

相干调制成像技术的迭代收敛性及重建唯一性

潘兴臣^{1,2}, 刘诚^{1,2*}, 朱健强^{1,2}

¹中国科学院高功率激光物理重点实验室, 中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800;

²中国科学院中国工程物理研究院高功率激光物理联合实验室, 上海 201800

摘要 将相干调制成像(CMI)迭代过程等效为梯度搜索算法,建立了 CMI 收敛模型,从解方程角度提出为保证重建结果的唯一性需要满足的基本条件,即有调制板时光斑非 0 点数是无调制板时光斑非 0 点数的 2 倍,或有调制板时放大 λL (λ 为波长, L 为衍射距离)倍后的调制板频谱截止宽度与无调制板时光斑截止宽度的比值至少为 0.414。通过模拟计算进行了很好的验证。该研究为 CMI 的进一步优化提供了理论依据。

关键词 成像系统; 相位恢复; 相干衍射成像; 相干调制成像; 迭代算法

中图分类号 O438

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.1811001

Iterative Convergence and Reconstruction Uniqueness of Coherent Modulation Imaging

Pan Xingchen^{1,2}, Liu Cheng^{1,2*}, Zhu Jianqiang^{1,2}

¹Key Laboratory of High Power Laser and Physics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;

²National Laboratory on High Power Laser and Physics, China Academy of Engineering Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China

Abstract The iteration progress of coherent modulation imaging (CMI) is equivalent to gradient search algorithm, and a CMI convergence model is established. From the perspective of solving equations, the basic conditions to ensure the uniqueness of reconstruction results are put forward, i. e., the number of non-zero points of the diffraction pattern with a modulation plate is twice as much as that without the modulation plate, or the ratio of the spectrum cut-off width after enlarging λL (λ is the wavelength and L is the diffraction distance) times with the modulation plate to the spectrum cut-off width without the modulation plate is at least 0.414. It is verified by simulation. This study provides a theoretical basis for further optimization of CMI.

Key words imaging systems; phase retrieval; coherent diffractive imaging; coherent modulation imaging; iterative algorithm

OCIS codes 110.2960; 100.5070; 120.5050

1 引 言

作为一种无透镜相位成像技术,相干衍射成像(CDI)^[1]具有结构简单、理论上能够达到衍射极限分辨率的优势,其不需要成像透镜,成为 X 射线和电子束成像领域中极为重要的成像方法,但传统的 Gerchberg-Saxton(GS)算法^[1]等常面临收敛性问

题,这严重制约了其应用范围,基于照明光横向扫描且相邻扫描位置保留一定的重叠面积的方式,PIE (ptychographic iterative engine)^[2-5]技术可以很好地解决传统 CDI 算法所面临的收敛性差的问题,具备视场无限拓展的特性,在相位成像^[6-9]、元件检测^[10-11]、超快测量^[12-13]、波前诊断^[14]等领域得到快速发展,但该技术需要一定的扫描时间,因此不能用

收稿日期: 2020-05-02; 修回日期: 2020-05-04; 录用日期: 2020-05-14

基金项目: 国家自然科学基金(61827816, 11875308, 61675215)、中国科学院科研仪器设备研制项目(YJKYYQ20180024)、上海市“科技创新行动计划”项目(19142202600)、中国科学院战略性先导科技专项(A类)(XDA25020306, XDA25020105)

* E-mail: chengliu@siom.ac.cn

于单次测量。虽然利用多束同时照明的方式可以实现单次曝光 PIE^[15-17],但这牺牲了探测器的有效数值孔径,成像质量和适用性仍然有限。相干调制成像(CMI)通过引入一块分布已知的波前调制板^[18-19],可以实现在单次曝光下对入射波前的快速重建,解决了单次测量下的收敛性问题。PIE技术是精确标定波前调制板的主要技术,目前已经在可见光^[19]、X射线^[18]等领域得到了实际应用。相比于传统 CDI 技术,CMI 的收敛性和重建能力得到了显著增强,但关于 CMI 收敛性的理论模型一直没有被提出,而根据经验,CMI 中的波前调制器一般采用二元随机相位板,其强调制作用被认为是收敛性的根本保证,但调制作用越强意味着二元随机相位板的结构越复杂,加工能力和标定能力要求相应地提高。实际中人们发现采用连续型弱调制^[20]、纯振幅调制和部分衍射光^[21]依然能够实现波前重建,这对常规认知发出了挑战,因此急需从理论上解释待测光、波前调制板和探测器采样等参数对 CMI 的影响,进而开展相关优化研究。

本文通过理论推导建立了 CMI 收敛性模型,将 CMI 算法等效为梯度搜索算法,揭示了 CMI 算法的基

本收敛原理,同时从解方程的角度出发,分析了待测光稀疏特性、调制板随机特性和频谱特性、采样间隔等因素对重建过程的影响,提出了量化指标,通过模拟计算进行了验证。该研究为 CMI 的后续优化指明了方向。

2 CMI 基本算法

基于相位调制法实现单次曝光波前测量的基本光路如图 1(a)所示,其结构主要包括光斑探测器、波前调制板和会聚透镜,待测光经过会聚透镜后先会聚后发散,焦平面在波前调制板之前,探测器记录单幅衍射光斑 I ,探测器与波前调制板之间的距离为 L ,波前调制板与焦平面之间的距离为 T ,其中调制板的分布 d 已知。光路中主要有 3 个平面:入射窗面(焦平面)、波前调制面和光斑记录面,经过待测样品的波的主要能量集中在照明光的焦点上,因此可认为其通过一个孔函数,孔外能量为 0。CMI 算法的迭代过程和基本 CDI 算法类似,先对待测光进行初始猜测,假定第 k 次迭代时调制板照明光、调制板出射光和计算得到的衍射光斑分别为 g_k 、 φ_k 和 E_k 。迭代始于对入射窗出射波 ψ_1 的随机初始猜测,第 k 次迭代过程如下。

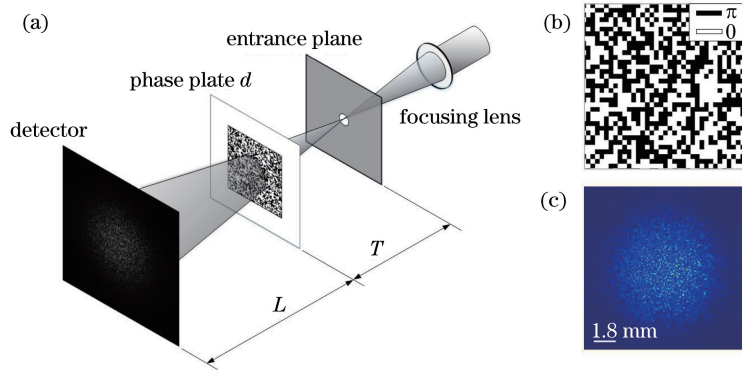


图 1 CMI 算法的基本光路、采用的二元随机相位板的相位分布和典型的衍射光斑。(a) CMI 算法的基本光路;

(b)常采用的二元随机相位板的相位分布;(c)典型的衍射光斑

Fig. 1 Basic optical path of CMI algorithm, phase distribution of adopted binary random phase plate, and representative diffraction pattern. (a) Basic optical path of CMI algorithm; (b) phase distribution of adopted binary random phase plate; (c) representative diffraction pattern

1) 计算入射窗出射波 ψ_k 传播距离 T 后到达相位板平面的光束分布 $g_k = \text{FFT}\{\psi_k, T\}$,此时相位板的出射光为 $\varphi_k = g_k d$,将其传播到 CCD 平面得到 $E_k = |E_k| e^{i\varphi_k} = \text{FFT}\{\varphi_k, L\}$,其中 $\text{FFT}\{\cdot\}$ 表示傅里叶变换, φ_k 为 E_k 的相位。

2) 利用记录到的振幅分布代替 E_k 的振幅并保持相位不变得到 $E'_k = |F| e^{i\varphi_k}$,其中 $|F| = \sqrt{I}$ 。

3) 将 E'_k 逆传播到相位板面,得到更新后的相

位板出射光 $\varphi'_k = \text{FFT}^{-1}\{E'_k, L\}$, $\text{FFT}^{-1}\{\cdot\}$ 表示傅里叶逆变换。

4) 对相位板照明光进行更新,得到更新后的相位板照明光 g'_k :

$$g'_k = g_k + \gamma \frac{d^*}{|d|_{\max}^2} (\varphi'_k - \varphi_k), \quad (1)$$

式中: γ 为自选系数; d^* 为 d 的共轭。

5) 将 g'_k 逆传播到入射窗面得到 ψ'_k ,若满足空间限制条件:

$$\psi_{k+1} = \psi_k C + \eta(\psi'_k - \psi_k)(1 - C), \quad (2)$$

得到更新后的入射窗面波前分布,同时将 ψ_{k+1} 作为下一次迭代过程的初始值,(2)式中 C 为焦平面孔函数, η 为自选常数。

6) 重复步骤 1)~5),并计算误差:

$$B = V^{-2} \sum_u |E_k - E'_k|^2 = V^{-2} \sum_u ||E_k| - |F||_k|^2, \quad (3)$$

直到获得误差满足要求的波函数,(3)式中 V 为计算矩阵行列数, u 表示光斑探测面矩阵点坐标。

根据经验,实际 CMI 算法所采用的波前调制板为二元随机相位板,其为纯相位型,可以理解为随机选择的棋盘结构相位板的一半单元格,令其相位差为 π ,另外一半的相位差为 0,典型结构如图 1(b)所示,其对应的衍射光分布如图 1(c)所示。(1)式可理解作为一种强约束条件,当重建得到的相位板照明光 g_k 有微小差异时,经过极强的调制后,该误差将会得到放大,进而降低算法对重建波前误差的容忍度,提高收敛速度,因此 CMI 算法具备极强的波前重建能力,通常在几十次迭代后即可得到收敛结果,其主要特点是引入了波前调制板和焦平面空间约束条件。此外,波前调制板不仅局限于二元随机相位板,理论上也适用于振幅调制和弱相位调制,同时图 1 所示的焦点位置可以是任意位置,这同样适用于不存在焦点(或者说在无穷远处)的情况。

3 CMI 算法收敛性解释

高收敛性是 CMI 算法的关键特点,借鉴梯度搜索算法的基本思路,对 CMI 算法的收敛性进行理论推导,对于光束传播过程,以一维矩阵为例, x 代表入射窗面和相位板面的空间位置,各个平面之间的波前分布满足:

$$E_k(u) = \text{FFT}\{\varphi_k(x)\} = |E_k(u)| e^{i\varphi_k}, \quad (4)$$

$$E'_k(u) = |F(u)| e^{i\varphi_k} = |F(u)| |E_k(u)| / |E_k(u)|, \quad (5)$$

$$\varphi'_k(x) = \text{FFT}^{-1}\{E'_k(u)\}. \quad (6)$$

同时根据(3)式,第 k 次迭代的误差可以表示为

$$B = N^{-1} \sum_u |E_k(u) - E'_k(u)|^2 = N^{-1} \sum_u ||E_k(u)| - |F(u)||_k|^2. \quad (7)$$

由于考虑一维情况,因此总像素数用 N 表示,令 $\varphi(x)$ 为相位板出射波在任意位置 x 处的恢复值,根据惠更斯-菲涅耳原理,CCD 面的衍射光可以

认为是相位板面无数个点发出球面波的相干叠加,即 CCD 面 u 位置处的波前 $E_k(u) = \sum_x \varphi_k(x_j) \exp[ik_0 r(u, x_j)]$,其中 $r(u, x_j)$ 表示 u 位置和 x_j 位置的距离, k_0 为波数,而总的误差 $B = N^{-1} \sum_u \left| \sum_x \varphi_k(x_j) \exp[ik_0 r(u, x_j)] - E'_k(u) \right|^2$,可以将 B 认为是关于 $\varphi(x)$ 的函数,即

$$B \propto \varphi(x), \quad (8)$$

且存在 N 个相互独立的对应关系,即

$$B \propto \varphi(x_j), \quad j=0,1,2,\dots,N-1, \quad (9)$$

B 为所有 x_j 处的误差之和,且随着 $\varphi(x)$ 的变化而变化。

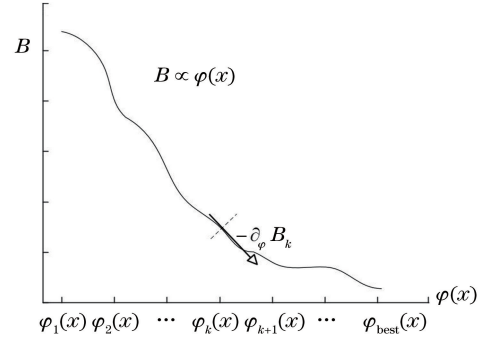


图 2 随迭代次数的增加而变化的 $\varphi(x)$ 与 B 的对应关系
Fig. 2 Relationship between B and $\varphi(x)$ varying with increasing iterations

假定 B 随着迭代次数的增加逐步下降,则(8)式可以用图 2 来表示,根据泰勒级数的定义,可以将 B 在 $\varphi_k(x)$ 点展开并保留前两项:

$$B \approx B_k + [\varphi(x) - \varphi_k(x)] \sum_x \partial_\varphi B_k, \quad (10)$$

式中: ∂_φ 为求偏导; B_k 为 $\varphi_k(x)$ 处的误差,可以得到 $B=0$ 时 $\varphi(x)$ 对应的值为

$$\varphi_{\text{best}}(x) \approx \tilde{\varphi}_k(x) = \varphi_k(x) - \frac{B_k}{\sum_x \partial_\varphi B_k} = \varphi_k(x) - \frac{B_k}{\sum_x (\partial_\varphi B_k)^2} \partial_\varphi B_k. \quad (11)$$

在迭代过程中,为了能够更快地得到 $\varphi_{\text{best}}(x)$,可以在 k 次迭代时,对当前值 $\varphi_k(x)$ 按照(11)式进行进一步优化得到 $\tilde{\varphi}_k(x)$,即利用

$$\tilde{\varphi}_k(x) = \varphi_k(x) - \rho_k \partial_\varphi B_k, \quad (12)$$

按照正确的方向快速修正,以获得迅速接近 $\varphi_{\text{best}}(x)$ 的 $\tilde{\varphi}_k(x)$, (12)式中 ρ_k 为修正幅度,可以理解为步长, ρ_k 可以表示为

$$\rho_k = \frac{B_k}{\sum_x (\partial_\varphi B_k)^2}. \quad (13)$$

根据(7)式,可得到

$$\partial_{\varphi} B = \frac{\partial B}{\partial \varphi(x)} = 2N^{-1} \sum_u [|E(u)| - |F(u)|] \frac{\partial |E(u)|}{\partial \varphi(x)}, \quad (14)$$

考虑到 $\frac{\partial}{\partial \varphi(x)}$ 为对 $\varphi(x)$ 这一个点的偏微分, $\frac{\partial E(u)}{\partial \varphi(x)}$ 可写为

$$\frac{\partial E(u)}{\partial \varphi(x)} = \frac{\partial}{\partial \varphi(x)} \sum_y \varphi(y) \exp(-i2\pi uy/N) = \frac{\partial \varphi(x) \exp(-i2\pi ux/N)}{\partial \varphi(x)} = \exp(-i2\pi ux/N), \quad (15)$$

因此有

$$\frac{\partial |E(u)|}{\partial \varphi(x)} = \frac{\partial [|E(u)|^2]^{1/2}}{\partial \varphi(x)} = \frac{1}{2|E(u)|} \frac{\partial |E(u)|^2}{\partial \varphi(x)} = \frac{E(u) \exp(i2\pi ux/N) + E^*(u) \exp(-i2\pi ux/N)}{2|E(u)|}. \quad (16)$$

同时考虑到(5)式,则(14)式可变为

$$\begin{aligned} \partial_{\varphi} B &= 2N^{-1} \sum_u [|E(u)| - |F(u)|] \frac{E(u) \exp(i2\pi ux/N) + E^*(u) \exp(-i2\pi ux/N)}{2|E(u)|} = \\ &N^{-1} \sum_u [|E(u)| - |F(u)|] \frac{E(u) \exp(i2\pi ux/N)}{|E(u)|} + \\ &N^{-1} \sum_u [|E(u)| - |F(u)|] \frac{E^*(u) \exp(-i2\pi ux/N)}{|E(u)|} = \\ &N^{-1} \sum_u \left[E(u) - \frac{|F(u)|E(u)}{|E(u)|} \right] \exp(i2\pi ux/N) + \\ &N^{-1} \sum_u \left[E^*(u) - \frac{|F(u)|E^*(u)}{|E(u)|} \right] \exp(-i2\pi ux/N) = \\ &N^{-1} \sum_u [E(u) - E'(u)] \exp(i2\pi ux/N) + N^{-1} \sum_u [E^*(u) - E'^*(u)] \exp(-i2\pi ux/N). \end{aligned} \quad (17)$$

考虑到离散傅里叶变换的定义,(17)式变为

$$\partial_{\varphi} B = \varphi(x) - \varphi'(x) + [\varphi(x) - \varphi'(x)]^*, \quad (18)$$

式中: $\varphi'(x)$ 为 $\varphi(x)$ 的一阶导数。此时假定 $\varphi(x)$ 为实数,则

$$\partial_{\varphi} B = 2[\varphi(x) - \varphi'(x)]. \quad (19)$$

根据 Parseval 积分定理中频域积分和空域积分的等效性和(19)式,有

$$\sum_x (\partial_{\varphi} B_k)^2 = \sum_x 4[\varphi_k(x) - \varphi'_k(x)]^2 = 4B_k, \quad (20)$$

则(12)式变为

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_k(x) &= \varphi_k(x) - \partial_{\varphi} B_k/4 = \\ &\varphi_k(x) - [\varphi_k(x) - \varphi'_k(x)]/2. \end{aligned} \quad (21)$$

(21)式是单幅衍射光斑最陡梯度下降法的基本原理,结合(12)式和(21)式,所有的梯度搜索算法都可以表示为

$$\tilde{\varphi}_k(x) = \varphi_k(x) - \rho_k [\varphi_k(x) - \varphi'_k(x)]. \quad (22)$$

(22)式意味着为满足衍射光斑面振幅限制条

件,波前变化量 $\varphi_k(x) - \varphi'_k(x)$ 为误差 B 在当前迭代次数处的梯度变化,将其与合理的步长 ρ_k 相乘并加上初始值 $\varphi_k(x)$ 就可以得到更接近真实分布的 $\tilde{\varphi}_k(x)$ 。

此时考虑 CMI 算法的更新式[(1)式],两边同时乘上 d ,可以得到

$$\tilde{\varphi}'_k = \varphi_k + \gamma \frac{|d|^2}{|d|_{\max}^2} (\varphi'_k - \varphi_k), \quad (23)$$

式中: $\tilde{\varphi}'_k = g'_k d$ 。根据(22)式可得到与梯度搜索算法相同的更新公式,只不过此处步长选择为

$$\rho_k = \gamma \frac{|d|^2}{|d|_{\max}^2}. \quad (24)$$

不过(1)式所示的更新方法并不是唯一的计算方法,可以借鉴 PIE 相关算法进行调整,对应的搜索步长也略有不同,但整体结构是相同的。此时,CMI 算法完全等效为梯度搜索算法,搜索步长由调制板的强度决定。当采用纯相位调制结构时,各个位置搜索步长相同;当采用振幅型和复数型调制结构时,不同点处搜索步长将会有所差异。

4 CMI 重建结果的唯一性

4.1 理论推导

根据标量衍射理论和菲涅耳衍射近似,衍射光

$E(u, v)$ 是待测光 $g(x, y)$ 、调制板函数 $d(x, y)$ 和传递函数 $h(x, y) = \exp\left[j\frac{k_0}{2L}(x^2 + y^2)\right]$ 乘积的卷积,即

$$E(u, v) = A(u, v) \cdot \text{FFT}\{\varphi h\} = A(u, v) \cdot \text{FFT}\{gdh\} \propto \text{FFT}\{(dh^* h) \cdot (gh^* h) \cdot (hh^* h)\} = \text{FFT}\left\{d \exp\left[-j\frac{k_0}{2L}(x^2 + y^2)\right] h\right\} \otimes \text{FFT}\left\{g \exp\left[-j\frac{k_0}{2L}(x^2 + y^2)\right] h\right\} \otimes \text{FFT}\left\{h \exp\left[-j\frac{k_0}{2L}(x^2 + y^2)\right] h\right\} = D \otimes G \otimes H = D \otimes G', \quad (25)$$

式中: h^* 代表 h 的共轭; \otimes 表示卷积; $k_0 = 2\pi/\lambda$; (u, v) 表示 CCD 平面上的坐标; $A(u, v) = \frac{\exp(jkL)}{j\lambda L} \exp\left[j\frac{k_0}{2L}(u^2 + v^2)\right]$ 为衍射系数,由于不影响结果,因此为简化描述对其进行了省略;由于 $\exp\left[-j\frac{k_0}{2L}(x^2 + y^2)\right]$ 等效为一个焦距 L 的透镜因子,因此根据透镜傅里叶变换性质, D 、 G 、 H 分别是 $d(x, y)$ 、 $g(x, y)$ 和 $h(x, y)$ 放大 λL 倍对应的函数; $G' = G \otimes H$ 则为无调制板时的衍射光,当满足夫

琅禾费衍射条件时 D 和 G' 完全对应于 $d(x, y)$ 和 $g(x, y)$ 的频谱,更普遍情况下,实际的衍射光等效为放大 λL 倍后的 D 和无调制板时衍射光的卷积。

根据卷积定义,(25)式可以描述为

$$E(M, N) = \sum_{m, n} D(M - m, N - n) G'(m, n). \quad (26)$$

考虑到实际利用离散的矩阵分析衍射过程,此处用 (M, N) 表示空间坐标 (x, y) 的离散采样坐标,记录的衍射光斑为

$$I(M, N) = \left| \sum_{m, n} D(M - m, N - n) G'(m, n) \right|^2 = \sum_{m, n} D(M - m, N - n) G'(m, n) \cdot \sum_{p, q} D^*(M - p, N - q) G'^*(p, q) = \sum_{m, n} \sum_{p, q} D(M - m, N - n) \cdot D^*(M - p, N - q) \cdot G'(m, n) \cdot G'^*(p, q), \quad (27)$$

式中: D^* 和 G'^* 分别是 D 和 G' 的共轭。由于待测量 G' 是复数,因此 $G'(m, n) = \alpha_{m, n} + i\beta_{m, n}$, 实部 $\alpha_{m, n}$ 和虚部 $\beta_{m, n}$ 都是未知数,将(27)式通过矩阵表示为

$$\mathbf{xT} = \mathbf{b}, \quad (28)$$

式中: \mathbf{x} 是 $G'(m, n)G'^*(p, q)$ 按列展开得到的一维行向量; \mathbf{T} 是 $D(M - m, N - n)D^*(M - p, N - q)$ 按列展开后平移组成的二维矩阵,其中每一列表示特定 (M, N) 下的按列展开项; \mathbf{b} 是 $I(M, N)$ 展开的常数矩阵。假定每个面采样点行列数都是 V , 则(27)式中: \mathbf{x} 是 1 行 V^2 列的向量,包含的未知数个数为 $2V^2$, 阶数为 2 阶, \mathbf{T} 的维度是 V^2 行 V^2 列, \mathbf{b} 的维度为 1 行 V^2 列,因此(28)式可表示为包含 $2V^2$ 个未知数的 V^2 个二阶非线性方程,并且可以通过图 3 来表示。

考虑到自然界中存在的物体在空域和频域中的有限性, D 、 G' 和 I 都包含大量 0 值点,因此展开后,

\mathbf{x} 、 \mathbf{T} 和 \mathbf{b} 都表现出一定的稀疏特性,分别可用稀疏矩阵表示为

$$\mathbf{x} = [0 \ 0 \ \cdots \ 0 \ x' \ 0 \ \cdots \ 0 \ 0], \quad (29)$$

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T' & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & T' & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & T' \end{bmatrix}, \quad (30)$$

$$\mathbf{b} = [0 \ 0 \ \cdots \ 0 \ b' \ 0 \ \cdots \ 0 \ 0], \quad (31)$$

式中: x' 、 T' 和 b' 分别是 \mathbf{x} 、 \mathbf{T} 和 \mathbf{b} 中的非 0 元素。虽然上述方程个数只有未知数数量的一半,但当考虑稀疏特性时,假定 G' 、 D 和 I 的截止宽度分别是 $\Delta_{G'}$ 、 Δ_D 和 Δ_I , 根据卷积特性,则有 $\Delta_I = \Delta_{G'} + \Delta_D$, 且 $\Delta_D = \Delta_D' \lambda L$, 其中 Δ_D' 是调制板的频谱截止宽度,如图 4 所示,绿色圆圈表示无调制板时的衍射光斑 G' , 圆圈①表示调制板频谱放大 λL 倍后恰好和 G' 无交叠,此时光斑 I 值为 0, 此时的光斑 I 用圆圈②表示。因此在采样间隔相同的情况下,为保证

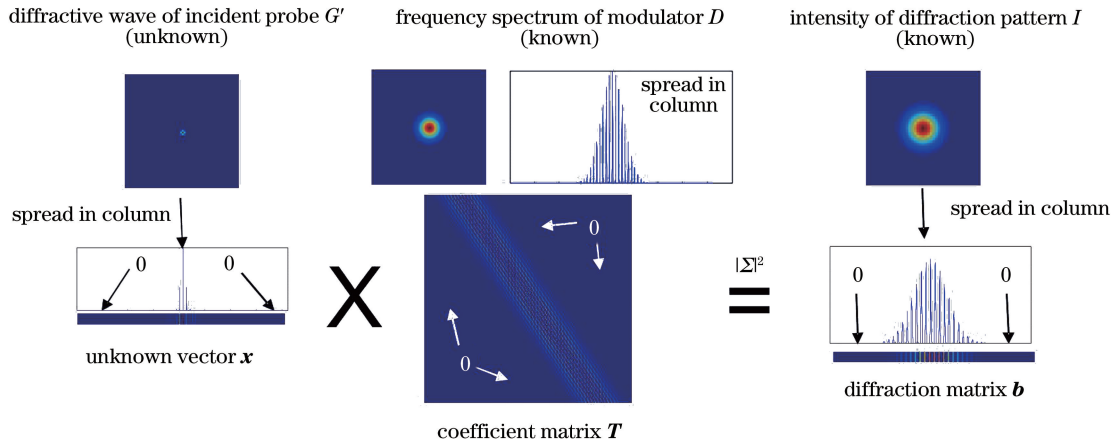


图 3 CMI 光斑生成过程的矩阵表示

Fig. 3 Matrix representation of CMI pattern generation

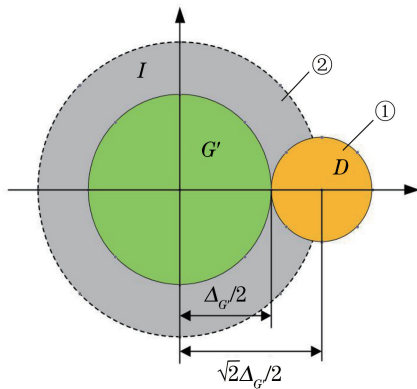


图 4 卷积示意图

Fig. 4 Scheme of convolution

方程数量多于未知数个数,需满足

$$\pi \left(\frac{\Delta_{G'} + \Delta_D}{2} \right)^2 / \tau \geq 2\pi \left(\frac{\Delta_{G'}}{2} \right)^2 / \tau, \quad (32)$$

即

$$\Delta_D \geq (\sqrt{2} - 1) \Delta_{G'} \approx 0.414 \Delta_{G'}, \quad (33)$$

式中: τ 为一个采样点的面积,即 CMI 算法有唯一解时需要满足下面任何一个条件:1) 光斑 I 非 0 点数是无调制板时光斑 G' 非 0 点数的 2 倍及以上; 2) 调制板频谱放大 λL 倍后,其截止宽度与无调制板时光斑 G' 截止宽度 $\Delta_{G'}$ 的比值至少是 0.414; 3) 调制板频谱截止宽度至少是无调制板时光斑 G' 截止宽度 $\Delta_{G'}$ 的 $(\sqrt{2} - 1) / (\lambda L)$ 倍。

为保证 CMI 算法的解唯一性,可以通过增加非 0 采样点数、减小无调制板时待测光光斑宽度和增加调制板频谱宽度来实现。根据上述推论,可得 CMI 算法可以在欠采样下或者丢失部分信息的情况下进行恢复,这点在 CAMI^[21] 算法中已经得到验证; CMI 并非一定需要强散射体作为调制

板,也可以利用弱调制结构,这点在前期实验中也得到了验证^[20];影响唯一性的直接因素是无调制板时待测光在探测器上的截止宽度,因此待测光是球面波还是平行光并没有本质上的区别;传统 GS 算法需要至少两个面约束条件的原因是单个衍射光斑下,方程数量永远等于未知数个数的一半,在不增加其他面限制条件下方程是没有唯一解的。

4.2 模拟验证

为验证上述理论的正确性,进行了相应的模拟验证,采用的光路如图 5 所示。点光源依次经过小孔、生物样品、透镜、波前调制板到达光斑探测器,光源设定为 632.8 nm 相干光,小孔和样品紧贴在一起,样品振幅和相位如图 5(a) 所示;样品出射光经过透镜再次会聚后,到达波前调制板上的照明光分布如图 5(b) 所示;如果采用二元 0、 π 随机相位板,如图 5(c) 插图所示,对应的典型衍射光斑如图 5(e) 所示,其中波前调制板的频谱分布如图 5(c) 所示;当不存在波前调制板时,探测器记录的光斑强度如图 5(d) 所示。样品面和探测器面相对透镜属于物像面关系,因此可以通过调整小孔大小、严格限制 $\Delta_{G'}$ 宽度来确定待测光束的未知数个数。各个面之间的采样间隔都是 12 μm ,计算矩阵大小为 1024×1024 ,衍射距离 $L = 50 \text{ mm}$, $T = 30 \text{ mm}$ 。为验证上述结论,从采样点数、调制板频谱宽度和待测光稀疏性 3 个方面进行验证。需要指出的是,图 5 虽然和图 1 中的光路排布有所不同,但都包含光斑记录面、波前调制面和一个能量集中面(焦平面),因此二者本质上是相同的,核心算法也相同,只不过是不同的实现形式。

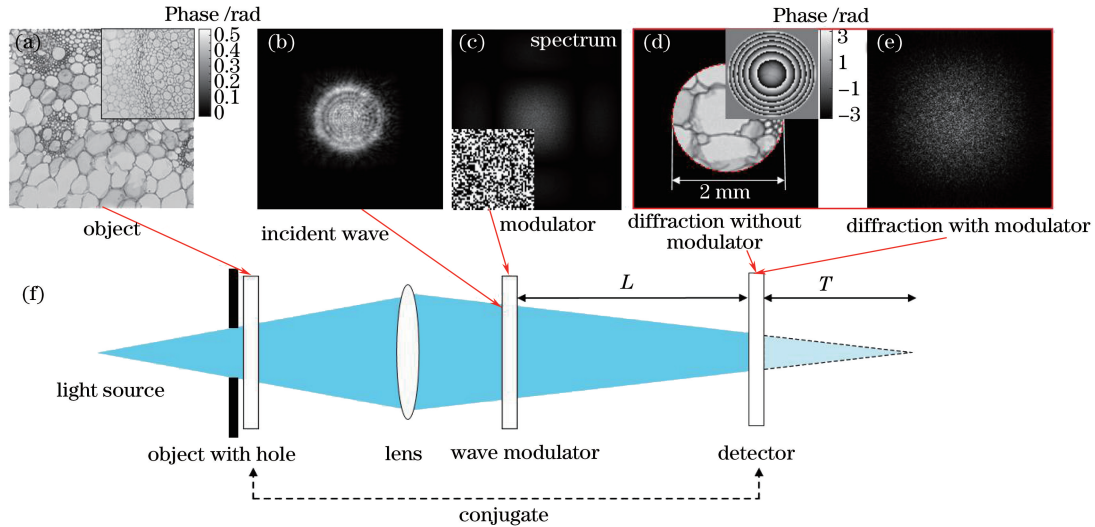


图 5 基本光路和模拟结果。(a)样品振幅和相位;(b)调制板上入射光;(c)调制板频谱和相位分布;
(d)无调制板时探测器记录的光斑(样品的像);(e)有调制板时对应的衍射光斑;(f)基本光路

Fig. 5 Basic optical path and simulation results. (a) Amplitude and phase of sample; (b) incident light of modulation plate; (c) spectrum and phase map of modulation plate; (d) pattern recorded by detector without modulation plate (image of sample); (e) diffraction pattern with modulation plate; (f) basic optical path

4.2.1 光斑有效采样点数

当波前调制板设为基元宽度为 $24 \mu\text{m}$ 的二元随机相位板时,其对应的衍射光斑如图 6(a)所示,此时 $\Delta_{c'} = 2 \text{ mm}$,未知数个数 $\sigma = 10898$,由于调制板 0 级光谱宽度是远大于 $(\sqrt{2} - 1)/(\lambda L)$ 倍的,因此在其 0 级光谱内随机选取 $N_{\text{ratio}} \cdot \sigma$ 个采样点进行恢复, N_{ratio} 分别取 0.2, 1, 2, 5, 所选取的点由图 6(b)~(e)中点阵表示,在迭代过程中,未选取的点认为是未知的,计算的值是多少就认为是多少,仅在标记点处进行振幅更新,经过 10^4 次迭代计算后,

重建的结果分别如图 6(f)~(j)所示,其中图 6(f)为利用全部光斑进行迭代的结果,可以看出:随着采样率的提高,即随着方程数量的增加,重建精度得到提高,其重建误差逐渐降低;当 $N_{\text{ratio}} = 2$,即到达上述推导中的临界点时,重建误差迅速降低到 10^{-4} 量级,重建质量得到显著提升;虽然 $N_{\text{ratio}} = 2$ 相比于 $N_{\text{ratio}} = 5$ 时误差相差 20 多个数量级,但重建质量并没有显著变化; $N_{\text{ratio}} = 1$ 时,重建质量明显变差;当 $N_{\text{ratio}} = 0.2$ 时,无法得到任何结构信息,重建失败。为充分验证 $N_{\text{ratio}} = 2$ 是 CMI 重建唯一性的临界点,

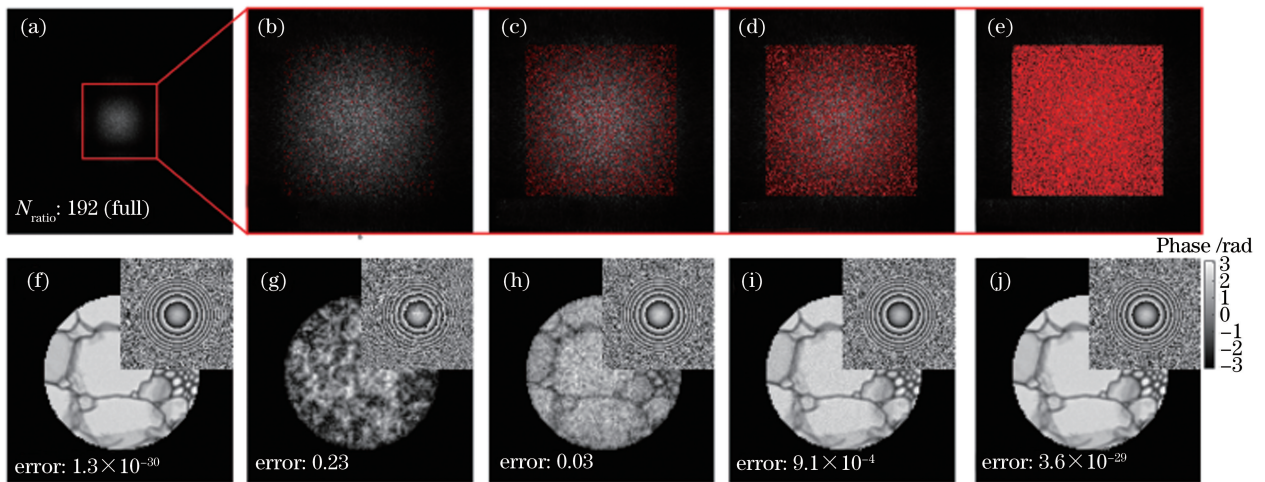


图 6 不同方程数量下的重建结果。(a)完整的衍射光斑;(b)~(e) N_{ratio} 为 0.2, 1, 2, 5 时对光斑的随机采样示意图;(f)~(j)图 6(a)~(e)对应的重建结果

Fig. 6 Reconstructed results with different number of equations. (a) Complete diffraction pattern; (b)~(e) pattern random sampling when N_{ratio} is 0.2, 1, 2, and 5, respectively; (f)~(j) reconstructed results corresponding to Figs. 6(a)~(e)

以 0.1 为步长进行了系列模拟重建,重建结果误差曲线如图 7 中实线所示,可以看出,当 $N_{\text{ratio}} \geq 2$ 时,误差基本都是接近 0 的,为更清楚地看出拐点,对该误差曲线进行了求导,结果如图 7 中虚线所示,可以看出:当 $N_{\text{ratio}} \geq 2$ 时,重建结果的误差基本不再变化且趋于稳定,而 $N_{\text{ratio}} < 2$ 时,重建误差变化较为剧烈。

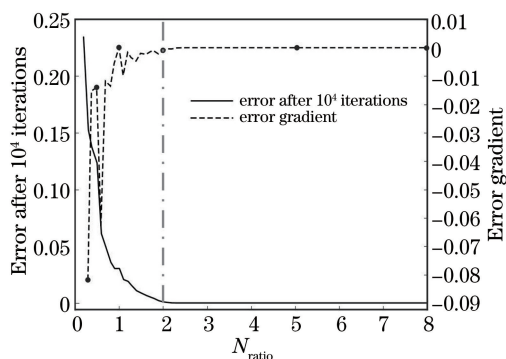


图 7 不同方程数量下的误差曲线及误差梯度曲线
Fig. 7 Error curve and corresponding error gradient curve under different number of equations

除此之外,可以预见的是,减小光斑采样间隔可以增加方程个数,但采样间隔并不是越小越好,当采样间隔小到一定程度时,相邻两点的强度值趋于一致,

这可能带来对应方程的相似化,即变成等效方程,有效方程数量将会减少。相反地,通过上述模拟可以发现,CMI 对于采样要求反而是非常宽松的,并不一定必须满足传统的采样定理要求,因此适用于欠采样或者部分光斑信息丢失的情形。

4.2.2 调制板频谱宽度

在上述相同模拟条件下,改变调制板频谱宽度为 Δ_G 的 $N'/(\lambda L)$ 倍,当 N' 分别为 0.114, 0.314, 0.414, 0.514, 1.514 时,调制板对应的频谱分布如图 8(a)~(e) 所示,对应的调制板相位图由插图表示,同时对应的衍射光斑分布如图 8(f)~(j) 所示,随着 N' 的增大,调制板频谱宽度增加,其结构密度也增加,对应的衍射光斑大小和密度也都得到相应的增大,经过 10^4 迭代计算后,重建的结果如图 8(k)~(o) 所示,可以看出,从 $N'=0.414$ 开始,重建结果的误差开始得到明显减小,重建质量也开始得到显著提升,为进一步确定 $N'=0.414$ 是否是上述推论中的拐点,将 N' 按照 0.1 步长进行了系列模拟,最终重建误差如图 9 中黑色实线表示,其对应的误差梯度曲线如图 9 中虚线表示,可以看出, $N'=0.414$ 时,无论是误差大小还是梯度变化大小其都处于拐点中,不过这和预期并不完全相同的是,

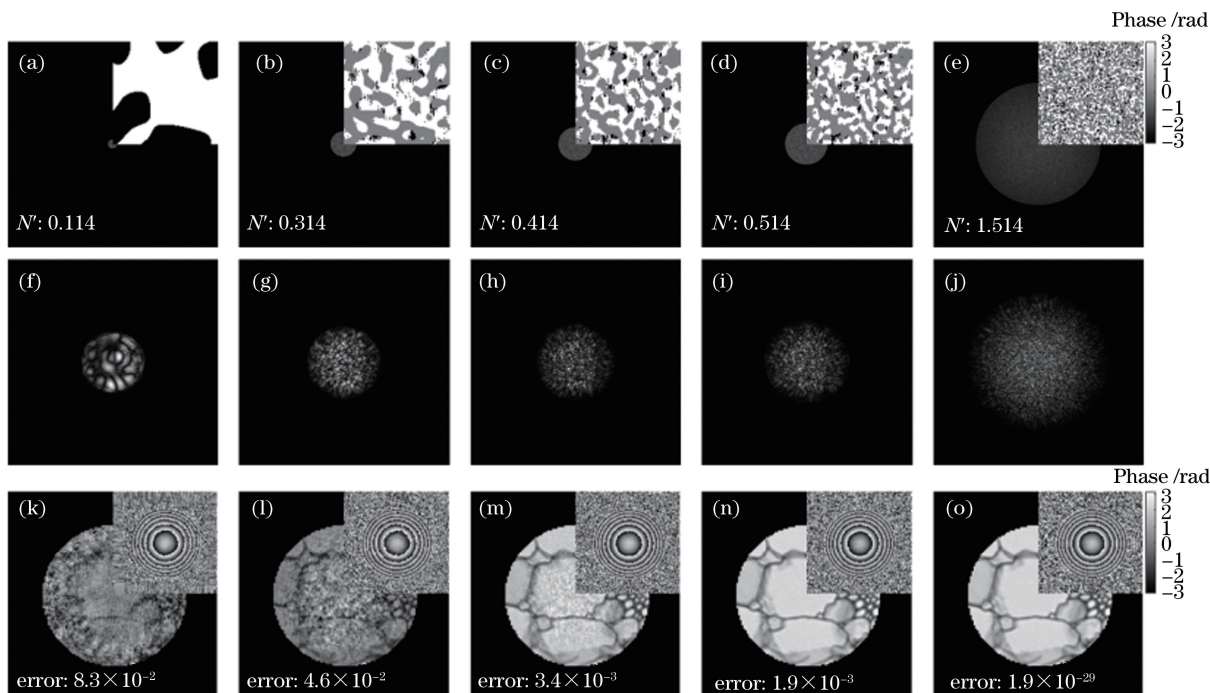


图 8 不同调制板频谱宽度下的重建结果。(a)~(e)不同调制板的频谱和对应的相位图;
(f)~(j)图 8(a)~(e)对应的衍射光斑;(k)~(o)图 8(a)~(e)对应的重建结果

Fig. 8 Reconstructed results under different spectral width of modulation plate. (a)–(e) Spectra of different modulators and corresponding phase maps; (f)–(j) diffraction patterns corresponding to Figs. 8(a)–(e); (k)–(o) reconstructed results corresponding to Figs. 8(a)–(e)

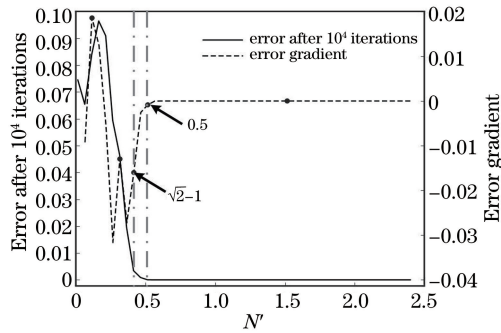


图 9 不同调制板频谱宽度下重建结果的误差曲线及对应的误差梯度曲线

Fig. 9 Error curves and corresponding error gradient curves of reconstructed results with different spectral width of modulation plate

当 $N' = 0.5$ 左右时,重建误差才开始趋于稳定,这主要是因为按照图 4 所示的卷积过程,当 D 平移到临界点附近时,虽然能得到非 0 方程,但是每个方程包含的未知数的个数得到显著降低,这意味着更容易出现等价方程,间接导致有效方程数量的减少,因此在迭代过程中容易出现多个解,导致误差的增加,这与上述结论是不矛盾的,反而间接证明了 $N' = 0.414$ 的临界点的准确性。

4.2.3 待测光稀疏性

根据上述推论,当调制板频谱宽度一定时,待测

光束在探测面光斑的宽度增加,未知量个数增加,相应地,有效方程数量要求也会增加,当调制板频谱宽度不能达到 $(\sqrt{2}-1)/(\lambda L)$ 倍时,将会出现明显的噪声,为验证该结论,进行了一系列模拟计算。此处假定调制板频谱宽度为 $\Delta_{G'} = 2$ mm 时的临界宽度,即 $0.414\Delta_{G'}/(\lambda L)$,调整孔的直径后进行迭代恢复,设 N'' 为无调制板时待测光在光斑探测面光斑截止宽度的相对值, $N'' = 1$ 时表示当前调制板下解唯一的临界宽度。 N'' 为 0.8, 1, 1.2, 1.6 时,对应的衍射光斑分别如图 10(a)~(d) 所示,此时对应的调制板相位分布如图 8(c) 所示,经过 10^4 次迭代计算后,重建得到的结果如图 10(e)~(h) 所示,当 $N'' = 1$ 时,调制板宽度刚好能达到唯一解的最低要求,此时能够得到收敛的结果,当 N'' 降低为 0.8 时,重建误差明显减小,重建质量变好,当 N'' 提高时,虽然光斑面积变大,方程数量增多,但未知数个数增加的数量更多,达不到基本要求,因此误差会逐渐增大,甚至不收敛。此外,按照 0.1 的增幅步长,计算了 N'' 从 0.6 到 2.4 时的误差变化,结果如图 11 所示,虚线位置为刚好满足最低要求时的位置, N'' 大于 1 时不满足最低要求,重建结果和误差变化与预期相同,因此上述结论的正确性再次得到验证。

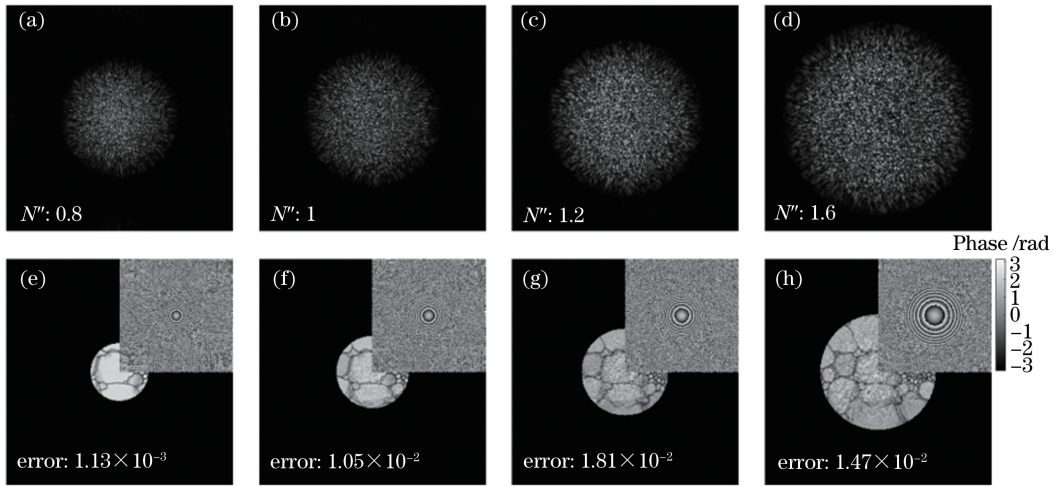


图 10 调制板频谱不变的情况下,不同稀疏特性待测光的重建结果。(a)~(d)不同 N'' 下的衍射光斑; (e)~(h)图 10(a)~(d)对应的重建结果

Fig. 10 Reconstruction results of light to be measured with different sparsity characteristics and same spectrum of modulation plate. (a)~(d) Diffraction patterns under different N'' ; (e)~(h) reconstructed results corresponding to Figs. 10(a)~(d)

5 结 论

针对 CMI 算法收敛性和解唯一性的问题,提出

了基于梯度下降算法的理论模型,解释了 CMI 算法能够收敛的原因,提出 CMI 算法本质上是搜索步长为 $h_k = \gamma |d|^2 / |d|_{\max}^2$ 的梯度搜索算法。从解方程

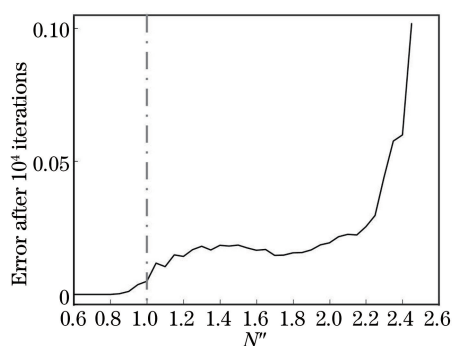


图 11 无调制板时不同待测光光斑宽度下的重建误差，
绿色虚线表示临界宽度

Fig. 11 Reconstructed error under different spot width of
light to be measured, without modulation plate.
Green dashed line represents critical width

的角度推导出 CMI 算法解唯一的基本条件，即有调制板时光斑 I 的非 0 点数是无调制板时光斑 G' 的非 0 点数的 2 倍及以上，或者说调制板频谱放大 λL 倍后，其截止宽度与无调制板时光斑 G' 截止宽度 $\Delta_{G'}$ 的比值至少是 0.414，通过模拟对该结论进行了验证，该结论可以很好地解释 CMI 算法的收敛特性和重建能力变化，该研究为 CMI 算法的后续优化提供了明确的理论依据和研究方向。

参 考 文 献

- [1] Fienup J R. Phase retrieval algorithms: a comparison [J]. Applied Optics, 1982, 21(15): 2758-2769.
- [2] Rodenburg J M, Faulkner H M L. A phase retrieval algorithm for shifting illumination [J]. Applied Physics Letters, 2004, 85(20): 4795-4797.
- [3] Maiden A, Li P, Johnson D. Further improvements to the ptychographical iterative engine [J]. Optica, 2017, 4(7): 736-745.
- [4] Truong N X, Safaei R, Cardin V, et al. Coherent tabletop EUV ptychography of nanopatterns [J]. Scientific Reports, 2018, 8(1): 16693.
- [5] Pan X C, Liu C, Tao H, et al. Phase imaging based on ptychography and progress on related key techniques [J]. Acta Optica Sinica, 2020, 40(1): 0111010.
潘兴臣, 刘诚, 陶华, 等. Ptychography 相位成像及其关键技术进展 [J]. 光学学报, 2020, 40(1): 0111010.
- [6] Thibault P, Menzel A. Reconstructing state mixtures from diffraction measurements [J]. Nature, 2013, 494(7435): 68-71.
- [7] Maiden A M, Morrison G R, Kaulich B, et al. Soft X-ray spectromicroscopy using ptychography with randomly phased illumination [J]. Nature Communications, 2013, 4(1): 1669.
- [8] Humphry M J, Kraus B, Hurst A C, et al. Ptychographic electron microscopy using high-angle dark-field scattering for sub-nanometre resolution imaging [J]. Nature Communications, 2012, 3(1): 730.
- [9] Gardner D F, Tanksalvala M, Shanblatt E R, et al. Subwavelength coherent imaging of periodic samples using a 13.5 nm tabletop high-harmonic light source [J]. Nature Photonics, 2017, 11(4): 259-263.
- [10] Brady G R, Fienup J R. Measurement range of phase retrieval in optical surface and wavefront metrology [J]. Applied Optics, 2009, 48(3): 442-449.
- [11] Wang H Y, Liu C, Veetil S P, et al. Measurement of the complex transmittance of large optical elements with Ptychographical Iterative Engine [J]. Optics Express, 2014, 22(2): 2159-2166.
- [12] Hu C Y, Du Z M, Chen M H, et al. Single-shot ultrafast phase retrieval photography [J]. Optics Letters, 2019, 44(17): 4419-4422.
- [13] Sidorenko P, Lahav O, Avnat Z, et al. Ptychographic reconstruction algorithm for frequency-resolved optical gating: super-resolution and supreme robustness [J]. Optica, 2016, 3(12): 1320-1330.
- [14] Zhu J Q, Tao H, Pan X C, et al. Computational imaging streamlines high-power laser system characterization [J]. Laser Focus World, 2015, 51(12): 39-42.
- [15] Chen B K, Sidorenko P, Lahav O, et al. Multiplexed single-shot ptychography [J]. Optics Letters, 2018, 43(21): 5379-5382.
- [16] Pan X C, Liu C, Zhu J Q. Single shot ptychographical iterative engine based on multi-beam illumination [J]. Applied Physics Letters, 2013, 103(17): 171105.
- [17] Sidorenko P, Cohen O. Single-shot ptychography [J]. Optica, 2016, 3(1): 9-14.
- [18] Zhang F C, Chen B, Morrison G R, et al. Phase retrieval by coherent modulation imaging [J]. Nature Communications, 2016, 7(1): 13367.
- [19] Zhang F C, Rodenburg J M. Phase retrieval based on wave-front relay and modulation [J]. Physical Review B, 2010, 82(12): 121104.
- [20] Pan X C, Liu C, Zhu J Q. Phase retrieval with extended field of view based on continuous phase modulation [J]. Ultramicroscopy, 2019, 204: 10-17.
- [21] Pan X C, Liu C, Zhu J Q. Coherent amplitude modulation imaging based on partially saturated diffraction pattern [J]. Optics Express, 2018, 26(17): 21929-21938.