

复合组分材料的 X 射线定量相衬成像研究

任玉琦^{1,2} 周光照^{1,2} 王玉丹^{1,2} 谢红兰¹ 邓彪¹ 杜国浩¹ 肖体乔¹

(¹ 中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800; ² 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要 对复合组分材料的应用和需求日益广泛, 但如何精确地测量其定量结构信息仍是一个亟待解决的难题。建立了复合组分结构模型, 利用 X 射线同轴相衬成像和相位恢复方法, 分别进行了计算机模拟和实验研究, 系统地分析了复合组分材料不同的密度差异对 X 射线相衬成像和相位恢复精度的影响以及噪声对定量相位恢复的影响。实验结果表明, 利用 X 射线定量相衬成像技术可以实现复合组分材料的无损清晰分辨和精确测量, 这在材料科学尤其是复合组分材料的制备, 如多层核聚变靶丸, 以及生物医学应用, 特别是在血管成像的应用方面, 都会发挥很好的作用。

关键词 X 射线光学; 相位恢复; 定量成像; 复合组分材料

中图分类号 O434.1; O436.1 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.0834002

Study of Multi-Component Sample Using Quantitative X-Ray Phase Contrast Imaging

Ren Yuqi^{1,2} Zhou Guangzhao^{1,2} Wang Yudan^{1,2} Xie Honglan¹ Deng Biao¹
Du Guohao¹ Xiao Tiqiao¹

(¹ Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)
(² Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract The multi-component object has received broadly investigation and application, however, how to detect and measure the quantitative structural information accurately is still an urgent problem. Therewith, a multi-component model is constructed. Combined with X-ray phase contrast imaging (XPCI) and phase retrieval (PR), systematic analysis of effects of the density difference of each component on the image contrast and precision of PR are conducted by simulation and experiment. The results show that XPCI and PR can provide a new method for nondestructively quantitative study of multi-component objects with high resolution and accuracy, which will play an important role in material sciences and biomedical applications, especially in the multilayer inertial fusion capsule and vascular imaging.

Key words X-ray optics; phase retrieval; quantitative imaging; multi-component

OCIS codes 340.7740; 110.7740; 070.1170

1 引 言

自然界中几乎任何东西都是由多种材料构成的复合组合物体, 一种比较常见的复合组分结构就是肿瘤血管^[1], 它由肿瘤组织、肌肉组织、血管外壁、血管内壁和血液构成。另一种则比较多见于以多聚物、金属材料等为基础的化工产品当中^[2,3]。随着

技术的不断发展, 一方面, 对疾病诊断的要求越来越高, 比如通过对血管直径进行精确度量来诊断血管狭窄^[4]的程度, 通过精确测量血管长度来判断肿瘤新生血管的生长速度^[5]等。另一方面, 加工制作复合组分材料不仅越来越简单易行, 而且其成本降低, 这极大程度上推广了它们的应用范围。但其制备通

收稿日期: 2011-03-29; **收到修改稿日期**: 2011-04-20

基金项目: 国家 973 计划 (2010CB834301)、国家自然科学基金 (10805071, 10705020) 和上海市基础研究重点项目 (08JC1411900) 资助课题。

作者简介: 任玉琦 (1984—), 男, 博士研究生, 主要从事 X 射线相衬成像方法方面的研究。E-mail: renyuqi@sinap.ac.cn

导师简介: 肖体乔 (1966—), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事 X 射线光学、成像光学及光学检测等方面的研究。

E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn

常需要严格的控制,每种组分的形状、含量、厚度和密度都有特定的要求,以求满足不同的性能需求。因此,对复合组分结构的科学检测是相当重要的。现在常用的检测方法主要有透射电子显微镜(TEM)^[2]和传统X射线成像^[6]等方法。然而,这些方法都存在一定的局限性。TEM不能进行实时地检测,而且其测量精度不高。传统X射线成像方法可以实时地检测动态制备过程,进行初步的测量估算,但同样其测量精度不高。针对这种以C,H,O等低Z元素构成的聚合物和生物体血管类型的复合组分结构,X射线定量相衬成像方法可以很好地满足要求。X射线相衬成像^[7](XPCI)可以实时动态监测复杂结构的形态,相位恢复方法可以定量分辨它们的尺寸和密度等精确参数。

X射线相衬成像是利用X射线作用于物体时产生的相移变化来反映物体内部结构信息的成像方法。对于以C,H,O等轻元素构成的样品,X射线相衬成像可以提供比传统X射线吸收成像高得多的衬度,从而实现了X射线吸收不敏感的样品的清晰成像。X射线相衬成像自提出以来已经发展了干涉法^[8]、衍射增强法^[9]、同轴轮廓法^[10]和光栅微分法^[11]等方法,广泛运用于材料学、考古学、工业检测以及生物医学等众多领域^[12~14]。干涉法和衍射增强法都需要借助近乎完美的光学器件实现。同轴相衬成像法具有实验装置简单,无需附加光学元件,它只要求高空间相干性的X射线源和高分辨率的X射线探测器;不足之处是杂散光和零级光叠加到轮廓像中,降低了衬度和信噪比。由于物体轮廓附近存在强度分布,因此同轴相衬成像其实是定性的轮廓成像,通过相位恢复过程则可以进一步获得样品结构的定量信息,结合计算机X射线断层摄影(CT)技术,也产生了同轴X射线定量相衬CT方法^[15],可得到样品的三维信息。

相位恢复通过物体像面强度测量来恢复物体的相位信息。现有的相位恢复方法主要包括迭代算法^[16],基于强度传播方程(TIE)法^[17],基于衬度传递函数(CTF)法^[18]以及混合TIE和CTF法^[19]。GSF法可以得到很高的精度,但它存在迭代停滞的问题。TIE法在无噪声的情况下可以得到很好的结果,但它只适用于传播距离比较短的情形。CTF法通常需要利用3~4个距离的相衬像来精确地恢复物体的相位。混合TIE和CTF法能很好地获取物体的定量信息,虽然它也需要多个传播距离的相衬像,但是它在各自的基础上拓宽了应用范围,即使是

存在噪声时也适用,而且它还能应用到强吸收物体

2 原理和方法

2.1 同轴X射线相衬成像原理

同轴X射线相衬成像是将X射线穿过物体产生的相移通过一定的自由空间传播,形成局部干涉效应从而在探测平面形成强度分布。如图1所示。

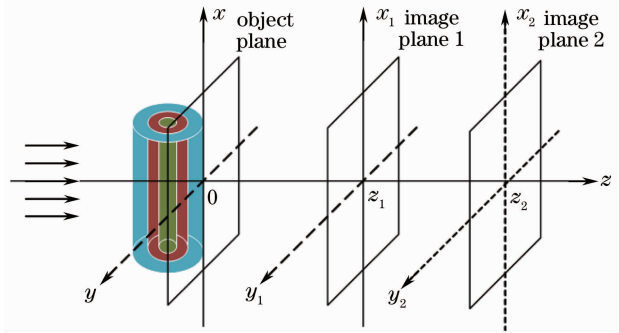


图1 同轴X射线定量相衬成像示意图

Fig. 1 Schematic diagram of in-line X-ray quantitative phase contrast imaging

通常光线入射到样品后其透射光波振幅可以表示为

$$u(x, y) = T(x, y)u_0(x, y), \quad (1)$$

式中 u 和 u_0 分别表示为透射光和入射光的振幅, T 是样品的传递函数,可以表示为

$$T(x, y) = A(x, y)\exp[i\phi(x, y)], \quad (2)$$

式中 A 表示样品的吸收, ϕ 表示相位调制,即光波通过样品后的相移,

$$A(x, y) = \exp\left[-\frac{1}{2}\int\mu(x, y, z)dz\right], \quad (3)$$

$$\phi(x, y) = \frac{2\pi}{\lambda}\int[\delta(x, y, z) - 1]dz, \quad (4)$$

式中 μ 是线性吸收系数, δ 是复折射率的实部,与电子密度有关。

根据菲涅耳衍射理论^[20],距离样品 z 处的成像平面的强度分布为

$$I(x, y) = |h(x, y) * u(x, y)|^2, \quad (5)$$

式中符号 $*$ 表示卷积, h 为菲涅耳传播因子,

$$h(x, y) = \frac{\exp(ikz)}{i\lambda z}\exp\left[i\frac{\pi}{\lambda z}(x^2 + y^2)\right]. \quad (6)$$

对(5)式进行傅里叶变换,并将(2)式、(6)式代入(5)式得

$$\tilde{I}(f_x, f_y) = \int T\left(x - \frac{\lambda z f_x}{2}, y - \frac{\lambda z f_y}{2}\right) T^*\left(x + \frac{\lambda z f_x}{2}, y + \frac{\lambda z f_y}{2}\right) \exp[-i2\pi\lambda z (x f_x + y f_y)] dx dy. \quad (7)$$

2.2 相位恢复原理

将(7)式写成向量形式^[19]

$$\tilde{I}(\mathbf{u}) = \int T\left(\mathbf{r} - \frac{\lambda z \mathbf{u}}{2}\right) T^*\left(\mathbf{r} + \frac{\lambda z \mathbf{u}}{2}\right) \exp(-i2\pi\lambda z \mathbf{r} \cdot \mathbf{u}) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

式中 \tilde{I} 表示 I 的傅里叶变换, $\mathbf{r} = (x, y)$ 为空域的坐标, $\mathbf{u} = (f_x, f_y)$ 为频域的坐标。

对(8)式中的指数项作一阶 Taylor 展开有

$$\tilde{I}(\mathbf{u}) = \int A\left(\mathbf{r} - \frac{\lambda z \mathbf{u}}{2}\right) A^*\left(\mathbf{r} + \frac{\lambda z \mathbf{u}}{2}\right) \exp(-i2\pi\lambda z \mathbf{r} \cdot \mathbf{u}) \left[1 + i\phi\left(\mathbf{r} - \frac{\lambda z \mathbf{u}}{2}\right) - i\phi\left(\mathbf{r} + \frac{\lambda z \mathbf{u}}{2}\right)\right] d\mathbf{r}, \quad (9)$$

进一步展开(9)式中的乘积项,可以写成

$$\begin{aligned} \tilde{I}(\mathbf{u}) = & \tilde{I}^{\phi=0}(\mathbf{u}) + \sin(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2) \int A(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \exp(-i2\pi\mathbf{r} \cdot \mathbf{u}) [A(\mathbf{r} + \lambda z \mathbf{u}) + A(\mathbf{r} - \lambda z \mathbf{u})] d\mathbf{r} + \\ & i\cos(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2) \int A(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \exp(-i2\pi\mathbf{r} \cdot \mathbf{u}) [A(\mathbf{r} + \lambda z \mathbf{u}) - A(\mathbf{r} - \lambda z \mathbf{u})] d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (10)$$

式中 $\tilde{I}^{\phi=0}(\mathbf{u})$ 为当相位信息为零时距离 z 处的强度分布的傅里叶变换形式,可以近似为 $\tilde{I}_0(\mathbf{u})$ 。假设样品的吸收是缓变的,即 $|\mu(\mathbf{r} + \lambda z \mathbf{u}) - \mu(\mathbf{r} - \lambda z \mathbf{u})| \ll 1$, 将其线性化有 $A(\mathbf{r} + \lambda z \mathbf{u}) + A(\mathbf{r} - \lambda z \mathbf{u}) \approx 2A(\mathbf{r})$ 和 $A(\mathbf{r} + \lambda z \mathbf{u}) - A(\mathbf{r} - \lambda z \mathbf{u}) \approx 2\lambda z \mathbf{u} \cdot \nabla A(\mathbf{r})$, 则(10)式可写成

$$\begin{aligned} \tilde{I}(\mathbf{u}) = & \tilde{I}^{\phi=0}(\mathbf{u}) + 2\sin(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2) \int \exp(-i2\pi\mathbf{r} \cdot \mathbf{u}) \times \phi(\mathbf{r}) A^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\ & i2\cos(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2) \lambda z \mathbf{u} \cdot \int \exp(-i2\pi\mathbf{r} \cdot \mathbf{u}) \phi(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \nabla A(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \\ & \tilde{I}^{\phi=0}(\mathbf{u}) + 2\sin(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2) \tilde{F}\{I_0\phi\}(\mathbf{u}) + \frac{\lambda z}{2\pi} \cos(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2) \tilde{F}\{\nabla(\phi \nabla I_0)\}(\mathbf{u}), \end{aligned} \quad (11)$$

式中 \tilde{F} 表示傅里叶变换。(11)式结合了 CTF 和 TIE 两种方法的普遍形式。当 $z \rightarrow 0$ 时,则简化为 TIE 形式;当样品具有弱吸收性时,则为 CTF 形式。

将(11)式最后一项记为 $\Delta_z(\mathbf{u}) = \frac{\lambda z}{2\pi} \cos(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2) \tilde{F}\{\nabla(\phi^{(n)} \nabla I_0)\}(\mathbf{u})$, 可以将它当作一微扰项,对均匀吸收的物体它为 0。和 CTF 相位恢复相似,考虑多个传播距离进行迭代,利用最小二乘法得

$$\tilde{F}\{I_0\phi^{(n+1)}\}(\mathbf{u}) = \frac{\sum_z D_z(\mathbf{u}) [\tilde{I}(\mathbf{u}) - \tilde{I}^{\phi=0}(\mathbf{u}) - \Delta_z(\mathbf{u})]}{\sum_z D_z^2(\mathbf{u}) + \alpha}, \quad (12)$$

式中 $D_z(\mathbf{u}) = 2\sin(\pi\lambda z |\mathbf{u}|^2)$, $\phi^{(n)}(\mathbf{r})$ 是第 n 次迭代得到的相位, α 是正则化无穷小参量。

3 模拟分析

通常情形下,材料的密度与其折射率是相关联的。同一材料,密度不同,其折射率不同。为了具有代表性,建立了一个 4 种材料组成的复合结构模型,光子能量选择 20 keV,如图 2 所示,最外层的聚酯薄膜(mylar)层,厚度为 20 μm ,折射率实部 $\delta_1 = 7.1859 \times 10^{-7}$;由外向里第二层是聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)层,厚度为 30 μm , $\delta_2 = 6.66544 \times 10^{-7}$;第三层为尼龙(nylon)层,厚度为 20 μm , $\delta_3 = 5.6528 \times 10^{-7}$;最里面一层是聚苯乙烯(PS)材料,直径为

60 μm , $\delta_4 = 5.53603 \times 10^{-7}$ 。

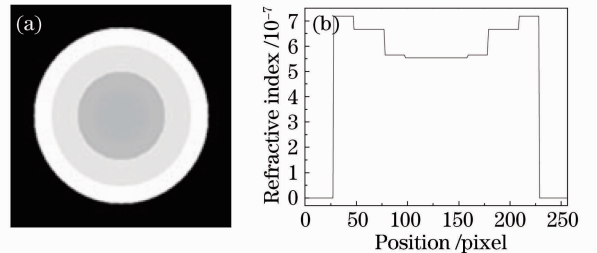


图 2 模拟复合组分结构模型(a)及其横截面分布(b)

Fig. 2 Multi-component phantom (a) and the corresponding profile (b)

3.1 折射率对直接相衬成像衬度的影响

为了更好地研究包含不同材料的复合组分结构的定量密度分辨,首先研究材料的折射率差异(即密度差

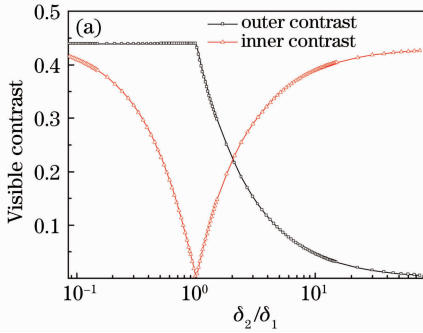
异)对相衬成像的影响。为此,只需要一个两层结构(包含两种不同材料)就足以说明问题。图3为一个两层结构示意图。外层材料的折射率实部为 δ_1 ,内层材料的折射率实部为 δ_2 。



图3 两层结构模型

Fig. 3 Phantom of two-component

对于单一成分的样品,衬度是评价其成像质量一个重要的参数,但对于这种复合组分结构,衬度已不能完全表现其成像的好坏,因此,参照文献[21],



本文引入参量衬度比率(f_{CR})来评价内部材料相对于外部材料的成像质量,

$$f_{CR} = C_{outer}/C_{inner}$$

式中 C_{outer} 和 C_{inner} 分别表示外层材料的衬度和内层材料的衬度。图4给出了不同的折射率比值 δ_2/δ_1 时的 C_{outer} , C_{inner} (a)及 f_{CR} (b)的变化曲线。为了更直观,采用了对数坐标。模拟选用的光子能量为20 keV,其中 $\delta_1 = 6.66544 \times 10^{-7}$ 保持不变,不断改变 δ_2 。可以看出,当 $\delta_2/\delta_1 \ll 1$ 时, C_{outer} 和 C_{inner} 接近, f_{CR} 趋近1。随着 δ_2/δ_1 的增大, C_{outer} 基本保持不变, C_{inner} 逐渐减小,此时 f_{CR} 逐渐增大;直至当 $\delta_2/\delta_1 = 1$ 时,此时 C_{inner} 趋近于0,而 f_{CR} 趋于无穷大。当 $\delta_2/\delta_1 > 1$ 时, C_{outer} 减小, C_{inner} 增大,此时 f_{CR} 急剧减小。当 $\delta_2/\delta_1 \gg 1$ 时, C_{outer} 趋于0, C_{inner} 趋于恒定值,这样 f_{CR} 也趋于0。

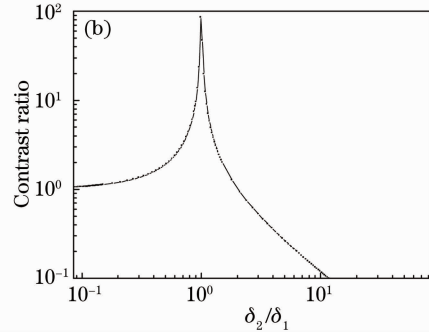


图4 复合组分两层结构模型衬度曲线。(a) C_{outer} 和 C_{inner} 以及(b) f_{CR} 随 δ_2/δ_1 的变化曲线

Fig. 4 Curves of contrast of the two-component phantom. (a) C_{outer} and C_{inner} and (b) f_{CR} changes with δ_2/δ_1

根据 f_{CR} 的定义, f_{CR} 越大,表示内层材料成像质量越差,反之, f_{CR} 越小,表示外层材料成像质量越差。一般情况下,为了使两种材料都有比较好的成像效果,选择成像 f_{CR} 值接近1的情形,即满足 $\delta_2/\delta_1 < 0.1$ 和 $\delta_2/\delta_1 = 2$ 的情形。

3.2 折射率对相位恢复的影响

借助于(12)式给出的相位恢复方法,对3.1节中建立的两层结构模型进行了相位恢复。光子能量为20 keV, $\delta_1 = 6.66544 \times 10^{-7}$ 保持不变,改变 δ_2 。采用了0,0.1,0.3,0.6和0.9 m 5个距离的相衬像进行相位恢复。迭代次数 $n=5$ 。采用Tikhonov正则化方法[22],选择的规则化参数 $\alpha = 10^{-7}$ 。根据参考文献[23],引入均方根误差 f_{RMS} 来评价相位恢复的精度,其定义如下

$$f_{RMS} = \left(\sum_{i,j} |\phi_{i,j}^{rec} - \phi_{i,j}^{true}|^2 / \sum_{i,j} |\phi_{i,j}^{true}|^2 \right) \times 100\% \quad (13)$$

图5给出了当折射率 $\delta_1 = 6.66544 \times 10^{-7}$,折射率 δ_2 分别为(a) 6.66×10^{-8} , (b) 2.4×10^{-6} ,

(c) 1.5×10^{-5} 时的相位恢复比较。从左至右三列依次为样品模型、相位恢复结果和相对应穿过图像正中间的横截面分布曲线。从图5(a)可以看出,相位恢复误差较大,尤其是在背景、材料边界和样品中间部分。随着 δ_2 的不断增大,当满足图5(b)情形时,无论是背景、材料边界还是样品中间,相位恢复误差都比较小。图5(c)情形下,背景和样品中间的误差比较小,材料边界的误差相对较大。

图6给出了 f_{RMS} 随着折射率比值 δ_2/δ_1 的变化曲线。可以看出,这条曲线具有字母“V”的形状。当 $\delta_2/\delta_1 \ll 1$ 时,对应于图5(a)中给出的情形,两种材料的折射率相差很大, f_{RMS} 比较大(6%左右);随着 δ_2/δ_1 的增大, f_{RMS} 逐渐减小;当 $\delta_2/\delta_1 = 1$ 时, f_{RMS} 达到一个临界点(4.6%左右);当 δ_2 继续增大, f_{RMS} 急剧减小;直至当 δ_2/δ_1 为3.6时, f_{RMS} 最小(1.24%左右),恢复精度最高,这种情形可以从图5(b)中得到验证。之后随着 δ_2 继续增大, f_{RMS} 又缓慢增大;当 δ_2/δ_1 为22.5时,即满足图5(c)的情形时,

f_{RMS} 又达到一个临界点 (1.95% 左右); 在这个临界点之后, 随着 δ_2 继续增大, f_{RMS} 急剧增加, 在图中所给出的折射率比值范围内, f_{RMS} 最大已达到 8.2%。

根据以上的分析可以看出: 当折射率比值 δ_2/δ_1

在 2~22.5 之间时, 此时的 f_{RMS} 整体上较低 (小于 2%, 对应于误差曲线中的水平段, f_{RMS} 最大值为 1.95%, 最小值为 1.24%)。当折射率的比值超出这个范围时, f_{RMS} 都比较大。

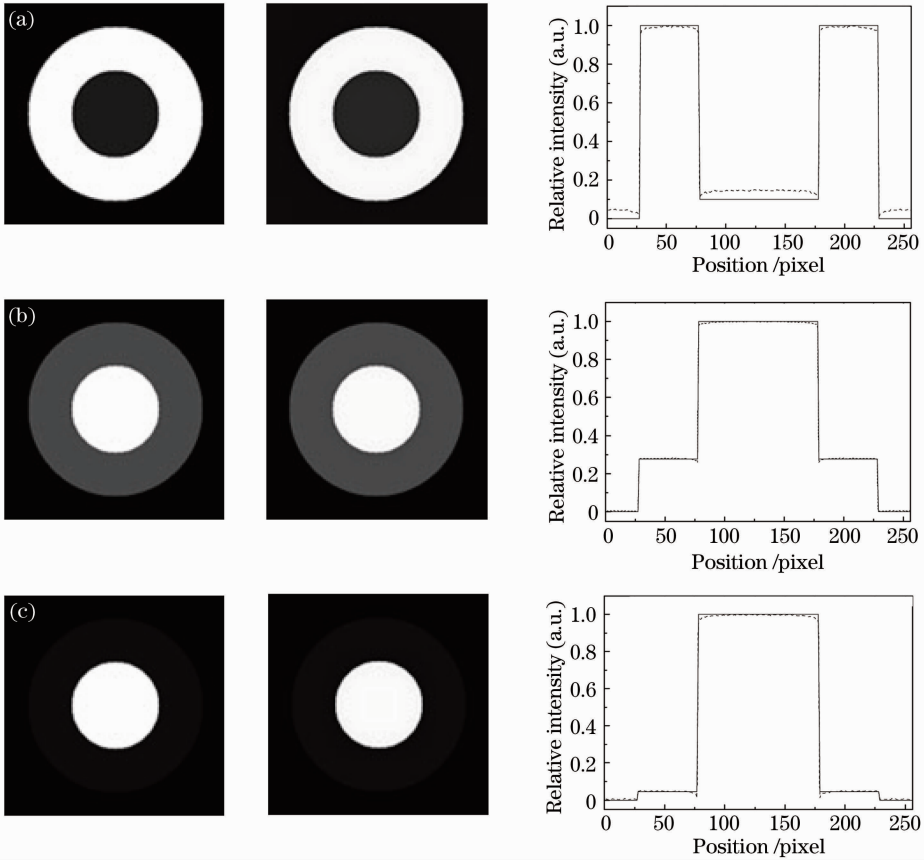


图 5 $\delta_1 = 6.66544 \times 10^{-7}$, δ_2 分别为 (a) 6.66×10^{-8} , (b) 2.4×10^{-6} , (c) 1.5×10^{-5} 时两层结构模型相位恢复结果比较
Fig. 5 Phase retrieval results of two-component phantom condition that $\delta_1 = 6.66544 \times 10^{-7}$, while δ_2 is assigned to (a) 6.66×10^{-8} , (b) 2.4×10^{-6} and (c) 1.5×10^{-5} , respectively

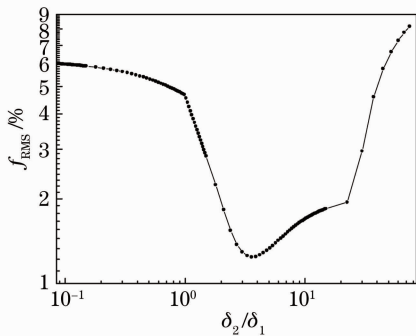


图 6 两层结构模型 f_{RMS} 随 δ_2/δ_1 的变化曲线
Fig. 6 f_{RMS} curve of the two-component phantom changes with δ_2/δ_1

3.3 多层结构的相位恢复

在 3.2 节的基础上, 进一步模拟了图 2 给出的复合多层模型的相位恢复。模拟所用的参数: 光子能量 20 keV, 探测器像素尺寸为 $1 \mu\text{m}$, 采用了 5 个

距离的相衬像: 0, 0.1, 0.3, 0.6, 0.9 m。相位恢复结果如图 7 所示。

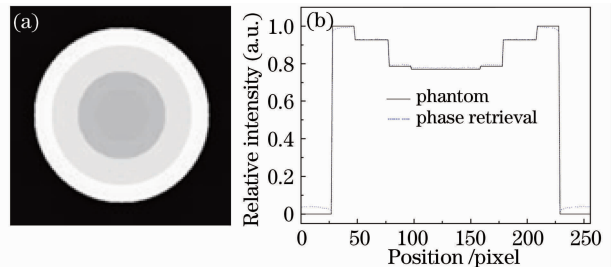


图 7 (a) 复合多层结构模型相位恢复结果及 (b) 横截面分布
Fig. 7 (a) Phase retrieval of multi-component phantom and (b) profiles of (a)

图 7 是采用混合相位恢复方法得到的结果, 其中图 7(a) 是利用聚苯乙烯的折射率参数和 $z=0$ 处的相衬像做初始相位估计得到的图像, 图 7(b) 是模型与图 7(a) 的横截面强度分布比较。可以看出, 背

景和边界处的误差比较大。由于样品包含多种材料,所以初始相位估计所用的折射率参数的选择会对相位恢复产生一定的影响。这从图 9 给出的曲线可以看出。

图 8 是添加了噪声的情形下相位恢复的比较,其中也是利用聚苯乙烯的折射率参数作为初始估计。第 I 列是在同等条件下,添加了高斯噪声的相位恢复结果,第 II 列是同时添加了高斯噪声和椒盐噪声的相位恢复结果。图 8(a)对 $z=0.1$ m 处的相衬像添加了 100 dB 的噪声之后的相位恢复结果。图 8(b)是对 $z=0.1, 0.3$ m 处的相衬像同时添加了 100 dB 的噪声之后的相位恢复结果。图 8(c)是对 $z=0.1, 0.3$ 和 0.6 m 处的相衬像添加了 100 dB 的噪声之后的相位恢复结果。图 8(d)是对 $z=0.1,$

0.3, 0.6 和 0.9 m 处的相衬像添加了 100 dB 的噪声之后的相位恢复结果。

图 9 给出了选择不同的折射率参数和添加噪声的相衬像数目对相位恢复的影响。图 9(a)是添加 100 dB 高斯噪声时分别选择 4 种材料的折射率得到的 f_{RMS} 比较。图 9(b)是添加 100 dB 高斯和椒盐混合噪声时分别选择 4 种材料的折射率得到的 f_{RMS} 比较。可以看出,两种情形下,随着添加噪声的相衬像数目的增加, f_{RMS} 类线性地增大。当不添加噪声时, f_{RMS} 随着所选用于初始相位估计的折射率的增大而增大。当添加了噪声后, f_{RMS} 随着所选折射率的增大而减小,这种变化趋势在噪声污染图像的数目很多时尤为明显。

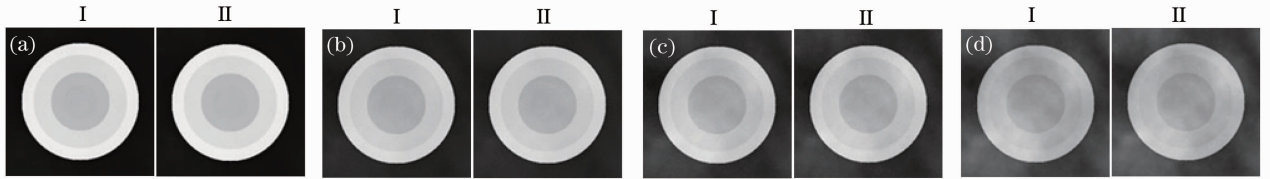


图 8 对(a)0.1 m; (b) 0.1 和 0.3 m; (c) 0.1, 0.3 和 0.6 m; (d) 0.1, 0.3, 0.6 和 0.9 m 的相衬像添加噪声的结果

Fig. 8 Retrieved results when add noise to images at (a) 0.1 m; (b) 0.1 and 0.3 m; (c) 0.1, 0.3 and 0.6 m; (d) 0.1, 0.3, 0.6 and 0.9 m, respectively

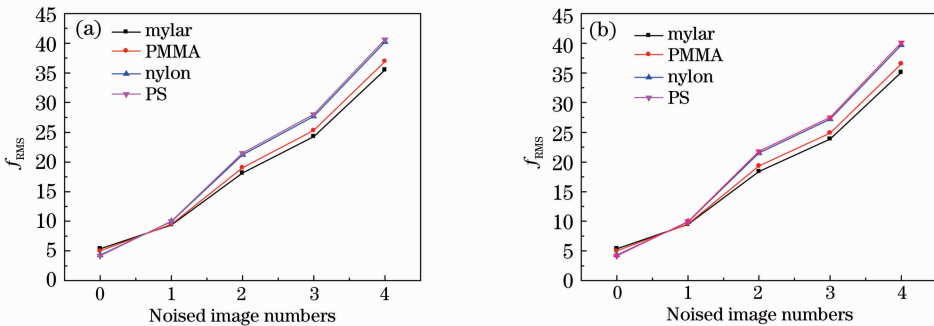


图 9 添加 100 dB (a)高斯噪声和(b)混合噪声的相衬像数目与 f_{RMS} 的关系

Fig. 9 Relations between noised image numbers and f_{RMS} while added 100 dB noise with type of (a) Gaussian and (b) mixed Gaussian and salt and pepper

4 实验结果与分析

实验在上海光源 X 射线成像及生物医学应用光束线站 (BL13W) 完成。BL13W 采用 1.9 T 的 Wiggler 产生同步辐射光,利用液氮冷却的平晶单色器提供 8~72.5 keV 的相干 X 射线。光源点到样品台的距离为 34 m。采用 Photonic-Science 的 X 射线 CCD 探测器来获取图像,像素大小为 $9 \mu\text{m}$ 。制作了 4 层材料的模型:采用常见的中性笔筒和笔芯作为基

底,内部填充其他材料。从外向内依次为:中性笔管层,琼脂凝胶层(5%),中性笔芯壳层和聚苯乙烯颗粒层(颗粒尺度为 $50 \mu\text{m}$)。选用的实验参数为:光子能量 18 keV,曝光时间 2 ms,成像距离分别为 0.1, 0.3, 0.4, 0.6 和 0.9 m,其中 0.1 m 处的图像作吸收校正,用来做初始相位估计。图 10 是以聚苯乙烯的复折射率参数为初始估计得到的相位恢复实验结果。图 10(a)是 0.6 m 处的相衬像,图 10(b)是(a)白线处

的横截面强度分布。图 10(c) 是利用 5 个距离进行相位恢复的结果, 图 10(d) 是 (c) 白线处的横截面强度分布。相位恢复中选择的正则化参数 α 为 10^{-9} 。

通过比较相位恢复前后投影图的横截面强度分布, 可以看出, 相位恢复后, 消除了物体轮廓的边缘增强效应, 可以初步分辨出物体的不同结构。这从

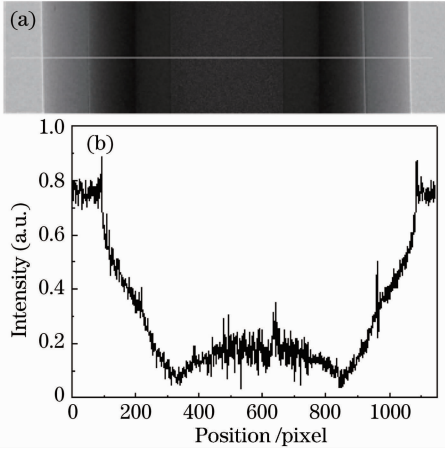


图 11 给出的对应于图 10(c) 的相位恢复后的切片进一步得到说明。相位恢复后, 除了最内层的聚苯乙烯球颗粒外, 其他三层材料的定量密度差异都很好地区分开来, 包括下面的空气缝隙。聚苯乙烯球由于杂乱的排列, 每个球形颗粒之间还有空隙, 整体上密度不均匀, 所以很难辨别清楚。

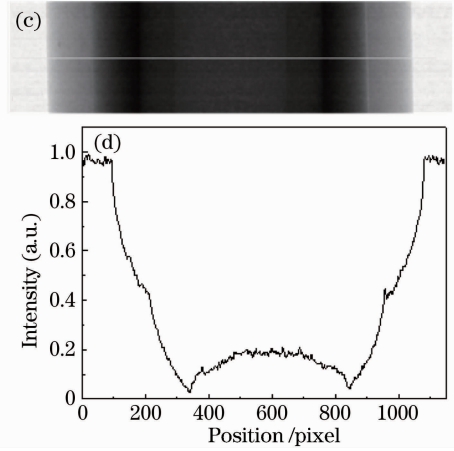


图 10 实验结果。(a) 和 (b) 分别是 0.6 m 处的相衬像与横截面强度分布; (c) 和 (d) 分别是利用 5 幅相衬像进行相位恢复的结果与横截面强度分布

Fig. 10 Experimental results. (a) Phase-contrast image at 0.6 m, (b) the profile at the white line in (a); (c) retrieved image using the five images, (d) the profile at the white line in (c)

进一步, 通过定量计算来评估相位恢复的精度。通常中性笔管的主要成分是改进的 PS, 笔芯壳层的主要成分是聚丙烯 (PP), 这里就以 PS 和 PP 的参数作定量估算, 查得它们在 18 keV 的折射率实部分别为^[24]: $\delta_1 = 6.83 \times 10^{-7}$, $\delta_3 = 6.58 \times 10^{-7}$, 琼脂凝胶 (Agar gel) 的折射率参数为: $\delta_2 = 9.36 \times 10^{-7}$ 。为了评价材料的密度差异 (折射率不同) 对衬度比率 f_{CR} 和相位恢复误差 f_{RMS} 的影响, 也方便和模拟结果比对, 这里选择最外面的两层材料作估算。根据查到的折射率参数可以计算得 $\delta_2/\delta_1 = 1.42$ (这与模拟结果一致, 从图 10(a) 给出的相衬像计算得到外层衬度为 0.189, 内层衬度为 0.09, 衬度比率为 2.1。根据模拟得到的衬度比率随折射率变化曲线图 4(b) 可以估算出这两种材料的折射率比值 $\delta_2/\delta_1 = 1.45$)。而利用图 11 给出的定量相位恢复结果, 可以计算得到折射率比值 $\delta_2/\delta_1 = 1.365$, 这中间由于相位恢复而引入了 3.8% 的误差。结合图 6 的 f_{RMS} 曲线, $\delta_2/\delta_1 = 1.42$ 对应的 f_{RMS} 为 3%, $\delta_2/\delta_1 = 1.365$ 对应的 f_{RMS} 为 3.15%, 可见它们的差别非常小。这可以证明, 对于材料折射率相差较大的情形, 通过这种方法可以实现精确定量清晰分辨。

另外, 还可以看出, 中性笔管层和笔芯壳层材料的差别非常小, 即 $\delta_1/\delta_3 = 1.038$, 从图 11 的相位恢

复结果中, 可以估算得到 $\delta_1/\delta_3 = 1.05$ 。这也就说明, 对于材料密度差异或者折射率差异比较小的情形, 利用这种方法也可以清晰地区分开来, 只不过此时存在 1.2% 的相对误差。

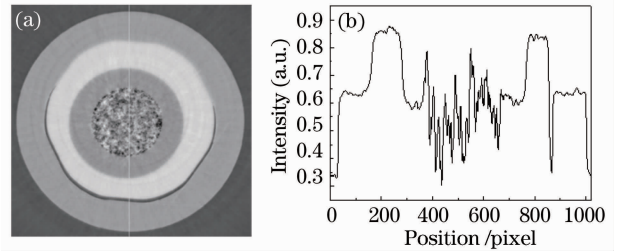


图 11 相位恢复后的结果。(a) 和 (b) 分别是相位恢复后的切片与横截面强度分布

Fig. 11 Result of phase retrieval. (a) Slice, and (b) the profile at the white line in (a)

这里需要注意的是, 由于实验和模拟中所用的参数有所不同, 因而对误差的估计存在一定影响。另外, 由于实际光源并不是严格的平行光, 而且受探测器导轨的不平整性和样品台的运动精度的影响, 实验得到的不同距离的相衬像之间存在放大、平移等因子, 在进行相位恢复前需要做图像配准^[25]。图像配准的精度也会直接影响相位恢复的误差。

从上面的分析可以看出, 实验结果与模拟的结

果基本一致,那也就证明利用这种混合相位恢复方法对复合组分材料进行精确定量密度分析是切实可行的,对于材料密度相差较大的情形,其误差较大;对于材料密度差异较小的情形,其误差也较小。这是由于这种方法对于密度大吸收强的材料来说,相位恢复结果会比真实值偏小的缘故。

5 结 论

利用 X 射线相衬成像方法,结合混合 CTF 和 TIE 相位恢复方法,对复合组分样品作了详细的分析研究,实现了对复合组分样品的清晰精确的定量密度分辨。通过数字模拟发现,在无噪声的情形下,这种混合相位恢复方法对复合组分结构的 f_{RMS} 在 5% 以内。当折射率比值 δ_2/δ_1 为 2 时,此时 f_{CR} 最大;当 δ_2/δ_1 为 3.6 时, f_{RMS} 最小,达到 1.24%。当一幅相衬像中加入了 100 dB 噪声之后,相位恢复的误差增大至 9%,随着引入噪声的相衬像的数目增加,相位恢复精度呈线性下降。通过实验可以发现,材料的密度差异对相衬成像和相位恢复的影响与模拟结果吻合,利用这种混合方法对复合组分结构进行精确定量密度分辨是切实可行的,这在生物医学应用研究和材料学研究方面会带来巨大的应用潜力。

参 考 文 献

- Hou Haoming, Liu Zhenhua, Liu Yajie *et al.*. Application of digital subtraction angiography to elderly patients with vertebrobasilar arterial insufficiency[J]. *Practical Geriatrics*, 2006, **20**(5): 338~340
侯昊明,刘振华,刘亚杰等.老年椎基底动脉供血不足血管结构异常状况分析[J]. *实用老年医学*, 2006, **20**(5): 338~340
- K. Han, K. Yu-Zhang. Transmission electron microscopy study of metallic multilayers[J]. *Scripta. Mater.*, 2004, **50**(6): 781~786
- Weijun Tong, Changyou Gao. Multilayer microcapsules with tailored structures for bio-related applications[J]. *J. Mater. Chem.*, 2008, **18**(32): 3799~3812
- Yu Mingchuan, Fei Shengmin, Li Jing. Different post-processing techniques in evaluating stenosis degree of vessels in static model of coronary artery stenosis [J]. *Chin. J. Med. Imaging Technol.*, 2010, **26**(9): 1779~1782
于明川,费胜民,李 静.不同图像后处理技术评价冠状动脉狭窄静态模型中血管狭窄程度[J]. *中国医学影像技术*, 2010, **26**(9): 1779~1782
- Gu Xiang, Liu Xiaoxia, Sun Jianqi *et al.*. Preliminary study on application of synchrotron radiation imaging to tumor angiogenesis[J]. *Nucl. Techniq.*, 2009, **32**(7): 487~491
顾 翔,刘晓霞,孙建奇等.同步辐射成像技术应用于肿瘤新生血管的实验初探[J]. *核技术*, 2009, **32**(7): 487~491
- A. Pogany, D. Gao, S. W. Wilkins. Contrast and resolution in imaging with a microfocous X-ray source[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1997, **68**(7): 2774~2782
- T. Q. Xiao, A. Bergamaschi, D. Dreossi *et al.*. Effect of spatial coherence on application of in-line phase contrast imaging to synchrotron radiation mammography[J]. *Nucl. Instrum. Meth. A*, 2005, **548**(1-2): 155~162
- T. Takeda, A. Momose, J. Wu *et al.*. Vessel imaging by interferometric phase-contrast X-ray technique[J]. *Circulation*, 2002, **105**(14): 1708~1712
- 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
- Liu Lixiang, Du Guohao, Hu Wen *et al.*. Effect of some factors on imaging quality of X-ray in-line outline imaging [J]. *Acta Physica Sinica*, 2007, **56**(8): 4556~4564
刘丽想,杜国浩,胡 雯等. X 射线同轴轮廓成像中影响成像质量的若干因素研究[J]. *物理学报*, 2007, **56**(8): 4556~4564
- Li Jing, Liu Wenjie, Zhu Peiping *et al.*. Reconstruction algorithm of fan-beam helical X-ray computer tomography based on grating imaging [J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(2): 421~427
李 镜,刘文杰,朱佩平等.基于光栅相衬成像的扇束螺旋 CT 重建算法[J]. *光学学报*, 2010, **30**(2): 421~427
- Xue Yanling, Xiao Tiqiao, Du Guohao *et al.*. Microscopic identification of panax quinquefolium and panax ginseng by X-ray phase contrast imaging[J]. *Acta Optica Sinica*, 2008, **28**(9): 1828~1832
薛艳玲,肖体乔,杜国浩等.西洋参和高丽白参的 X 射线显微鉴定研究[J]. *光学学报*, 2008, **28**(9): 1828~1832
- P. Cloetens, M. Pateyron-Salome, J. Y. Buffiere *et al.*. Observation of microstructure and damage in materials by phase sensitive radiography and tomography [J]. *J. Appl. Phys.*, 1997, **81**(9): 5878~5886
- G. B. Kim, Y. J. Yoon, T. J. Shin *et al.*. X-ray imaging of various biological samples using a phase-contrast hard X-ray microscope[J]. *Microsc. Res. Techniq.*, 2008, **71**(9): 639~643
- Chen Rongchang, Xie Honglan, Du Guohao *et al.*. Experimental investigation on X-ray micro-computed tomography by phase retrieval with Born approximation[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **30**(4): 1106~1111
陈荣昌,谢红兰,杜国浩等.基于玻恩近似相位恢复的 X 射线显微 CT 实验研究[J]. *光学学报*, 2009, **30**(4): 1106~1111
- Huang Lixin, Yao Xin, Cai Dongmei *et al.*. A high accuracy and fast iterative algorithm for phase retrieval[J]. *Chinese J. Lasers*, 2010, **37**(5): 1218~1221
黄利新,姚 新,蔡冬梅等.一种快速高精度的相位恢复迭代法[J]. *中国激光*, 2010, **37**(5): 1218~1221
- Xue Bindang, Zheng Shiling, Jiang Zhiguo. Phase retrieval using transport of intensity equation solved by full multigrad method [J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(6): 1514~1518
薛斌党,郑世玲,姜志国.完全多重网格法求解光强度传播方程的相位恢复方法[J]. *光学学报*, 2009, **29**(6): 1514~1518
- M. Langer, P. Clotens, J. P. Guigay *et al.*. Quantitative comparison of direct phase retrieval algorithms in in-line phase tomography[J]. *Med. Phys.*, 2008, **35**(10): 4556~4566
- J. P. Guigay, M. Langer, R. Boistel *et al.*. Mixed transfer function and transport of intensity approach for phase retrieval in the Fresnel region[J]. *Opt. Lett.*, 2007, **32**(12): 1617~1619
- M. Born, E. Wolf. Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1999
- Shi Shaomeng, Chen Rongchang, Xue Yanling *et al.*. X-ray microscopic imaging of low Z materials wrapped by strongly absorbing medium[J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, **57**(10): 6319~6328
师绍猛,陈荣昌,薛艳玲等.强吸收介质内部低 Z 材料结构的 X 射线显微成像研究[J]. *物理学报*, 2008, **57**(10): 6319~6328
- A. N. Tikhonov, V. Y. Arsenin. Solutions of Ill-Posed Problems [M]. John Wiley & Sons, 1977
- T. E. Gureyev, T. J. Davis, A. Pogany *et al.*. Optical phase retrieval by use of first Born- and Rytov-type approximations [J]. *Appl. Opt.*, 2004, **43**(12): 2418~2430
- B. L. Henke, E. M. Cullikson, J. C. Davis. X-ray interactions: photo absorption, scattering, transmission, and reflection at $E=50\sim 30,000$ eV, $Z=1\sim 92$ [J]. *At. Data Nucl. Data Tables*, 1993, **54**(2): 181~343
- Guo Rongyi, Ma Hongjuan, Xue Yanling *et al.*. K- Edge digital subtraction X-ray imaging for observation of Cu^{2+} adsorption in polymer particles[J]. *Acta Optica Sinica*, 2010, **30**(10): 2898~2903
郭荣怡,马红娟,薛艳玲等.利用 X 射线 K 边减影成像研究铜离子在聚合物材料上的吸附[J]. *光学学报*, 2010, **30**(10): 2898~2903