文章编号: 0253-2239(2008)08-1492-04

X 射线衍射增强成像中的定量测量

刘 $力^1$ 朱佩平¹ 舒 航¹ 张 凯^{1,2}

(1中国科学院高能物理研究所,北京 100049; 2郑州大学物理系,河南 郑州 450052)

摘要 提出了一种基于 X 射线衍射增强成像(DEI)断层计算机 X 射线层析术(CT)图像的物体尺寸精确测量方法。 X 射线衍射增强成像是一种基于相位衬度的成像技术。通过建立 DEI 的简化模型,研究衍射成像过程中晶体转 角、投影图像谷点位置、成像系统等效模糊等因素之间关系,由此具体探讨了系统模糊效应对圆物体边界成像带来 的位置偏移,并以圆形被测样品为例,提出可精确测定直径的简单有效算法。通过理论仿真模型数据和北京同步 辐射装置上的实测数据验证了该算法的精度。该方法实现了利用 DEI 图像对被测物体几何尺寸的精确测量,可用 于对生物组织样品等物体内部微小结构的尺寸的精确测量。

关键词 X射线光学;同步辐射;衍射增强成像;消光衬度;模糊函数

中图分类号 O434 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20082808.1492

Quantitative Measurement in X-Ray Diffraction Enhanced Imaging

Liu Li¹ Zhu Peiping¹ Shu Hang¹ Zhang Kai^{1,2}

(¹Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China ²Department of Physics, Zhengzhou University, Zhengzhou, Henan 450052, China

Abstract A method for accurate measurement of the size of objects from X-ray diffraction enhanced imaging (DEI) and computer tomography was proposed. X-ray DEI is an imaging method based on phase contrast. A simple model of DEI was set up, by which the relationships among crystal angle, valley positions in image, and system blurring were studied. The deviation of projection valley points caused by the blurring effect was discussed, and a new method to measure diameter of a round sample from projective DEI profile was proposed. DEI data from both simulation and Beijing Synchrotron Radiation Faculty ware processed to demonstrate the validity and accuracy of the method. This method presents an accurate measurement method of the size for objects, especially for the inner structure of small biological tissues or samples.

Key words X-ray optics; synchrotron radiation; diffraction enhanced imaging (DEI); extinction contrast; blurring function

1 引 言

衍射增强成像(Diffraction enhanced imaging, DEI)是一种基于分析晶体的 X 光成像方法,即通常 所说的折射衬度成像方法^[1~3],利用分析晶体的角 度选择性,对折射角信号(或者相位梯度信号)进行 增强或抑制。这种成像方法特别适合观察由轻元素 构成的样品,有着广泛的应用前景。

根据分析晶体摆放角度,DEI可有多种成像模式,如峰位成像、腰位成像、趾位成像等^[1~3]。在峰位成像形成的样品投影 CCD 图像中,物体边界处有

比通常吸收图像更强的衬度变化,即强烈的灰度(光 强度)的降低,形成明显的"谷底",可以通过在 DEI 图像上测量圆形物体图像的两边"谷底"之间距离来 计算该样品的直径^[4]。因为在通常实验中可以认为 X 光是走直线的^[5,6]。然而在实际测量计算中发现, 由此计算得到的直径值明显小于真实值,且无法用 微小的折射位移来解释这一偏差。本文通过建立 DEI 成像的简化模型,从理论上的模拟计算对这种 偏差进行了分析与解释,即成像系统的空间模糊 (blurring)效应可明显导致图像"谷底"位置的漂移。

基金项目:国家自然科学基金(10490194,10490194,10774144)资助课题。

收稿日期: 2007-11-01; 收到修改稿日期: 2008-02-20

作者简介:刘 力(1962一),男,副研究员,博士,主要从事 X 射线成像方面的研究。E-mail:liuli@ihep.ac.cn

以圆形被测样品为例,提出了克服该误差的可精确 测定直径的简单有效算法。对北京同步辐射装置 (BSRF)上的 DEI 实测数据进行处理与分析,验证 了该算法的正确性。

2 简化模型与模拟计算

为简化问题,取垂直放置的一个圆柱形样品的 DEI 投影图像中的一行,即物体一个横断层的投影 线来研究。对于计算机 X 射线层析术(CT)旋转轴 与分析晶体晶格面平行的 DEI 系统的工作原理与 参量取值,可参见文献[1~3]。对实验(能量为 10KeV)测得的双晶体摇摆曲线可很好地用如下形 式的高斯(Gauss)拟合^[3,4]来表示:

$$R(\theta) = 0.13 + 0.87 \exp\left[-\frac{(\theta - \theta_0)^2}{21.663}\right], \quad (1)$$

其中 θ 为折射角, R为反射率, 对应的半峰全宽为 7.75"(1"=4.484 μ rad), θ_0 为双晶体夹角, 对峰位 DEI 应该有 θ_0 =0, 但实际上双晶体调节时存在误 差, 于是一般 $\theta_0 \neq 0$ 。取(1)式计算反射率。

需要模拟的实验样品为一个尼龙棒,半径为 r=1.5 mm, 折射率由文献[4]给出的公式计算,即 $<math>n=2.6315 \times 10^{-6}$ 。根据实验的峰位 DEI 图像中点值 算出^[4]圆物体的线性衰减系数为 $\mu=0.258 \text{ mm}^{-1}$,该 数值是介于水与有机玻璃的线性衰减系数之间,与 (1)式一样,该计算值包含了散射的贡献^[7]。模拟 DEI 实验的简化工作示意图见图 1,其中两边的折射 线的折射角被夸大了。该样品的吸收投影曲线 I(x)的理论计算值为图 2 所示(最大值归一)。

由公式 $\theta(x) = 2n \frac{x}{\sqrt{r^2 - x^2}}$ 可计算出折射角在

探测器线阵(x 轴)上的分布^[4],见图 3。计算时采用 了离散方法,计算单元取为一个探测器像元长度 (pixel),1 pixel=10.9 μ m。









图 3 折射角在 *x* 轴上的分布 Fig. 3 Reraction angle distribution



图 5 总强度投影分布曲线 Fig. 5 Projection of absorption and extinction 由 DEI 的摇摆曲线对角度 θ 的选择作用(1)式, 可从理论上计算出峰位成像($\theta_0 = 0$)的消光衬度及 总的强度投影分布曲线 $IR(x) = I(x) \cdot R[\theta(x)]$ 如 图 4、图 5 所示,其中二个谷底位置就是该圆物体边 界位置。

3 圆物体直径的测量方法

求圆物体半径最简单的方法是在投影曲线上测 出二个谷点位置 $x_1, x_2,$ 如此求得半径为 $(x_2 - x_1)/2$ 。 但对实际成像过程,总存在各种模糊(Blurring)效 应,比如光斑大小、探测器单元之间串扰等,所模拟 的真实的投影曲线 IR' 应该为理论投影 IR 与一个 模糊函数(点扩展函数)卷积后的结果。不失一般 性,取如下一个半峰全宽为 3 pixel 的 Gauss 平滑函 数为例: $G(x) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{3.246}\right)$,对其进行归一化,与 IR卷积得模糊后的光强分布 $IR'(x) = IR(x) \otimes$ G(x)。由结果图 6 可见,与模糊前 IR(点线)相比, IR'(连线)的谷底位置发生了改变,这说明系统的空 间模糊效应可导致 DEI 投影图像中的"谷底"位置 偏离物体的真正边缘位置。这也是 DEI 成像中的 "区域衬度(Area contrast)"的特点^[8]所致,若仍以 二个谷底位置差来计算 r,则必导致一定的偏差。

在二个谷底外侧求"当地半高"位置 x₁,x₂,然后 由此计算半径 r=(x₂-x₁)/2。所谓"当地半高"位置 就是物体边缘外(本例为空气)的光强与该谷底光强 之和的一半所对应的 x 位置。在图像处理领域,人们 大量地使用类似的"半高宽"的方法从图像中确定物 体边界点。半高点位置非常接近甚至等于光强梯度 为最大的位置,该位置受模糊效应的影响较小。



图 6 右谷底处模糊前(点)后(线)对比 Fig. 6 Comparison before (dot line)/after (solid line) blurring

4 实测数据的计算与分析

取尼龙棒的峰位 DEI 实测图像的一行,见图 7 中的点线。实线为选用了最佳参量值的理论计算结果

与模糊函数卷积的仿真曲线,是经过较长时间的采集 获取的(为 360 次采集的求和,每次 60 ms,意在排除 噪声影响,因为图像噪声会导致边缘定位误差^[9])。 在计算模型中取参量 $\theta_0 = -1.7''$,系统等效模糊函数 取为半峰全宽为 6 pixel 的 Gauss 平滑函数。



图 7 实测圆物体投影(点)及模糊后的模拟曲线(连线)

Fig. 7 Measured projection of round object (star) and simulated projection curve (line)

由图 7 可见采用上述参量值的模型推算的模拟 曲线与实验曲线非常吻合,其中二个谷底的位置完 全重合。需要说明的是上述选取的"最佳"参量值是 依据拟合误差最小原理而获得的,本文不打算探求 如何精确求解这些拟合参量、以及探求等效模糊效 应精确地来自哪些因素。系统等效模糊函数 G(x) 是整个系统模糊效应的综合反映,是一种近似,并不 能证明系统空间分辨率是 6 pixel(65.4 μm),对评 估整个 DEI 设备的系统空间分辨率只具有一定参 考价值,因为可能还有引起谷底位置漂移的其他因 素,这些因素不能用简单的 Gauss 函数来近似。此 外,本模型曲线在两个谷底处与实验值尚有较大数 值出入,也没有考虑相位相干等效应。然而图 6 足 以说明当存在系统模糊时,实验曲线的谷底位置已 不再是物体边界的真实位置。"半高"方法与系统等 效模糊函数的选取没有关系,可直接由实验数据来 计算圆物体半径。

表1是用谷底方法和本文提出的"半高"方法从 投影曲线上测得的半径值。

表1 投影曲线上测得的直径值

Table 1 Diameter measured from projection curve

	Deep valley	Half height	Real value*
	method	method	
Diameter /mm	2.9372	3.0113	3.000

Note:measured by vernier caliper: 3.00 ± 0.01

可见谷底法测得结果与真实值有一定偏差,半 高法测得结果与真实值非常接近。

5 结 论

本文用简单模型方法显示了 DEI 成像系统模 糊可使本应该对应物体边界处的图像谷底位置发生 位移,使得谷底法几何测量产生误差。而所提出的 "半高"方法则克服了谷底位置位移引起的偏差,可 从 DEI 投影图像中得到了非常好的圆物体直径测 量结果。该方法可推广到生物组织样品的尺寸测 量,可获得较精确的结果,因为在"半高"计算区域, 轻物质具有很小的吸收衬度改变。利用可见光成像 的方法能对物体样品进行高精度的外观尺寸测量及 液体折射率测量^[10,11],而由于 X 射线的穿透性,该 基于 DEI 图像的测量方法尤其适用于生物体内部 微小结构的尺寸测量。所提出的 DEI 简化模型也 可用于计算一些成像参量如折射率 n,双晶体夹角 θ_0 等。

参考文献

- 1 D. Chapman, W. Thomlinson, R. E. Johnston *et al.*. Diffraction-enhanced X-ray imaging[J]. *Phys. Med. Bio.*, 1997, 42(11): 2015~2025
- 2 Zhu Peiping, Wang Junyue, Yuan Qingxi et al.. Study on the methods for diffraction-enhanced imaging with two crystals[J]. Acta Physica Sinica, 2005, 54(1): 58~63

朱佩平,王寯越,袁清习等.两块晶体衍射增强成像方法研究[J].物理学报,2005,54(1):58~63

3 Huang Zhifeng, Li Zheng, Kang Kejun et al.. Study on extraction method of phase information in X-ray diffraction enhanced imaging [J]. High Energy Physics & Nuclear Physics, 2005, 29(S1): 133~136

黄志峰,李 政,康克军等. X射线衍射增强相衬成像相位信息

提取方法研究[J]. 高能物理与核物理, 2005, 29(S1): 133~136

4 J. Keyrilainen, M. Fernandez, P. Suortti. Refraction contrast in X-ray imaging[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2002, **488**(1~2): 419~427

5 Zhu Peiping, Wu Ziyu. X-ray phase contrast imaging [J]. *Physics*, 2007, **36**(6): 443~451 朱佩平,吴自玉. X 射线相位衬度成像[J]. 物理, 2007, **36**(6): 443~451

6 Liu Li, Zhu Peiping. CT image explanation in peak diffractionenhanced imaging [J]. CT Theory and Applications, 2008, 17(1): 1~6

刘 力,朱佩平. X射线衍射增强成像中 DEI 峰位 CT 图像的解释[J]. CT 理论与应用研究, 2008, 17(1): 1~6

- 7 Sun Yi, Zhu Peiping, Yu Jian *et al.*. Absorption, refraction and extinction contrast computerized tomography of X-ray diffraction enhanced imaging method[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, 27(4): 749~754
- 孙 怡,朱佩平,于 健,等.X射线衍射增强成像中吸收、折射 以及散射衬度的计算层析[J].光学学报,2007,27(4):749~ 754
- 8 V. N. Ingal, E. A. Beliaevskaya. X-ray plane-wave topography observation of the phase contrast from a non-crystalline object [J]. J. Phys. D: Appl. Phys., 1995, 28(11): 2314~2317
- 9 Ding Xiaohua, Li You, Yu Qihui *et al.*. CCD noise calibration and its application in edge location[J]. Acta Optica Sinica, 2008, 28(1): 99~104

丁晓华,李 由,于起峰等. CCD 噪声标定及其在边缘定位中的 应用[J]. 光学学报, 2008, **28**(1): 99~104

- 10 Hua Shiqun, Luo Ying. High precision measurement of alignment error based on theory of interference[J]. Chin. J. Lasers, 2006, 33(1): 76~80 花世群,骆 英. 基于干涉原理的高精度直线度误差测量[J]. 中 国激光, 2006, 33(1): 76~80
- 11 Hua Shiqun, Luo Ying, Hong Yun. Measurement of refractive index of liquid by the equal thickness interference[J]. Chin. J. Lasers, 2006, 33(11): 1542~1546 花世群,骆 英,洪 云. 基于等厚干涉原理的液体折射率测量 方法[J]. 中国激光, 2006, 33(11): 1542~1546