

扫描相干衍射成像背景噪声分离算法研究

邢振江^{1,2}, 许子健^{1,3*}, 孙天啸^{1,2}, 张祥志^{1,3}, 邰仁忠^{1,3**}¹中国科学院上海应用物理研究所物理与环境科学部, 上海 201800;²中国科学院大学, 北京 100049;³中国科学院上海高等研究院上海光源科学中心, 上海 201204

摘要 X 射线扫描相干衍射成像(ptychography)是一种新型的无透镜成像方法,摆脱了传统透镜成像中聚焦元件对分辨率的限制,使理论分辨率只受到 X 射线波长和探测器数值孔径的限制。然而实验测量中的噪声限制了该方法对成像质量的改善,甚至最终导致图像重建失败。在研究了 ptychography 现有的相位恢复迭代算法后,本文提出了一种新型的图像重建迭代算法。该算法利用 ptychography 数据的高冗余性,通过梯度下降最小化技术,在重建样品和探针图像的同时还完成了背景噪声的同步迭代重建,实现了信号和噪声的盲分离功能。通过仿真模拟和实验数据重建,将该方法与传统的迭代算法进行了对比,结果表明新算法能够较好地实现信噪分离,显著提升 ptychography 的成像质量。

关键词 X 射线光学; 扫描相干衍射成像; 信噪分离; 背景噪声; 相位恢复迭代算法

中图分类号 O438

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202141.2234001

Research on Signal-Noise Separation Algorithm of Ptychography

Xing Zhenjiang^{1,2}, Xu Zijian^{1,3*}, Sun Tianxiao^{1,2}, Zhang Xiangzhi^{1,3}, Tai Renzhong^{1,3**}

¹Department of Physics and Environment Sciences, Shanghai Institute of Applied Physics,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;

²University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

³Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences,
Shanghai 201204, China

Abstract Ptychographic coherent diffraction imaging is a novel lensless imaging method, which removes the resolution limitation by imaging elements in traditional optical lens imaging, so that its theoretical resolution is only limited by the X-ray wavelength and the numerical aperture of detector. However, the experiment background noise limits the further improvement of the imaging quality by this method, and may lead to the failure of image reconstruction. A new phase-retrieval iterative algorithm is proposed in this paper after studying the existing ptychographic iterative algorithms. The new algorithm uses the high redundancy of the ptychographic data set, and uses the gradient descent minimization method to reconstruct the background noise in synchronization with the reconstruction of the object and the detection, and realizes the blind separation of the noise and the signal. This algorithm is compared with the traditional iterative algorithms in simulation and experiment data reconstructions, demonstrating that this new algorithm can achieve a better signal-noise separation and a higher imaging quality.

Key words X-ray optics; ptychography; signal-to-noise separation; background noise; phase retrieval iterative algorithm

OCIS codes 340.7460; 340.6720; 070.1675

收稿日期: 2021-03-23; 修回日期: 2021-05-20; 录用日期: 2021-06-03

基金项目: 国家自然科学基金(11875316, U1832146)、国家重点研发计划(2017YFA0403400, 2016YFA0400902)

通信作者: *xuzijian@zjlab.org.cn; **tairenzhong@sinap.ac.cn

1 引言

传统的扫描透射 X 射线成像 (STXM)^[1-2] 一般是通过波带片聚焦 X 射线, 利用焦点处的小光斑扫描的形式实现高分辨率成像。该方法的分辨率取决于焦斑的大小, 这使得分辨率受限于聚焦元件的制造工艺, 同时也受限于 X 射线的相干性。X 射线相干衍射成像 (CDI)^[3-14] 方法的出现, 使 X 射线成像摆脱了传统成像中聚焦元件对于分辨率的限制, 能够实现非晶样品的纳米级高分辨率成像。作为目前最实用的 X 射线 CDI 方法, 扫描相干衍射成像 (又称层叠衍射成像, ptychography) 技术将 CDI 方法与探针扫描相结合, 利用局域 X 射线探针对样品进行二维扫描, 获得一系列扫描位置上的衍射图样, 并且相邻扫描位置的照明区域间具有较高的重叠度 (通常大于 70%)。由于重叠扫描位置的信息被包含在不同的衍射图样中, 使得扫描 CDI 的衍射数据具有较高的信息冗余性。这种信息冗余性质在相当程度上放宽了实验条件的限制 (例如 X 射线的相干性^[15] 和样品扫描的位置误差^[16-21] 等), 同时也大幅提高了相位恢复迭代算法的收敛速度和成像质量, 并且诱发了多种多样的 ptychography 算法 (例如多切片算法^[22-23]、上采样算法^[24] 和多模式算法^[25])。

在 CDI 实验中, 总会有或多或少的背景噪声与样品的衍射信号一起被探测器捕获。这些背景噪声包括上游 X 射线的伴生散射、周围杂散光散射、CCD 探测器暗电流、热读出噪声及其他来源的背景噪声^[26]。当探测器测量的衍射图样中噪声增大时, 将会降低相邻位置衍射信号间的一致性 or 相关性, 从而增加样品图像重建的难度, 甚至导致其难以重建。根据以往的经验, 在不去除噪声的情况下, 在高频区域, 即使较弱的噪声也会对重建结果造成严重影响, 这主要是由于 CCD 外围的高频衍射信号会快速衰减以至于被噪声所淹没。

针对 ptychography 的噪声问题, 目前已发展出了几种不同的算法来应对。2009 年, Thurman 等^[27-28] 考虑了常数偏差噪声对于成像结果的影响。2012 年, Thibault 等^[29] 采用最大似然估计的方式减小泊松噪声对重建结果的影响。2013 年, Marchesini 等^[30] 考虑了二维分布噪声的影响, 在迭代重建过程中, 通过附加缩放参数的方式进行噪声函数更新。2017 年, Wang 等^[26] 使用了最小误差法, 通过从测量信号中减去暗场噪声的方式实现了

噪声的扣除。然而, 现有的这些算法只能在一定程度上减少噪声对重建结果的影响, 并不能从根本上消除噪声。

本文基于 ptychography 衍射信号信息高度冗余的特性, 提出了一种基于梯度下降法的噪声分离新方法。相较于传统噪声方法, 该方法不依赖任何噪声模型假设并且不需要任何噪声先验信息, 更具有普适性。在模拟和实验数据的重建计算中, 该方法均实现了优异的去噪效果, 尤其是抑制或消除了背景噪声所造成的实空间周期性格点噪声。

2 目前常用的两种 ptychography 算法

扫描 CDI 的实验装置与扫描透射 X 射线显微装置基本类似, 只是探测器由点探测器换成了面探测器, 如图 1 所示。Ptychography 实验通常采用 X 射线聚焦元件对同步辐射光源产生的相干 X 射线进行聚焦, 经级选光阑进行选光后, 利用焦点处或者焦点下游一定距离的局域性光斑对样品进行二维扫描, 相邻扫描位置的照明区域间存在部分重叠 (线性重叠度大于 70%)。远场处的 CCD 对每一扫描位置的出射光波进行探测, 从而获得一系列的衍射图样数据。

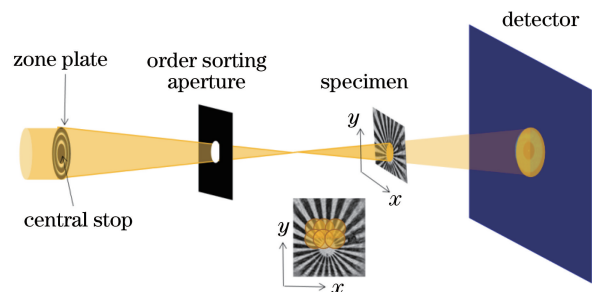


图 1 Ptychography 实验装置图

Fig. 1 Experimental setup for ptychography

2.1 ePIE 算法

当样品满足薄样品近似条件时, 其可看作没有厚度的纯二维样品。多数 ptychography 算法都是基于薄样品近似而提出的, 其中就包括 ePIE 算法。ePIE 算法是扫描 CDI 常用的一种二维图像重建算法, 文献[8]中给出了该算法的具体原理和详细公式, 这里不再赘述, 仅给出该算法的主要步骤。设光斑 P 对样品 O 进行二维扫描, 在第 j 个扫描位置测量得到的衍射图像为 I_j 。对衍射信号进行 ePIE 算法重建时, 每个位置迭代更新的过程如下:

1) 在当前扫描位置 j 处, 探针 $P(r)$ 照射到样品 $O(r)$ 上 (初始样品函数可以设置为 1 或者完全随机

分布),生成出射波,

$$\psi_j(\mathbf{r}) = P_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)O_j(\mathbf{r}), \quad (1)$$

式中: \mathbf{r} 为样品空间(实空间)的坐标; \mathbf{R}_j 表示该扫描位置处探针与样品间的相对位置矢量。

2) 将出射波自由地传播至远场,在探测器上得到了傅里叶空间的波前函数,

$$\Psi_j(\mathbf{q}) = \mathcal{F}\{\psi_j(\mathbf{r})\}, \quad (2)$$

式中: \mathbf{q} 为探测器空间(傅里叶空间)的坐标; \mathcal{F} 为傅里叶变换算符。

3) 根据测量得到的衍射图样 $I_j(\mathbf{q})$,经振幅替换后,得到新的远场波前,

$$\Psi'_j(\mathbf{q}) = \sqrt{I_j(\mathbf{q})} \frac{\Psi_j(\mathbf{q})}{|\Psi_j(\mathbf{q})|}. \quad (3)$$

4) 将更新后的远场波前函数反传播回样品平面,就得到更新的样品出射波函数,

$$\psi'_j(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1}\{\Psi'_j(\mathbf{q})\}. \quad (4)$$

5) 对样品函数 $[O(\mathbf{r})]$ 和探针函数 $[P(\mathbf{r})]$ 分别进行更新,作为下个位置更新的初始函数,

$$O_{j+1}(\mathbf{r}) = O_j(\mathbf{r}) +$$

$$\alpha \frac{P_j^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)}{|P_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)|_{\max}^2} [\psi'_j(\mathbf{r}) - \psi_j(\mathbf{r})], \quad (5)$$

$$P_{j+1}(\mathbf{r}) = P_j(\mathbf{r}) +$$

$$\beta \frac{O_j^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_j)}{|O_j(\mathbf{r} + \mathbf{R}_j)|_{\max}^2} [\psi'_j(\mathbf{r}) - \psi_j(\mathbf{r})], \quad (6)$$

式中: α 和 β 为更新弛豫参数,用于调节更新的步长,取值范围为 $0 \sim 1$ 。

通过以上步骤就完成了—个扫描位置上的样品函数和探针函数的更新,当样品的所有照明位置都完成了上述步骤的更新后,就完成了—次完整的迭代。重复多次迭代直至样品函数和探针函数收敛至稳定解或者达到预设的迭代次数,即完成了重建。

2.2 多模式扩展 ptychography 迭代引擎 (Mm-ePIE)

在 ePIE 算法中,照明探针被假定为单色相干光,因此该算法对于部分相干光照明的 ptychography 重建效果往往不理想。在扫描 CDI 实验方法中,不同扫描位置的照明光斑具有高度—致性,同时衍射信息具有很高的冗余度,基于这些性质 Thibault 和 Menzel^[31] 提出了混合态算法。该算法中,混合态信息可以来源于入射光、样品或探测器,其中入射光的混合态来源于光源的时间/空间部分相干性,样品的混合态来源于量子态混合或稳态动力学过程,探测器的混合态来源于探测器的点扩展性。成像实验中所探测的样品一般不存在量子多

重态或动态过程,如果仅考虑入射光的多重态,则混合态算法将简化为探针多模式迭代算法^[25]。这里不再详述该算法,仅给出在第 j 个位置上的具体迭代步骤:

1) 入射光由—组相互正交的单模成分组成,可以记作 $\{P_j^1, P_j^2, P_j^3, \dots, P_j^k, \dots\}$,各单模态与样品相互作用形成的出射波为

$$\psi_j^k(\mathbf{r}) = P_j^k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)O_j(\mathbf{r}). \quad (7)$$

2) 这—系列的出射波传播至远场的探测器平面,得到的各个模式的波前函数为

$$\Psi_j^k(\mathbf{q}) = \mathcal{F}\{\psi_j^k(\mathbf{r})\}. \quad (8)$$

3) 根据测量到的衍射图样,对各个模式的波前函数进行如下更新,

$$\Psi_j'^k(\mathbf{q}) = \sqrt{I_j(\mathbf{q})} \frac{\Psi_j^k(\mathbf{q})}{\sqrt{\sum_k |\Psi_j^k(\mathbf{q})|^2}}, \quad (9)$$

式中: $\sum_k |\Psi_j^k(\mathbf{q})|^2$ 为所有模态成分在探测器平面—起形成的衍射图样强度,是所有模态衍射图样的非相干叠加。

4) 更新的各模态波前成分从探测器平面反传播至样品平面,

$$\psi_j'^k(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_j'^k(\mathbf{q})\}. \quad (10)$$

5) 对样品函数和每个模式的探针函数分别进行更新,

$$O_{j+1}(\mathbf{r}) = O_j(\mathbf{r}) +$$

$$\alpha \frac{\sum_k P_j^{*k}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) [\psi_j'^k(\mathbf{r}) - \psi_j^k(\mathbf{r})]}{\left[\sum_k |P_j^k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)|^2 \right]_{\max}}, \quad (11)$$

$$P_{j+1}^k(\mathbf{r}) = P_j^k(\mathbf{r}) +$$

$$\beta \frac{O_j^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_j)}{|O_j(\mathbf{r} + \mathbf{R}_j)|_{\max}^2} [\psi_j'^k(\mathbf{r}) - \psi_j^k(\mathbf{r})]. \quad (12)$$

对于未正交化的初始探针集,可通过施密特正交化方法对各个初始探针模式进行正交化处理。

3 信噪分离算法基本理论

实验中,噪声总是伴随着信号同时被测量到,并会影响到最终的重建图像质量。在硬件层面上,通过尽量提高信噪比可以在一定程度上改善成像质量,比如增加曝光时间、提高相干光通量、减少/抑制杂散光、使用低暗电流和热噪声的探测器等。然而根据以往的经验即使低剂量的噪声也可能导致重建图像质量急剧下降。

对于实验中的光源(无论是信号源还是噪声源),可以根据它们是否和样品发生相互作用而将其

分成两类。应注意到在多模式算法中,所有的探针模式均要和样品发生相互作用,因此多模式算法仅考虑了与样品发生作用的光源。如果把不和样品发生作用的噪声也看做一种独特的模式,光强记作 $N(\mathbf{q})$,并假定其在位置扫描过程中始终保持恒定,那么探测器上测得的第 j 个样品位置的衍射信号理论上可表示为

$$I_j^M(\mathbf{q}) = \sum |\Psi_j^k(\mathbf{q})|^2 + N(\mathbf{q}). \quad (13)$$

噪声分离问题的目标是在解出探针函数和样品函数的同时也解得噪声分布函数,使其满足以上公式。然而在重建计算中(13)式右侧的衍射信号强度的计算值和左侧的探测器上实际测到的衍射信号强度总是存在一定的误差 ϵ ,因此噪声分离问题就可

以转变成求解泛函 $\epsilon[N(\mathbf{q})]$ 的最小化问题,也即求解极值问题,

$$\begin{aligned} \min \epsilon_j [N(\mathbf{q})] = & \\ & \left[\sqrt{\sum |\Psi_j^k(\mathbf{q})|^2 + N(\mathbf{q})} - \sqrt{I_j^M(\mathbf{q})} \right]^2, \\ \text{s. t. } N(\mathbf{q}) \geq & 0, \end{aligned} \quad (14)$$

为了将噪声分布函数的迭代更新融入到多模式算法中,采用梯度下降法(速降法)来寻找噪声函数的最优解。类似于多模式算法是通过泛函中的目标函数和探针波函数求偏导而得到的更新函数,也应该对误差泛函的噪声函数的振幅求偏导,即对 $\sqrt{N(\mathbf{q})}$ 求偏导来获得更新方程。最终得到的噪声函数更新公式为

$$N_{j+1}(\mathbf{q}) = \left\{ \sqrt{N_j(\mathbf{q})} + \gamma \frac{\sqrt{N_j(\mathbf{q})} \left[\sqrt{I_j^M(\mathbf{q})} - \sqrt{\sum |\Psi_j^k(\mathbf{q})|^2 + N_j(\mathbf{q})} \right]}{\sqrt{\sum |\Psi_j^k(\mathbf{q})|^2 + N_j(\mathbf{q})}} \right\}^2. \quad (15)$$

可以看到噪声值一直满足非负条件。

如果令 $\gamma=1$,噪声函数的更新公式可以简化为

$$N_{j+1}(\mathbf{q}) = \frac{N_j(\mathbf{q}) I_j^M(\mathbf{q})}{\sum |\Psi_j^k(\mathbf{q})|^2 + N_j(\mathbf{q})}. \quad (16)$$

为了避免噪声函数更新过快,一般设定 $\gamma < 1$ 。噪声函数的初始值可以设置为关闭 X 射线源时所采集的 CCD 背底噪声。在未采集这一背底噪声数据时,甚至可直接将噪声初始值设为实验采集到的衍射图样的平均值,而 $N(\mathbf{q})$ 的最终迭代结果依然会收敛为准确的背景噪声。

在利用(16)式对背景噪声函数进行迭代重建的同时,样品和探针函数也利用 ePIE 算法或 Mm-PIE 算法同步进行迭代更新,只是在振幅替代步骤,所使用的重建衍射图样是样品衍射波与背景噪声函数的非相干叠加结果。

4 模拟和实验结果验证

4.1 模拟结果及分析

首先通过仿真模拟来验证噪声分离算法对于重建结果的改善。如图 2(a)~(b)所示,将随机分布的正方形颗粒和圆形颗粒分别作为样品函数的振幅和相位。探测器设置为 $1024 \text{ pixel} \times 1024 \text{ pixel}$ 的像素阵列,像素尺寸为 $27 \mu\text{m} \times 27 \mu\text{m}$ 。入射探针光斑尺寸为 $1 \mu\text{m}$,由波带片聚焦产生[图 2(c)~(d),由 Fresnel-Kirchhoff 波带片衍射公式^[32]计算

得到]。所选波带片的直径为 $200 \mu\text{m}$,中心挡板尺寸为 $80 \mu\text{m}$,最外环宽度为 30 nm ,因此 $1 \mu\text{m}$ 尺寸的探针光斑是由样品离焦一段距离而获得的。样品扫描步长为 200 nm ,因此相邻扫描位置间的线性重叠度为 80% 。模拟实验采用 714 eV 的 X 射线光源,样品扫描点阵为 20×20 个位置,因此最终将获得 400 幅衍射图样[其中一幅衍射图样见图 2(e)]。图 2(c)(e)(f)(g)(h)均采用对数显示,其色度条表明了对数尺度的相对振幅图 2(c)或相对强度图 2(e)~(h)。为了模拟实验过程中环境杂散光及探测器暗电流等背景噪声对重建结果的影响,在每幅衍射图样中都加入了同一幅实验测得的背底噪声,如图 2(f)所示,并对背底噪声引入了 5% 的随机涨落,最后得到类似于图 2(g)的衍射数据。在利用新算法对衍射数据进行重建计算时,探针函数和样品函数的更新方案与 ePIE 算法类似,即采用单模式探针更新方程,并且探针、样品与背景噪声图像同步进行迭代重建。

这种算法很好地重建出了衍射图样中的背景噪声分布,如图 2(h)所示,它与图 2(f)所显示的模型背景噪声相比看不出任何差别。实际上由于在噪声模型中引入了一定的随机涨落,噪声重建图像中还是有其他的微弱噪点的,多分布于中心区域,只是较难观察到而已。

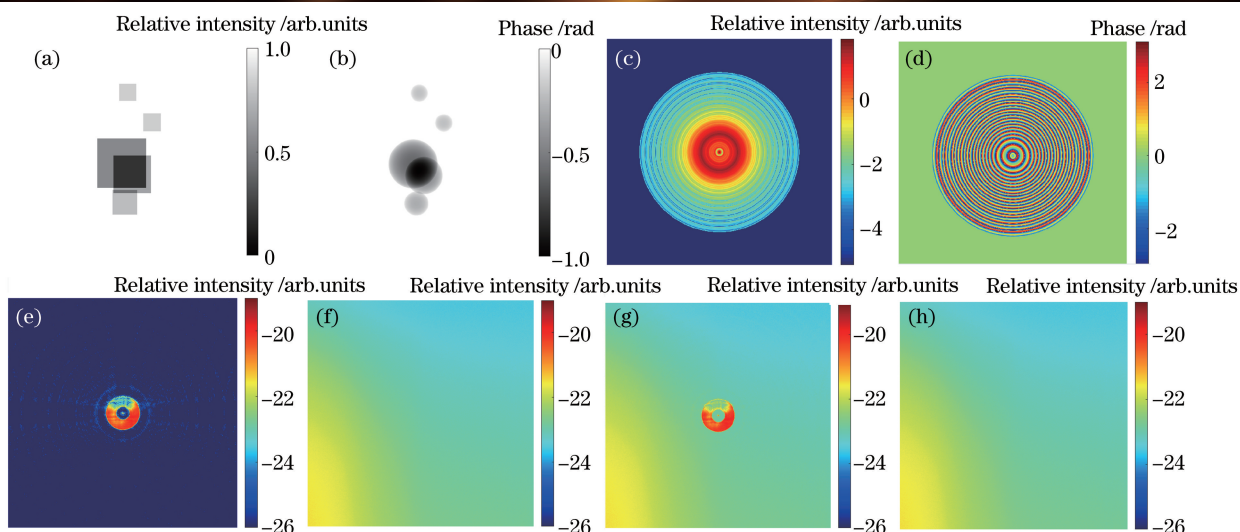


图 2 模拟使用的样品、探针、背景噪声及它们所产生的衍射图样。(a)(b)样品的振幅和相位;(c)(d)探针的振幅和相位;(e)某个扫描位置的典型衍射图样;(f)模拟使用的背景噪声强度分布;(g)叠加背景噪声之后的衍射图样;(h)噪声分离算法重建得到的背景噪声

Fig. 2 Functions of the modeled sample, probe and background noise used in the simulation and the produced diffraction patterns. (a)(b) Sample amplitude and phase; (c)(d) probe amplitude and phase; (e) typical diffraction pattern at a scanning position; (f) simulation of background noise intensity distribution; (g) diffraction pattern after adding the modeled background noise; (h) background noise image reconstructed by our signal-to-noise separation algorithm

图 3(a)~(h)分别展示了 ePIE 算法、Mm-ePIE 算法以及噪声分离算法对样品的重建结果,图 3(a)~(d)的色度条对应于样品透射率,图 3(e)~(h)的色度条对应于样品对光的相移。由

图 3(a)~(e)可知,在 ePIE 算法重建样品图像中存在大量的网格噪声。多模式算法分别采用了三探针模式[3-mode Mm-ePIE,图 3(b)(f)]和五探针模式[5-mode Mm-ePIE,图 3(c)(g)]重建方案,在一定程度上

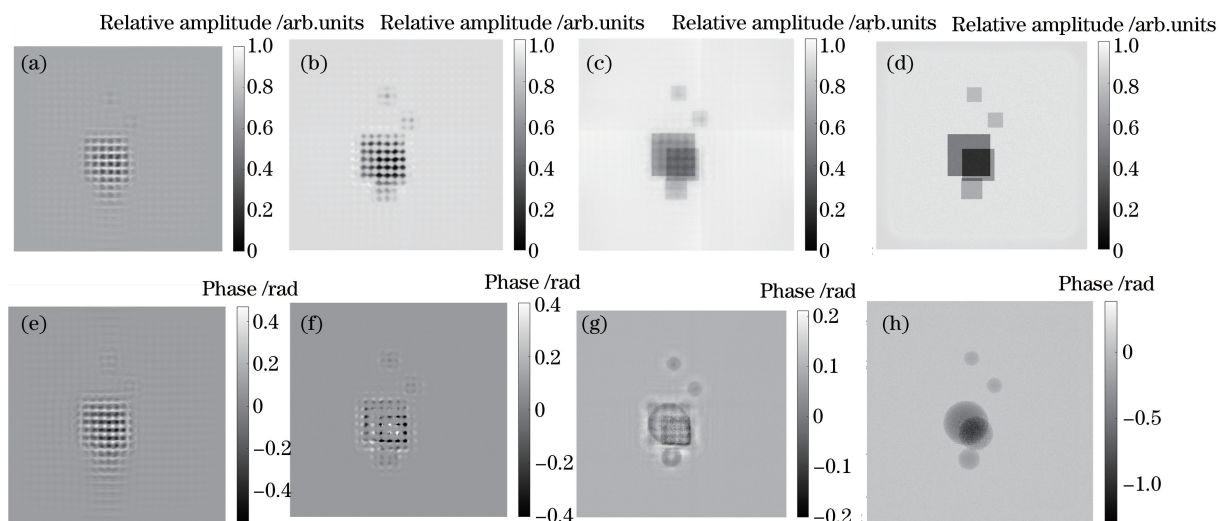


图 3 三种不同算法重建的样品图像。(a)(e) ePIE 算法重建的样品振幅和相位图像;(b)(f)三探针模式的多模式算法重建的样品振幅和相位图像;(c)(g)五探针模式的多模式算法重建的样品振幅和相位图像;(d)(h)新型信噪分离算法重建的样品振幅和相位图像

Fig. 3 Reconstructed sample images by three different algorithms. (a)(e) Sample amplitude and phase reconstructed by the ePIE algorithm; (b)(f) sample amplitude and phase reconstructed by 3-mode Mm-ePIE algorithm; (c)(g) sample amplitude and phase reconstructed by 5-mode Mm-ePIE algorithm; (d)(h) sample amplitude and phase reconstructed by our signal-to-noise separation algorithm

减弱了网格点阵噪声,使得样品重建图像得到了明显改善(尤其五探针模式的重建结果),但是重建质量依然不够理想。而本文采用的信噪分离算法的重建结果[图 3(d)(h)]要明显优于前两种算法的结果,几乎从根本上消除了网格噪声的存在,获得了最好的重建结果,其重建振幅和相位图像均与原始样品模型图完全一致。由于在噪声模型中引入了一定的随机波动(5%的幅度),而新算法的设定是不同扫描位置衍射图像的背景噪声是恒定不变的,因此重建样品图像中依然会存在少量噪声,只是肉眼较难观察到。

对于周期性网格噪声出现的原因,主要是探测器上的低频噪声。由于探测器平面的低频噪声(傅里叶空间)反映在样品平面(实空间)上即是高频噪声,所以在 ptychography 重建过程中,样品图像上每个扫描位置的照明区域中心便会出现一个(高空间频率)点状噪声,而周期性扫描也就会在重建样品图像中留下明显的周期性格点噪声。多模式探针方

案在一定程度上能改善重建结果,主要由于背景噪声也会伴随探针的多模态分解而在一定程度上被分解剥离出去(离开样品空间而进入探针的多模态中),因此增加探针模式数目也能够实现更好的重建。然而,这种分解剥离是不完全的,只能部分地缓解背景噪声对重建结果的影响,并且增加探针模式数目会导致重建时间成倍增加。

如图 4(a)~(c)所示,由常规算法重建得到的探针(振幅)图像中也同样会出现周期性的网格噪声。当探针对样品图像进行扫描时,这些周期性格点与样品图像中的格点相互交错,即探针亮的地方,样品暗(吸收强),反之,样品亮(吸收弱)。因此保持两者的乘积(即出射波函数)不变,并能够产生与真实样品和探针所导致的出射波相互一致的衍射信号。而本文所提出的噪声分离算法,也能够有效地消除探针重建图像中的周期性格点噪声,大幅提高探针图像的重建质量,如图 4(d)所示。

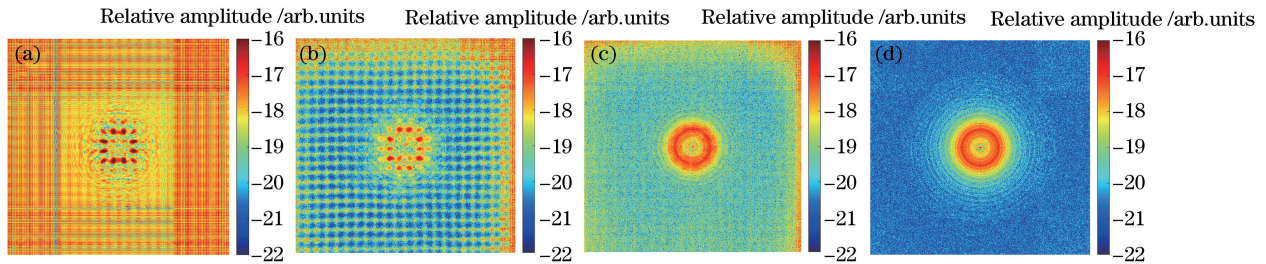


图 4 三种不同算法重建的探针。(a) ePIE 算法重建探针的振幅;(b)三探针模式的多模式算法重建探针的振幅;(c)五探针模式的多模式算法重建探针的振幅;(d)新型信噪分离算法重建探针的振幅

Fig. 4 Reconstructed probe amplitude images by three different algorithms. (a) Probe amplitude reconstructed by the ePIE algorithm; (b) probe amplitude reconstructed by 3-mode Mm-ePIE algorithm; (c) probe amplitude reconstructed by 5-mode Mm-ePIE algorithm; (d) probe amplitude reconstructed by our signal-to-noise separation algorithm

4.2 实验结果及分析

本实验采用了 600 eV 光子能量的 X 射线,并使用直径 100 μm 、最外环宽度 100 nm、无中心挡板的波带片来聚焦 X 射线,利用焦点下游 48.4 μm 处的光斑来扫描样品,因此样品上的探针尺寸为 1 μm 。样品为一星形靶标准样品(西门子星),对其进行扫描的步长为 200 nm,扫描点阵为 10×10 个位置。扫描样品所产生的 100 幅衍射图样由样品下游 70 mm 处的 CCD 探测器进行采集,该 CCD 尺寸为 1024 pixel \times 1024 pixel,像素尺寸为 27 $\mu\text{m} \times 27 \mu\text{m}$ 。由于采用了没有中心挡板的波带片进行聚焦,因此会有很强的直通光透过波带片中心并直达 CCD,造成 CCD 传感器中心的饱和,这样所采集的衍射数据用传统 ptychography 算法进行处理和重建的难度很大。为使用传统或常规算法对这些数据

进行重建计算,必须先对饱和区域进行预处理,将其设为坏点或数据丢失区域,之后在重建中这些区域的衍射波振幅将不进行替换。由于直通光造成的饱和区域比较大,常规算法得到的重建图像质量将会显著下降。

利用本文提出的噪声分离算法对这组衍射数据进行重建计算时,探针函数和样品函数将采用三探针模式 Mm-ePIE 算法的更新方案,并且探针、样品与背景噪声图像同步进行迭代重建。常规算法及新算法得到的重建结果均在图 5 中进行比较。

由图 5 可知,和模拟结果一样,ePIE 算法和 Mm-PIE 算法的重建结果中均出现了大量的周期性格点噪声,因此重建质量明显较差。而图 5(d)、(h)的结果表明,该算法不仅去除了重建图像中的格点噪声,而且得到了明显好得多的重建样品图像。同

时图 5(e) 显示, 由于新算法的采用, 背景噪声分布也得到了很好地重建, 尤其是饱和区域能够较好地

被剥离出来, 这为分析实验过程中的噪声来源提供了可靠依据。

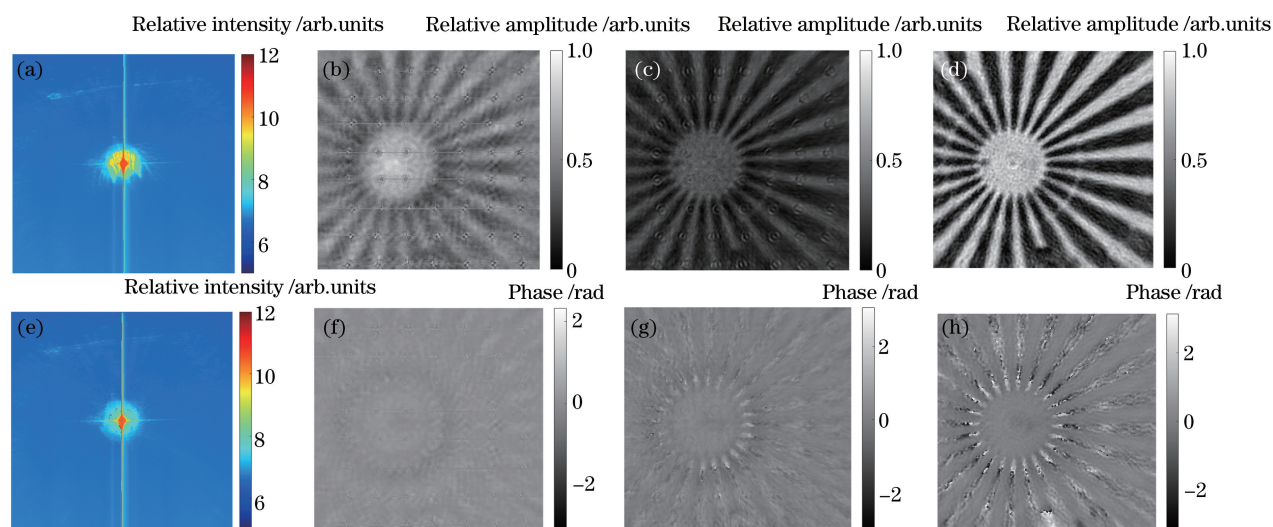


图 5 实验数据重建结果。(a) 某个扫描位置的典型衍射图样;(b)(f) ePIE 算法重建的样品振幅和相位图像;(c)(g) 三探针模式的 Mm-ePIE 算法重建的样品振幅和相位;(d)(h) 新型信噪分离算法重建的样品振幅和相位图像;(e) 新型噪声分离算法重建得到的背景噪声

Fig. 5 Reconstruction results from the experimental data. (a) Typical diffraction pattern at a scanning position; (b)(f) sample amplitude and phase reconstructed by ePIE algorithm; (c)(g) sample amplitude and phase reconstructed by 3-mode Mm-ePIE algorithm; (d)(h) sample amplitude and phase reconstructed by our signal-to-noise separation algorithm; (e) background noise image reconstructed by our signal-to-noise separation algorithm

5 结 论

本文利用 ptychography 衍射数据的高冗余性, 并假定与样品无相互作用的背景噪声在实验过程中是恒定的, 提出了一种基于梯度下降法的新型信噪分离算法, 能够在没有任何噪声先验信息的情况下, 实现衍射信号和背景噪声的盲分离, 同时能够显著改善样品和探针图像的重建质量。通过仿真模拟和实验数据重建, 将该方法与传统的迭代算法进行了对比, 结果充分证明了新算法的有效性, 以及它相对于常规 ePIE 算法和多模式算法的显著优势。新算法大幅提升了 ptychography 成像质量, 即使对于 CCD 中心区域严重饱和的衍射信号, 该算法依然能够实现高质量的样品图像重建。

在此基础上, 发现当衍射信号中残留一定的噪声时, 背景噪声对于重建图像质量的影响将会使 ePIE 算法和多模式算法的重建图像中出现明显的周期性格点噪声, 从而导致重建质量的显著下降。经过分析, 重建图像中的格点噪声是衍射图样中的低频背景噪声引起的, 且这种格点噪声同样会反映在重建探针图像中。若使用该算法进行图像重建, 则可以有效地消除这种周期性格点噪声。

参 考 文 献

- [1] Kirz J, Jacobsen C, Howells M. Soft X-ray microscopes and their biological applications [J]. Quarterly Reviews of Biophysics, 1995, 28(1): 33-130.
- [2] Tan X X, Liu H G, Guo Z, et al. Simulation of coherent diffraction imaging based on scanning transmission X-ray microscopy of Shanghai synchrotron radiation facility[J]. Acta Optica Sinica, 2011, 31(4): 0418001.
谭兴兴, 刘海岗, 郭智, 等. 基于上海光源扫描透射 X 射线显微术的相干衍射成像模拟[J]. 光学学报, 2011, 31(4): 0418001.
- [3] Fienup J R. Reconstruction of an object from the modulus of its Fourier transform[J]. Optics Letters, 1978, 3(1): 27-29.
- [4] Sayre D, Chapman H N, Miao J. On the extendibility of X-ray crystallography to noncrystals [J]. Acta Crystallographica Section A Foundations of Crystallography, 1998, 54(2): 232-239.
- [5] Miao J W, Charalambous P, Kirz J, et al. Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens[J]. Nature, 1999, 400(6742): 342-344.
- [6] Miao J, Ishikawa T, Robinson I K, et al. Beyond crystallography: diffractive imaging using coherent

- X-ray light sources[J]. *Science*, 2015, 348(6234): 530-535.
- [7] Spence J C H, Weierstall U, Howells M. Coherence and sampling requirements for diffractive imaging [J]. *Ultramicroscopy*, 2004, 101(2/3/4): 149-152.
- [8] Maiden A M, Rodenburg J M. An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging [J]. *Ultramicroscopy*, 2009, 109(10): 1256-1262.
- [9] Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G, et al. Hard-X-ray lensless imaging of extended objects [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98(3): 034801.
- [10] Zhang F C, Rodenburg J M. Phase retrieval based on wave-front relay and modulation [J]. *Physical Review B*, 2010, 82(12): 121104.
- [11] Rodenburg J M. Ptychography and related diffractive imaging methods [J]. *Advances in Imaging and Electron Physics*, 2008, 150: 87-184.
- [12] Zong B M, Luan J Y, Jiang Z L, et al. Method to measure transmitting wave-front of imaging lens based on extended ptychographical iterative engine [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(8): 0804001.
纵榜铭, 栾嘉蕴, 蒋志龙, 等. 基于叠层扫描成像技术的成像透镜透射波前测量方法 [J]. *中国激光*, 2019, 46(8): 0804001.
- [13] Zhao M, Wang X M, Zhang X H, et al. Experimental research on macroscopic Fourier ptychography super-resolution imaging [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(12): 121101.
赵明, 王希明, 张晓慧, 等. 宏观傅里叶叠层超分辨率成像实验研究 [J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(12): 121101.
- [14] Chen Y C, Wu X, Luo Z, et al. Fourier ptychographic microscopy reconstruction based on deep learning [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(22): 221106.
陈奕灿, 吴霞, 罗志, 等. 基于深度学习的傅里叶叠层显微成像 [J]. *激光与光电子学进展*, 2020, 57(22): 221106.
- [15] Pfeiffer F. X-ray ptychography [J]. *Nature Photonics*, 2018, 12(1): 9-17.
- [16] Beckers M, Senkbeil T, Gorniak T, et al. Drift correction in ptychographic diffractive imaging [J]. *Ultramicroscopy*, 2013, 126: 44-47.
- [17] Maiden A M, Humphry M J, Sarahan M C, et al. An annealing algorithm to correct positioning errors in ptychography [J]. *Ultramicroscopy*, 2012, 120: 64-72.
- [18] Zhang F C, Peterson I, Vila-Comamala J, et al. Translation position determination in ptychographic coherent diffraction imaging [J]. *Optics Express*, 2013, 21(11): 13592-13606.
- [19] Guizar-Sicairos M, Fienup J R. Phase retrieval with transverse translation diversity: a nonlinear optimization approach [J]. *Optics Express*, 2008, 16(10): 7264-7278.
- [20] Shenfield A, Rodenburg J M. Evolutionary determination of experimental parameters for ptychographical imaging [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(12): 124510.
- [21] Xing Z, Xu Z, Zhang X, et al. Position correction algorithm combined with Fresnel CDI for ptychography [J]. *Proceedings of SPIE*, 2020, 11571: 115710O.
- [22] Godden T M, Suman R, Humphry M J, et al. Ptychographic microscope for three-dimensional imaging [J]. *Optics Express*, 2014, 22(10): 12513-12523.
- [23] Suzuki A, Furutaku S, Shimomura K, et al. High-resolution multislice X-ray ptychography of extended thick objects [J]. *Physical Review Letters*, 2014, 112(5): 053903.
- [24] Batey D J, Edo T B, Rau C, et al. Reciprocal-space up-sampling from real-space oversampling in X-ray ptychography [J]. *Physical Review A*, 2014, 89(4): 043812.
- [25] Dong Z H, Fang Y L L, Huang X J, et al. High-performance multi-mode ptychography reconstruction on distributed GPUs [C]//2018 New York Scientific Data Summit (NYSDS), August 6-8, 2018, New York, NY, USA. New York: IEEE Press, 2018: 1-5.
- [26] Wang C, Xu Z, Liu H, et al. Background noise removal in X-ray ptychography [J]. *Applied Optics*, 2017, 56(8): 2099-2111.
- [27] Thurman S T, Fienup J R. Phase retrieval with signal bias [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2009, 26(4): 1008-1014.
- [28] Guizar-Sicairos M, Fienup J R. Measurement of coherent X-ray focused beams by phase retrieval with transverse translation diversity [J]. *Optics Express*, 2009, 17(4): 2670-2685.
- [29] Thibault P, Guizar-Sicairos M. Maximum-likelihood refinement for coherent diffractive imaging [J]. *New Journal of Physics*, 2012, 14(6): 063004.
- [30] Marchesini S, Schirotzek A, Yang C, et al. Augmented projections for ptychographic imaging [J]. *Inverse Problems*, 2013, 29(11): 115009.
- [31] Thibault P, Menzel A. Reconstructing state mixtures from diffraction measurements [J]. *Nature*, 2013, 494(7435): 68-71.
- [32] Attwood D, Sakdinawat A. X-rays and extreme ultraviolet radiation: principles and applications [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2016.