

# 电荷耦合器件饱和效应对 PIE 成像质量的影响

王宝升<sup>1</sup> 高淑梅<sup>1</sup> 王继成<sup>1</sup> 朱健强<sup>2</sup> 刘 诚<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 江南大学理学院光信息科学与技术系, 江苏 无锡 214122  
<sup>2</sup> 中国科学院上海光学精密机械研究所 联合实验室, 上海 201800)

**摘要** 在研究电荷耦合器件(CCD)饱和效应对 PIE 成像质量影响的基础上,提出了一种改进的重建算法。该方法可以从发生部分饱和的数据重建出准确的再现像。和现有的方法相比,此方法可以在保证分辨率不受影响的条件下,大幅度缩短数据采集时间,因此可显著降低对实验装置和样品稳定性的要求,对 PIE 方法的推广应用有重要的实际意义。

**关键词** 成像系统;相干衍射成像;相位恢复;显微成像;PIE

**中图分类号** TP212.1 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201333.0611001

## Influence of Charge Coupled Device Saturation on PIE Imaging

Wang Baosheng<sup>1</sup> Gao Shumei<sup>1</sup> Wang Jicheng<sup>1</sup> Zhu Jianqiang<sup>2</sup> Liu Cheng<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> Department of Optical Information Science and Technology, College of Science, Jiangnan University, Wuxi, Jiangsu 214122, China  
<sup>2</sup> Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

**Abstract** Based on the analysis of the influence of the charge coupled device (CCD) saturation on the image quality of ptychographical iterative engine (PIE), an improved reconstruction algorithm is proposed to get accurate reconstruction from partially saturated data. Compared with the common algorithm, the suggested method can remarkably reduce the data acquisition time without degrading the spatial resolution of the reconstruction, so the requirement on the stability of the experimental setup and the specimen is obviously reduced, and this method is quite meaningful for a wide range of applications of PIE.

**Key words** imaging systems; coherent diffraction imaging; phase retrieval; microscopic imaging; PIE

**OCIS codes** 110.0180; 110.0310; 050.1940; 350.5030

## 1 引 言

相干衍射成像(CDI)技术作为解决 X 射线和电子束等短波长成像领域中高性能元件缺乏问题的关键手段被提出,并随着材料和微电子领域相关研究的进展而日益得到关注,现已被广泛应用于非晶体及纳米材料的高分辨成像等诸多领域<sup>[1~5]</sup>。CDI 从样品的远场散射斑强度中直接利用迭代法获得样品相位像,其分辨能力不受光学器件质量的限制,理论分辨率可以达到光学衍射极限,对于很多研究都具有重要的意义,是目前显微成像领域的重要研究方

向之一。

传统的 CDI 成像方法以 Fienup 方法为代表<sup>[6]</sup>,但由于其需要样品是孤立的(或者要在扩展样品上放置一个小孔),因此成像视场受到较大限制。同时对于稍微复杂的样品,Fienup 方法的重建速度往往很慢或者得不到可靠的再现结果。2004 年,Rodenburg 等<sup>[7~14]</sup>提出了一种名为 PIE 的方法,它在数据记录过程中,将样品在垂直于光轴的方向上做一系列精密扫描并同时记录下该位置的散射斑;在图像重建过程中,PIE 采用类似于魏格纳滤波<sup>[9]</sup>

收稿日期: 2013-01-06; 收到修改稿日期: 2013-02-04

基金项目: 江苏省自然科学基金(BK2012548)资助课题。

作者简介: 王宝升(1987—),男,硕士研究生,主要从事相干衍射成像方面的研究。E-mail: wang1bao1sheng@126.com

导师简介: 刘 诚(1971—),男,博士,教授,主要从事光学成像及测量等方面的研究。E-mail: cheng.liu@hotmail.co.uk

的算法来进行迭代重建,由于相邻的照明面积间有一定比例的重叠,可以将两个区域的相位关系进行锁定,一定程度上实现了全息中参考光的效果,因此不但再现的收敛速度很快,同时还具有成像面积大和准确度高等一系列优点。

PIE 在具有诸多优点的同时也相应地增加了实验难度。由于所测量的样品大都是弱相位物体,透射光中大部分能量都集中在入射方向附近很小的角度范围内,电荷耦合器件(CCD)靶面上的中央光斑的强度可以是外周光斑强度的百倍甚至是千倍以上。由于 CCD 动态范围有限,所以现在 PIE 采用的方法是对同一个散射斑进行曝光时间不同的多次记录,然后将所记录的数据按照一定规则拼接起来<sup>[9]</sup>。这样做虽然客观上达到了增加 CCD 动态范围的目的,但数据记录时间大幅度增加,对样品和装置的稳定性要求有了明显提高,而对于 X 射线或者电子束等短波长成像来说,长时间的辐射照明会使样品产生变性,采用多次记录的方法对于很多样品并不现实。如果 PIE 能利用中心饱和的数据进行图像

重建,则这个问题将迎刃而解。通过理论分析和系列的模拟计算,本文证明只要对现有的重建理论稍加修改,PIE 技术完全可以从中心饱和的散射斑恢复出高精度的重建像,从而可以大幅度降低数据采集时间和对实验稳定性的要求。

## 2 PIE 方法的基本原理

图 1 给出了 PIE 方法的基本光路图,其中平行激光束(或者 X 射线、电子束等)经过针孔后照明固定于平移台上的样品,样品的一部分被照亮后在其后面的远处形成散射斑并被 CCD 记录。在样品第一个位置时,记录散射斑强度  $I_1(x, y)$ ,将样品移动到第二个位置处,记录下相应的散射斑强度  $I_2(x, y)$ ,依此类推记录一系列的散射斑强度  $I_n(x, y)$ 。对样品进行横向扫描时,由于每次移动的步长都小于小孔的半径,因此每次样品被照明的区域都与上一次照明有一定面积的重叠,这种重叠是 PIE 方法的所有优点的根源,它可以提高再现的收敛速度,通过几次迭代运算就可以得到准确的重建像<sup>[10~15]</sup>。

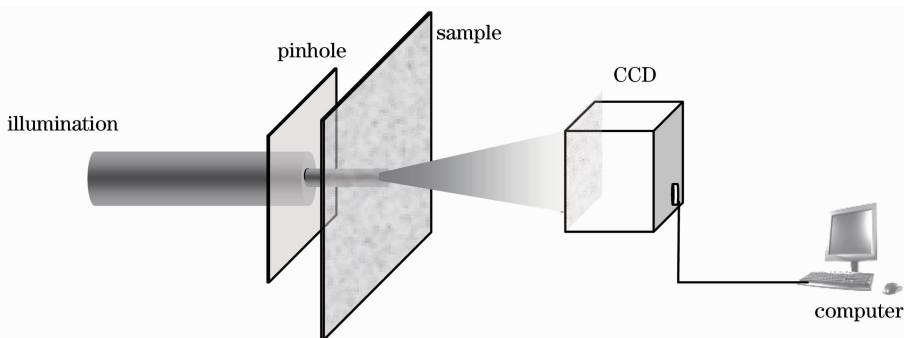


图 1 PIE 方法的原理图

Fig. 1 Principle of PIE imaging method

在使用 PIE 方法进行图像重建时,先给被测量物体一个任意的初始猜想值  $O(x, y)$ ,然后按照下列步骤对记录的实验数据进行处理<sup>[10]</sup>。

1) 计算物体的透射光场  $u_n(x, y)$  并将其传播距离  $z$  后在记录平面上得到光场分布  $U_n(k_x, k_y)$ 。 $u_n(x, y)$  为照明光  $P(x, y)$  和物体的透射函数  $O_n(x, y)$  的乘积。

2) 将  $U_n(k_x, k_y)$  的模用所记录的  $I_n(k_x, k_y)$  的平方根代替而保持相位不变,得到一个新的衍射光场  $U'_n(k_x, k_y)$ 。

3) 利用菲涅耳衍射公式把  $U'_n(k_x, k_y)$  反向传播到物平面,得到新的透射光场  $U_n(x, y)$ 。

4) 将  $O_n(x, y)$  进行如下更新,得到新的物体猜

测值:

$$O_{n+1}(x, y) = O_n(x, y) + [U'_n(x, y) - U_n(x, y)] \times \frac{P^*(x, y) |P(x, y)|}{[P(x, y)^2 + \beta] |P_{\max}(x, y)|}, \quad (1)$$

式中  $\beta$  为一个实数以避免分母为零,一般取值为  $0 \sim 1$  之间。

5) 回到 1) 步重复迭代计算,直到得到满意的结果为止。

## 3 外周衍射光斑丢失对 PIE 成像的影响

当物体的衍射能力较弱时,衍射斑中心的强度将远远大于其外周的强度,为了使 CCD 不发生饱和

效应只能采用较短的曝光时间,此时由于外周光斑的亮度达不到最低的量化阈值而被记录为 0。所以 CCD 的记录过程相当于一个低通滤波过程,很容易造成重建像分辨率的降低,并在相位像和强度像之间产生串扰。以如图 2 所示的模拟计算对上述过程进行更为直观的展示。图 2(a)和(b)被用来模拟样品的振幅透射率和相位透射率函数,两图的尺寸皆为  $7.6\text{ mm} \times 7.6\text{ mm}$ ,当波长为  $0.6328\text{ }\mu\text{m}$  的氦氖激光穿过直径  $0.7\text{ mm}$  的小孔并照明在此样品上时,在样品后  $15\text{ cm}$  处的衍射场强度如图 2(c)所

示。图 2(d)是当假定 CCD 的记录阈值为图 2(c)最大值的  $1/65536$  时(16 bit 量化),所得到的记录结果,原来强度很弱的外周衍射光已变为零。图 2(e)和(f)是用 PIE 方法从图 2(d)重建的图像的振幅和相位,和图 2(a)相比较可以发现重建图像中很多细节部分都已经丢失,这是由量化后强度很弱的高阶衍射光丢失引起的。仔细观察会发现图 2(e)中的强度像出现了相位像的影子,这和低通滤波的效果很相似。利用 PIE 方法从图 2(c)重建出的图像同图 2(a)和(b)完全相同,这里没有具体给出。

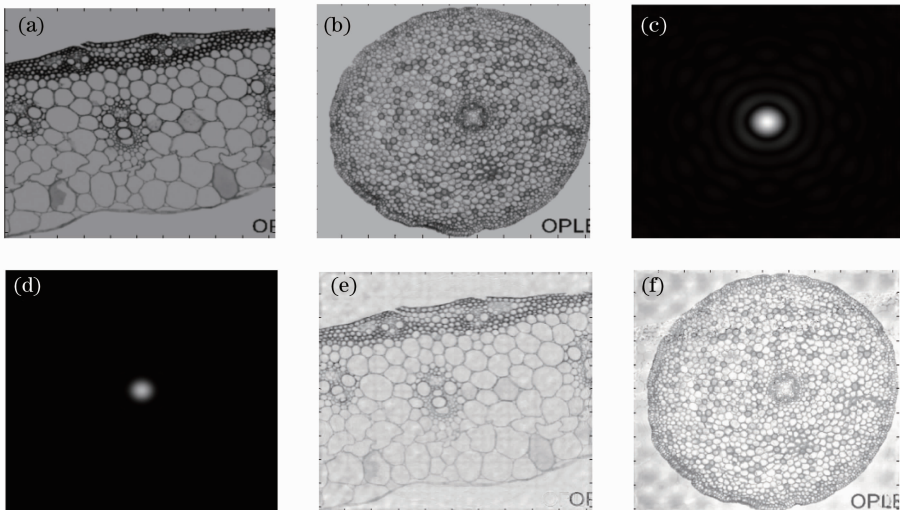


图 2 (a)模拟振幅分布; (b)模拟相位分布; (c)远场衍射斑; (d)量化后的衍射斑; (e)量化后再现的振幅; (f)量化后再现的相位

Fig. 2 (a) Amplitude for simulation; (b) phase for simulation; (c) far-field diffraction pattern; (d) digitized diffraction pattern; (e) reconstructed amplitude; (f) reconstructed phase

#### 4 中心光斑饱和对 PIE 成像质量的影响

CCD 所记录的外周衍射光的准确度随着照明光强度增加或 CCD 曝光时间延长而明显提高。照明光越强或曝光时间越长,愈多的高阶衍射光将会被记录,但零级光和小角度衍射光的光强也会同比例增加,并超过 CCD 的动态范围而在衍射斑的中心发生饱和。图 3(a)和(b)给出了曝光时间比图 2(c)长 3 倍与 6 倍时所得到的散射斑。可以看出随着曝光时间的延长,原来比较暗的外周大角度衍射光被更多地记录,但同时在散射斑的中心位置越来越多的小角度衍射光发生了饱和。图 3(c)~(f)给出了用现有的 PIE 方法从部分饱和的数据所得到的重建结果。说明现有的 PIE 重建理论不能利用部分饱和的数据进行图像重建。原因在于现有 PIE 理论的第 2)步中需要将计算所得到的数据用实际记

录的数据来替换,但由于饱和区域的信息是错误的,替换不可能产生正确的重建像。

#### 5 从部分饱和的数据获得准确重建像

当 CCD 位于物体的远场时,其所记录的散射斑是透射光场的夫琅禾费衍射,数学上是物体透射函数和照明光场的傅里叶变换之间的卷积。物体所有的高频和低频信息被卷积运算混合在整个 CCD 记录平面上,因此部分像素区域发生数据饱和并不引起相关信息的直接丢失,饱和区域的数据所包含的物体信息也被同时包含在其他未饱和的区域内。所以在迭代重建过程中,将未饱和区域的数据进行直接替换,而对饱和区域的数据不做任何处理,饱和区域的信息应该会逐步得到完整恢复。根据这个思路,对现有的 PIE 重建理论略做修改,从中心饱和和衍射斑数据进行图像重建可以按照下述步骤进行。

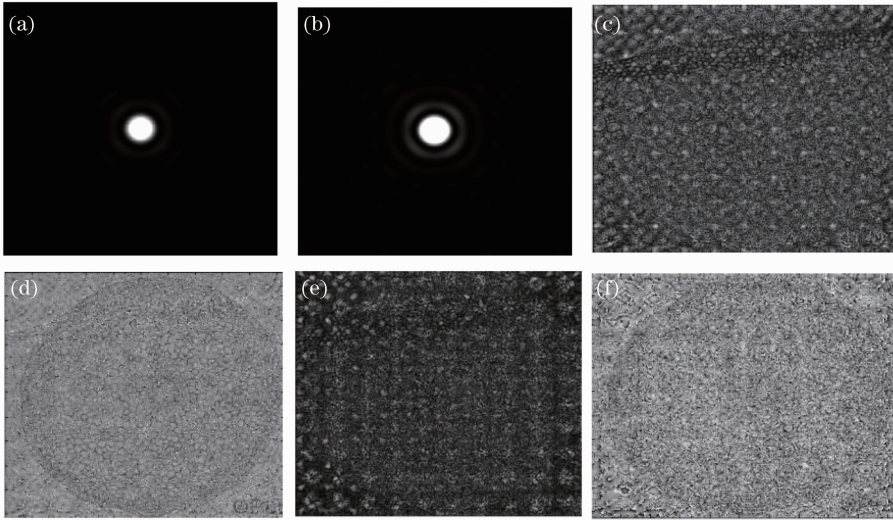


图 3 (a)三倍曝光时间的衍射斑；(b)六倍曝光时间的衍射斑；(c)三倍曝光时间再现的振幅；(d)三倍曝光时间再现的相位；(e)六倍曝光时间再现的振幅；(f)六倍曝光时间再现的相位

Fig. 3 (a) Diffraction patterns with three-times exposure time; (b) diffraction patterns with six-times exposure time; (c) reconstructed amplitude image from (a); (d) reconstructed phase image from (a); (e) reconstructed amplitude image from (b); (f) reconstructed phase image from (b)

1) 给出样品的任意的猜测值  $O(x, y)$ ，然后根据菲涅耳衍射公式，计算传播距离  $z$  后在记录平面上的光场分布  $U_n(k_x, k_y)$ 。

2) 用记录的光强信息中未饱和部分的光强  $I_n(k_x, k_y)$  的平方根来代替  $|U_n(k_x, k_y)|$ ，饱和数据区域中计算值小于 CCD 动态范围的上限  $I_0$  的部分的强度用  $I_0$  代替，同时保持所有数据的相位不变而

组成新的散射光场函数  $U'_n(k_x, k_y)$ 。

3) 利用菲涅耳衍射公式把  $U'_n(k_x, k_y)$  传播到物平面得到新的透射光场  $U_n(x, y)$ 。

4) 根据(1)式进行更新，并作为下一次的猜测值，直到得到符合要求的图像。

图 4 为改进后算法的流程图，从中可以看出除了在 CCD 靶面上的更新外，与原算法相比改动不大。

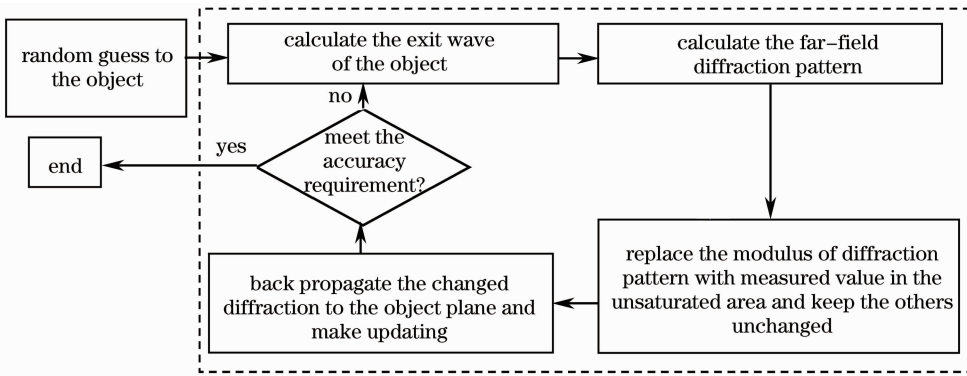


图 4 图像重建流程图

Fig. 4 Flow chart for image reconstruction

饱和区域的数据表明这个区域的数值应该大于 CCD 动态范围的上限  $I_0$  (对于 8 位 CCD,  $I_0 = 255$ )，这是第 2) 步对饱和区域数据进行相应更新的原因。图 5 为利用上述方法由图 3(a) 和 (b) 所获得的重建像，它们和原来所用的模拟物体的振幅和相位几乎相同，而且质量要比未饱和数据的重建像图 2 好很多，特别是在图像的细节部分。

为了对图像的重建精度进行量化的分析和对比，用相对误差公式来分析重建图像的质量：

$$E = \frac{\sum [|O(x, y)| - |g(x, y)|]^2}{\sum |g(x, y)|^2}, \quad (2)$$

式中  $O(x, y)$  为再现所得到的复振幅分布， $g(x, y)$  为样品的实际复振幅分布，计算所得的误差随着迭代次数的变化在图 6 中给出。图 6(a) 给出了利用

发生饱和的散射斑直接再现所得到图像的误差,其中 error1 为六倍曝光时间所获得重建图像的误差,误差值为 28.8%,error2 为三倍曝光时间时重建像的误差,误差值为 27.2%。由于误差很大,所以重建的图像基本体现不了原物体的任何有用信息,这点可以从图 3 中的再现结果直接看出。图 6(b) 为散射斑未饱和时用现有方法所得的重建像误差和散射斑饱和时用重建方法的重建误差,其中未饱和条

件下的图像误差 error1 为 5.21%,从上文中知道这是由于量化引起强度较弱的高阶散射光丢失所造成的;利用重建方法,从三倍曝光时间的部分饱和和散射斑所获得的图像的误差 error2 为 1.8%,六倍曝光时间的误差 error3 为 0.73%。图像质量提高的原因在于随着曝光的时间增加,愈来愈多的高阶衍射光被准确记录,因此更多的图像细节可以得到清晰再现。

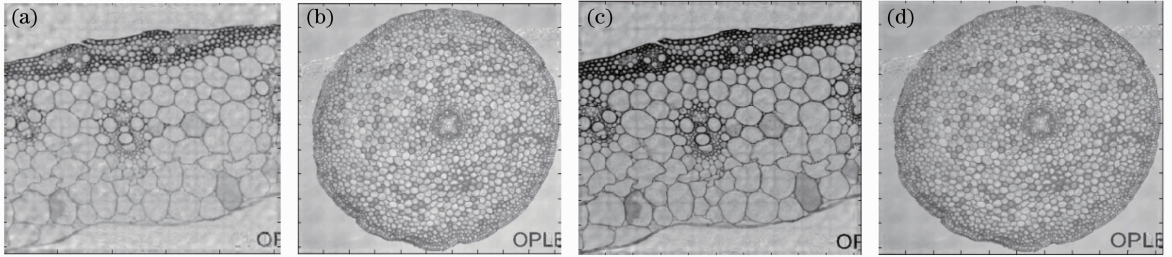


图 5 三倍曝光时间饱和后处理的(a)振幅和(b)相位;六倍曝光时间饱和后处理的(c)振幅和(d)相位

Fig. 5 Reconstructed (a) amplitude and (b) phase from the saturated data of three-times exposure time; reconstructed (c) amplitude and (d) phase from the saturated data of six-times exposure time

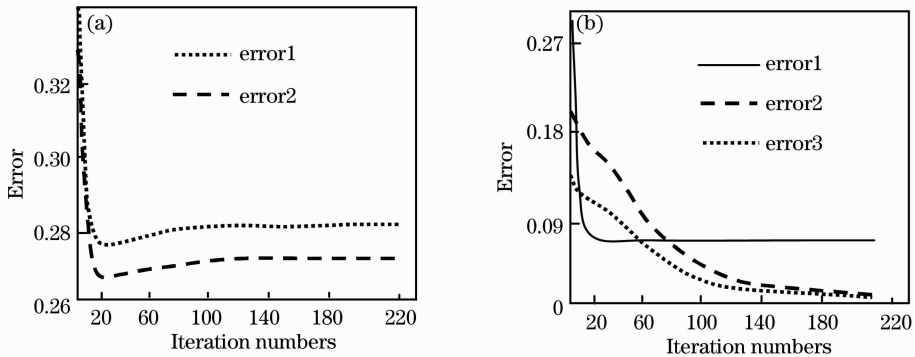


图 6 (a)现有方法利用饱和数据的重建误差;(b)未饱和数据的重建误差和新方法利用饱和数据的重建误差

Fig. 6 (a) Reconstruction errors of common method with saturated data; (b) reconstruction error of new method with saturated data

在现有的 PIE 方法中,为了尽量降低 CCD 饱和效应的影响,往往先用较短的曝光时间来记录中心亮斑,然后逐步增加曝光时间来记录外周衍射光斑,最后把所有的光斑按照一定的规律拼接起来得到所需要的数据。一次完整的 PIE 测量所需的数据采集时间达 30 min 以上,如此长的记录时间对于光路的稳定性是一个不小的考验,此期间内任何震动或者光束漂移都有可能引起实验失败。另外如此长的记录时间对于样品的稳定性也产生过高的要求,比如新鲜生物样品可能会由于内部水分的蒸发而收缩,即使是普通有机样品在电子束或者 X 射线的长时间照射下也会由于辐射损伤而发生变性甚至是碳化,同样可能引起实验失败。为了对此有一个直观印象,假定现有方法进行 5 次重复记录所需要

的总的数据采集时间为 30 min,要想实验成功必须保证 30 min 内装置和样品都保持不变;而采用本文所建议的方法,则数据采集时间将变为原来的 1/5,即 6 min 左右,只要 6 min 内装置和样品都保持不变即可保证实验成功。同时本方法所用数据为现有方法中最长曝光时间所采集的那幅图像,由于所有的高阶衍射都已经记录,因此所得到的重建像的分辨率不会降低。所以本文方法可以在不影响分辨率的情况下大幅度缩短曝光时间并降低对实验系统和样品稳定性的要求。

图 5 和图 6 的结果和理论分析符合很好,完全验证了猜测,但这并不意味着曝光时间愈长愈好。图 7 是将曝光时间进一步增大到 8 倍和 10 倍时由散射斑所获得的重建像,每个图中插入的小图为发

生饱和的散射斑。从中可以清楚地看到,此时提出的方法也得不到准确的再现像。这是因为随着曝光时间的增加,散射斑中间的饱和区域明显变大,由于饱和区域的数据需要在迭代过程用未饱和区域的数据信息来重建,当饱和发生的区域大到一定程度以后,需要重建的信息量将大于已知信息量,这时图像

的重建将失败。在实际的实验中饱和区域的大小需要根据具体实验参数决定。简单地说,照明光的空空间频谱宽度愈宽则可饱和的比例愈大,当然还必须同时考虑 CCD 的总面积和样品的结构分布情况,很难有一个理论上的统一标准。

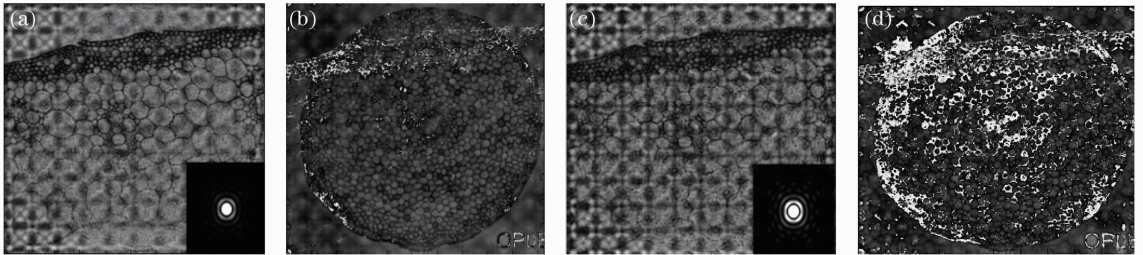


图 7 八倍曝光时间处理后的再现(a)振幅和(b)相位;十倍曝光时间的处理后的再现(c)振幅和(d)相位

Fig. 7 Reconstructed (a) amplitude and (b) phase images of eight-times exposure time; reconstructed (c) amplitude and (d) phase images of ten-times exposure time

## 6 结 论

分析了 CCD 记录时外周高阶衍射光丢失和中心衍射光斑饱和和效应对 PIE 重建像质量的影响。指出在数据未饱和的情况下,主要误差来源于强度较弱的高阶衍射光的丢失,使再现像丢失细节信息。而在照明光较强或者曝光时间较长时,原来强度较弱的高阶衍射光可以很好地得以记录。但由于中心部分的数据发生饱和,直接利用现有的 PIE 方法进行重建将得不到理想的重建像。而采用本文所提出的改进方法,可以在一定条件下从部分饱和的数据准确重建出原来物体的相位和振幅,从而在同等条件下可以再现出更多的细节结构。和现有的方法相比较,该改进处理方法可以在减少数据采集时间和数据量的情况下得到分辨率较高的重建图像。

## 参 考 文 献

- 1 B. Abbey, K. A. Nugent, G. L. Williams *et al.*. Keyhole coherent diffractive imaging [J]. *Nature Physics*, 2008, **4**(5): 394~398
- 2 J. C. H. Spence, U. Weierstall, M. Howells *et al.*. Coherence and sampling requirements for diffractive imaging [J]. *Ultramicroscopy*, 2004, **101**(2-4): 149~152
- 3 P. Thibault, M. Dierolf, A. Menzel *et al.*. High-resolution scanning X-ray diffraction microscopy [J]. *Science*, 2008, **321**(5887): 379~382
- 4 O. El Gawhary, N. Kumar, S. F. Pereira *et al.*. Performance analysis of coherent optical scatterometry [J]. *Appl. Phys. B*, 2011, **105**(4): 755~781

- 5 U. Weierstall, Q. Chen, J. C. H. Spence *et al.*. Image reconstruction from electron and X-ray diffraction patterns using iterative algorithms: experiment and simulation [J]. *Ultramicroscopy*, 2002, **90**(2-3): 171~195
- 6 J. R. Fienup. Phase retrieval algorithms: a comparison [J]. *Appl. Opt.*, 1982, **21**(15): 2758~2769
- 7 J. M. Rodenburg. Ptychography and related diffractive imaging methods [J]. *Advances in Imaging Electron Phys.*, 2008, **150**: 87~184
- 8 J. M. Rodenburg. A simple model of holography and some enhanced resolution methods in electron microscopy [J]. *Ultramicroscopy*, 2001, **87**(3): 105~121
- 9 C. Liu, T. Walther, J. M. Rodenburg. Influence of thick crystal effects on ptychographic image reconstruction moveable illumination [J]. *Ultramicroscopy*, 2009, **109**(10): 1263~1275
- 10 H. M. L. Faulkner, J. M. Rodenburg. Movable aperture lensless transmission microscopy: a novel phase retrieval algorithm [J]. *Phys. Rev. Lett.*, **93**(2): 023903
- 11 J. M. Rodenburg, A. C. Hurst, A. G. Cullis. Transmission microscopy without lenses for objects of unlimited size [J]. *Ultramicroscopy*, 2007, **107**(2-3): 227~231
- 12 H. M. L. Faulkner, J. M. Rodenburg. Error tolerance of an iterative phase retrieval for moveable illumination [J]. *Ultramicroscopy*, 2005, **103**(2): 153~164
- 13 F. Hübner, J. M. Rodenburg, A. M. Maiden *et al.*. Wavefront phase retrieval in transmission electron microscopy via ptychography [J]. *Phys. Rev. B*, 2010, **82**(12): 121415
- 14 P. Thibault, M. Dierolf, O. Bunk *et al.*. Probe retrieval in ptychographic coherent diffractive imaging [J]. *Ultramicroscopy*, 2009, **109**(4): 338~343
- 15 Pan Xingchen, Lin Qiang, Liu Cheng *et al.*. Influence of the partial coherence to the PIE imaging method [J]. *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica*, 2012, **42**(9): 889~898  
潘兴臣, 林强, 刘诚等. 相干性对 PIE 成像方法的影响 [J]. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2012, **42**(9): 889~898

栏目编辑: 李文洁