran las matrices de respuesta obtenidas para cada centelleador, se observa el efecto de la eficiencia en la dosis absorbida cuando varía la energía de los rayos X. El borde K del CdTe hace que la relación entre la dosis absorbida y el haz de energía no sea lineal, lo que afecta a la función respuesta del sistema y, por tanto, a la reconstrucción del espectro. Tanto el borde K como la variación de la eficiencia afectan en la reconstrucción del espectro como se puede ver en la sección de resultados del presente trabajo.

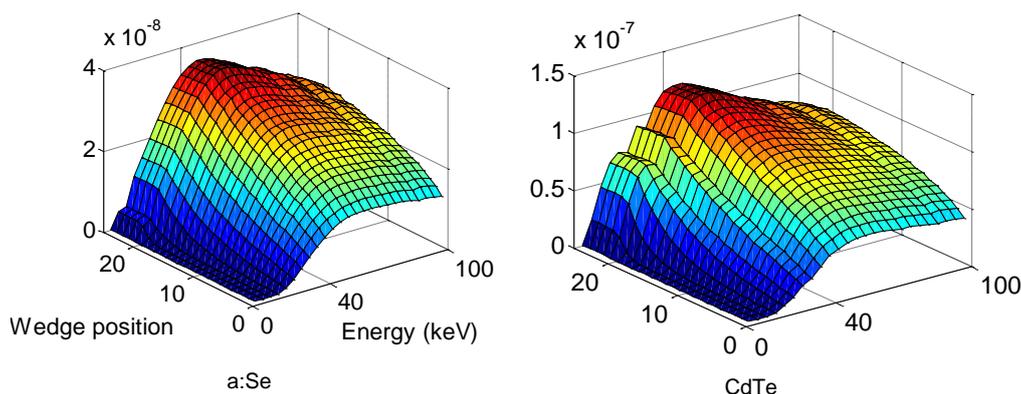


Figura 4: Matrices respuesta.

3. MÉTODOS DE RECONSTRUCCIÓN

La relación entre la curva de dosis (m) y el espectro primario (s) está definida por la matriz respuesta (R) según la ecuación: $Rs=m$. La matriz respuesta del sistema R se puede obtener a partir de las curvas de dosis obtenidas tras la simulación de varios haces monoenergéticos. Esta metodología se ha repetido para los distintos materiales considerados: a-Se y CdTe. Una vez conocida R , se puede obtener el espectro primario s . Sin embargo, como la determinación de la matriz R está afectada por algunos errores, se elige una aproximación s' la cual minimiza la norma segunda del vector residuo $\|Rs'-m\|_2$. Además, se ha comprobado que las dos matrices R están mal condicionadas ya que los valores singulares de ambas tienden a cero rápidamente, como se puede ver en la Figura 5. Otro hecho que prueba que ambas matrices están mal condicionadas es que las matrices tienen un número de condición muy grande ($3,52 \cdot 10^5$ para el a-Se y $3,32 \cdot 10^5$ para el CdTe).

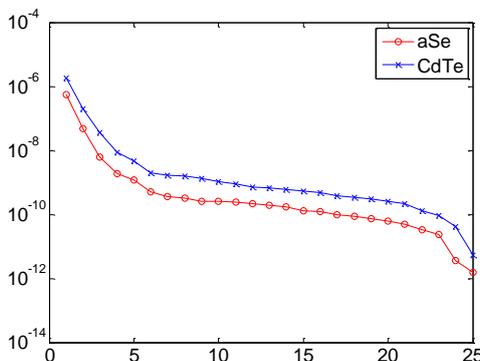


Figura 5: Valores singulares.

Debido a que las matrices R son de intervalo deficiente, existe un gran número de soluciones al problema de mínimos cuadrados $\|Rs'-m\|_2$. Obtener una solución óptima a dicho problema, es posible generando una nueva matriz de respuesta R_k , eliminando de la solución la parte correspondiente a los valores singulares más pequeños [4], siendo k el número de valores singulares de R que se van a considerar. Con esta nueva matriz R_k , el método de truncado de descomposición en valores singulares (TSVD) permite obtener el valor de la solución s' que minimiza $\|R_k s'-m\|_2$ y tiene la menor norma segunda de todas las soluciones posibles.

centelleador. En todos los casos se obtiene una solución suavizada debido al uso del operador derivativo L2. Como se puede ver el espectro reconstruido utilizando el método MTSVD ($k=3$) se ajusta al espectro teórico en todo el intervalo de energías considerado. Las discrepancias más importantes se encuentran en el intervalo de energía definido entre 40 y 70 kVp, donde la reconstrucción sobreestima el espectro teórico. Respecto al método de Tikhonov ($\lambda = 8,50e-08$) se obtienen espectros suavizados en todos los casos, sin embargo, el *Bremsstrahlung* continuo está desplazado alrededor de unos 10 keV hacia el intervalo de bajas energías.

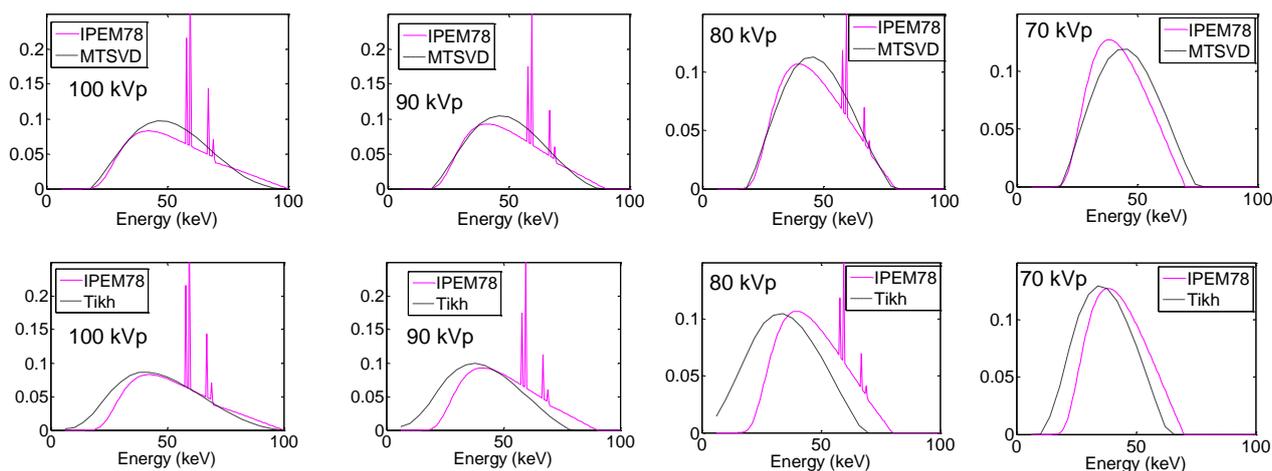


Figure 6: Espectros reconstruidos a:Se. MTSVD and Tikhonov

Cuando no se utiliza el operador L2, los espectros reconstruidos muestran importantes fluctuaciones y distorsiones, como se puede ver en la Figura 7, donde se muestran los resultados obtenidos tras aplicar los métodos TSVD, DSVD y Tikhonov ($L=1$). Las reconstrucciones obtenidas con el método TSVD muestran ligeras oscilaciones en todo el intervalo de energías, las cuales son más acusadas conforme disminuye el voltaje. Como se puede ver, el espectro reconstruido para 100 kVp es el que más se aproxima al espectro teórico. Por otro lado, el método DSVD no proporciona resultados aceptables en ningún caso considerado.

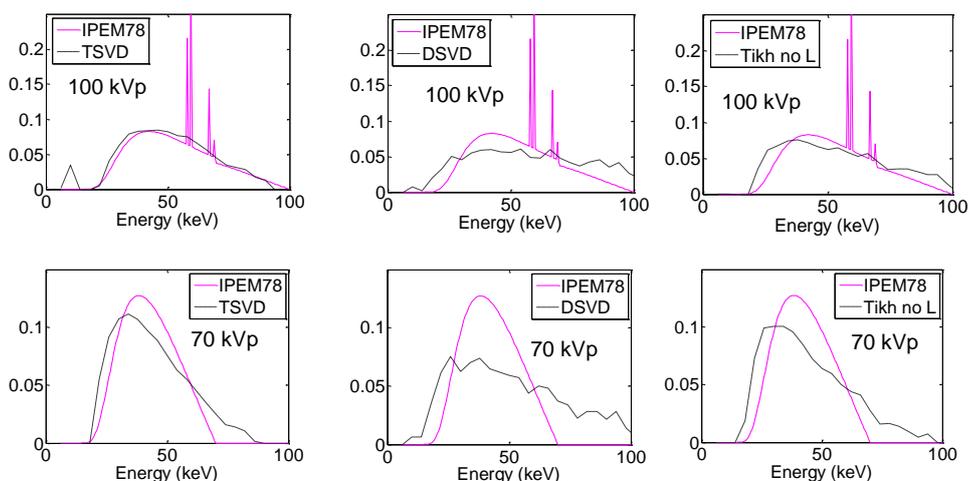


Figure 7: Espectros reconstruidos a:Se. TSVD, DSVD and Tikhonov ($L=1$)

A la vista de los resultados hay que destacar que ningún método es capaz de reproducir las líneas características. También se puede decir que cuando se utilizan los

métodos TSVD, DSVD y Tikhonov ($L=1$) aparecen importantes oscilaciones y ruido en los espectros reconstruidos, los cuales además están desplazados hacia el intervalo de altas energías. En la Figura 8 se muestran los espectros reconstruidos para el CdTe. Como se puede observar, se mantienen las mismas tendencias que en el caso del a:Se, siendo necesario la utilización del operador derivativo L2 para obtener una mejor reconstrucción de los espectros.

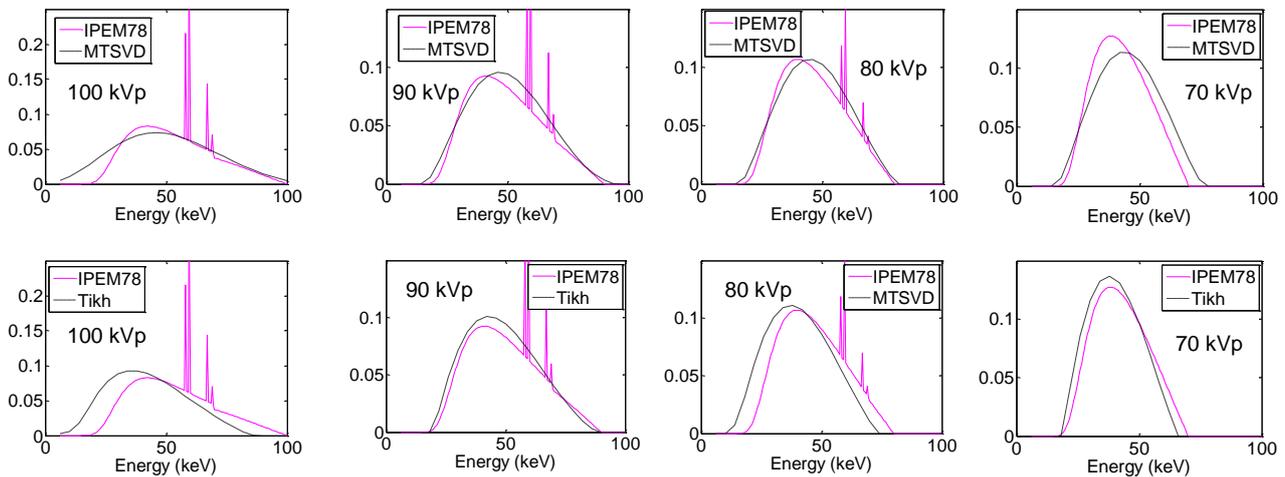


Figure 8: Espectros reconstruidos CdTe. MTSVD and Tikhonov

El uso de la matriz de CdTe presenta un importante inconveniente que se debe a su mal comportamiento en la reconstrucción de espectros para voltajes superiores a 90 kVp. Esto se observa en la Figura 8, donde se puede ver que las peores reconstrucciones se obtienen para 100 kVp, independientemente del método de reconstrucción utilizado. Esto puede ser debido a la reducción de su eficiencia de detección para energías mayores de 90 kVp

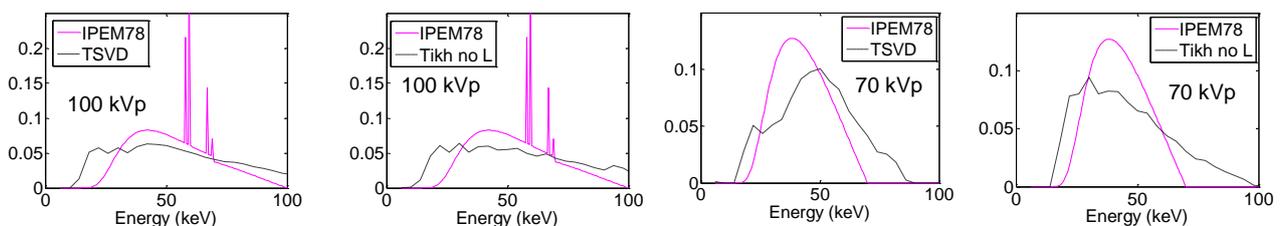


Figure 9: Espectros reconstruidos CdTe. TSVD and Tikhonov ($L=1$)

4. CONCLUSIONES

Se ha comprobado la aplicabilidad del sistema formado por una cuña de PMMA, usada como material atenuante, y un detector tipo flat panel para la reconstrucción de espectros de rayos X. La reconstrucción se ha realizado mediante el uso de un modelo de dicho sistema desarrollado con el código MCNP5 para dos flat panel comerciales: uno de método directo con a:Se y otro de método indirecto con CdTe como centelleador.

Las matrices respuesta del sistema (cuña PMMA-flat panel) obtenidas mediante simulación con MCNP5 están mal condicionadas (sus valores singulares tienden a cero y su número de condición es alto) por lo que es necesario aplicar métodos matemáticos de reconstrucción, como TSVD, MTSVD, DSVD y Tikhonov, para la reconstrucción de espectros de rayos X. En el caso de la matriz de CdTe, además se ha observado el efecto del borde K presente en el coeficiente de absorción másico dentro del intervalo de energía

de radiodiagnóstico estudiado. Así como, el efecto de la eficiencia de absorción en función de la energía, por el cual no se obtiene una buena reconstrucción de espectros para voltajes superiores a 90 kVp.

Tras aplicar los diferentes métodos de reconstrucción se puede decir que los métodos de reconstrucción MTSVD y Tikhonov son capaces de reconstruir mejor el espectro de rayos X gracias a la utilización del operador de la derivada (L) para suavizar la solución. Sin embargo, cuando se utilizan los métodos de reconstrucción TSVD, DSVD y Tikhonov, sin operador de la derivada o igual a la matriz identidad ($L=I$) en el caso de Tikhonov, los espectros reconstruidos difieren de los espectros teóricos. Por último, decir que ningún método de reconstrucción es capaz de reproducir las líneas características. Y que el método MTSVD es el más recomendable para la reconstrucción de espectros, independientemente del material centelleador.

AGRADECIMIENTOS

A la beca de Formación de Profesorado Universitario (FPU) del Ministerio de Educación y Ciencia, referencia AP2009-2600.

REFERENCIAS

1. S. E. Derenzo, M. J. Weber, E. Bourret-Courchesne, M. K. Klintenberg, "The quest for the ideal inorganic scintillator", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 505, 111-117, (2003).
2. J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, *Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients from 1 keV to 20 MeV for Elements Z = 1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest*, National Institute of Standards and Technology. www.nist.gov.
3. X-5 MONTE CARLO TEAM, "MCNP – A General Monte Carlo N particle Transport Code, Version 5 LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory, (2003).
4. G. H. Golub, C.F. Van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press. Third edition, 1996.
5. P.C. Hansen, T. Sekii, H. Shibabhashi, "The modified truncated SVD method for regularization in general form", *SIAM J. Sci. Comput.*, 13, 1142-1150 (1992).
6. P.C. Hansen, "Regularization tools Version 3.0 for Matlab 5.2", *Numer. Algorithms*, 20, 195–196, (1999).
7. IPEM Report 78, *Catalogue of Diagnostic X-Ray Spectra & Other Data*, Institute of Physics and Engineering in Medicine.
8. J.S. Iwaczyk, B.E. Patt, C.R. Tull, L.R. MacDonald, N. Skinner, E.J. Hoffman, L. Fornaro, L. Mussio, E. Saucedo, A. Gancharov, *Mercuric Iodide Polycrystalline Films, Penetrating Radiation Systems and Applications III*, 4508, 28-40, (2001).
9. Y. Izumi, O. Teranuma, T. Sato, K. Uehara, H. Okada, S. Tokuda, T. Sato, *Development of Flat-Panel X-ray Image Sensors*, (2001).
10. P.C. Hansen, *Numerical Algorithms*, 6, 1-35, (1994).
11. P.C. Hansen, *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, SIAM, Philadelphia, (1998).