

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО
СОСТОЯНИЯ

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

**«АПРОБАЦИЯ МЕТОДА АДАПТИВНОЙ МАСКИ В АЛГОРИТМАХ
ВОССТАНОВЛЕНИЯ ФАЗЫ»**

Выполнила студентка
221м группы
Мурзина Анастасия Васильевна

(подпись студента)

Научный руководитель:
проф., д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН
Тиходеев Сергей Григорьевич

(подпись научного руководителя)

Допущен к защите _____
Зав. кафедрой
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН
Хохлов Дмитрий Ремович

(подпись зав.кафедрой)

Научный консультант:
к.ф.-м.н.
Попов Николай Леонидович

(подпись научного консультанта)

Москва

2026

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1. РАСПРОСТРАНЕНИЕ КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	7
1.1. Распространение в свободном пространстве.....	7
1.2. Распространение в среде.....	10
2. МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ РЕКОНСТРУКЦИИ ФАЗЫ	14
2.1. Итерационные алгоритмы восстановления фазы.....	15
2.2. Методы на основе CDI.....	19
2.3. Птихография	22
2.4. Методы на основе птихографии	24
2.5. Другие методы восстановления фазы	25
3. ОГРАНИЧЕНИЯ АЛГОРИТМОВ CDI	29
3.1. Существование и единственность решения.....	29
3.2. Оверсэмплинг и априорная информация об объекте	30
3.3. Ограничения при регистрации дифракционных данных	33
3.4. Численная характеристика качества реконструкции	37
4. ЭКСПЕРИМЕНТ С ГЕЛИЙ-НЕОНОВЫМ ЛАЗЕРОМ	40
4.1. Описание экспериментальной установки	40
4.2. Реконструкция тестовых объектов	40
5. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ С ИСТОЧНИКОМ СИ	44
5.1. Источник синхротронного излучения ЦКП «СКИФ»	44
5.2. Ондуляторная станция «Наноскопия»	45
5.3. Решение прямой задачи распространения излучения	47
5.4. Решение обратной задачи реконструкции объекта.....	49
6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ	51

6.1. Экспериментальный стенд с гелий-неоновым лазером.....	51
6.2. Численный эксперимент с синхротронным источником	52
ВЫВОДЫ	55
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	56
БЛАГОДАРНОСТИ	57
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	58
ПРИЛОЖЕНИЕ А	64

ВВЕДЕНИЕ

Любой существующий оптический детектор не определяет фазу падающего излучения непосредственно, регистрируя в ходе эксперимента лишь его интенсивность. В результате этого теряется фазовая информация, которая необходима для полного описания волнового поля, что представляет собой суть так называемой фазовой проблемы.

В связи с фазовой проблемой возникает задача восстановления фазы по измеренной интенсивности. Эта задача является одной из фундаментальных в когерентной оптике и играет ключевую роль в таких областях, как оптическая и рентгеновская микро- и наноскопия. В «традиционных» методах микроскопии формирование изображения объекта осуществляется с помощью преломляющей, отражающей или дифракционной фокусирующей оптики. Однако использование оптических элементов связано с рядом ограничений, таких как наличие aberrаций и фундаментального предела разрешения, определяемого числовой апертурой. Особенно значимой проблема становится в рентгеновском диапазоне частот, где создание высокоапертурной короткофокусной оптики сопряжено с колоссальными технологическими трудностями [1]. Помимо этого, зачастую рентгенооптические системы не выдерживают тепловой нагрузки высокоинтенсивных пучков излучения и деградируют под их воздействием.

В качестве альтернативного подхода, позволяющего формировать изображение исследуемого объекта, выступают «безлинзовые» методы микроскопии, в частности когерентная дифракционная визуализация (Coherent Diffraction Imaging, CDI) и птихография (от греч. «πτύξ» – складывать), позволяющие восстанавливать структуру объектов, освещаемых рентгеновскими лучами, с разрешением до единиц нанометров [2], [3]. В рамках CDI и птихографии исследуемый (в общем случае некристаллический) объект освещают когерентным монохроматическим излучением, при этом на детекторе регистрируется дифракционная картина интенсивности. Изображение

формируется не непосредственно оптической системой, а численно – путем решения обратной задачи итеративной реконструкцией комплексной функции поля излучения на объекте по измеренной дифракционной картине. В CDI восстановление происходит с применением априорной информации об образце, в качестве которой может выступать ограничение области, внутри которой он расположен.

Ключевые принципы работы итерационных алгоритмов восстановления фазы были заложены в работе Гершберга и Сакстона в 1972 г. [4]. Результаты этой работы положили начало развитию целого семейства алгоритмических подходов. Несмотря на первоначальные ограничения вычислительной техники, благодаря росту производительности компьютеров и развитию методов цифровой обработки сигналов, эти алгоритмы начали активно развиваться в конце XX – начале XXI века.

Актуальность настоящей работы обусловлена бурным развитием CDI и родственных методов в последние десятилетия, которое связано не только с прогрессом вычислительных систем, но и с появлением новых источников когерентного излучения. Помимо применения в экспериментах с использованием крупных исследовательских установок, таких как источники синхротронного излучения [5], [6] и лазеры на свободных электронах [7], [8], [9], на сегодняшний день методы когерентной визуализации используются в экспериментах с лабораторными источниками, к которым относятся оптические лазеры [10], системы с генерацией высших гармоник в экстремальном ультрафиолетовом и мягком рентгеновском диапазоне [11], [12], [13], а также рентгеновские трубки [14]. Особый интерес также представляет создание компактных источников, обеспечивающих высокую яркость в жестком рентгеновском и гамма-диапазоне, что делает безлинзовую микроскопию доступной для широкого круга исследовательских групп.

Целью работы является исследование и разработка подходов к преодолению ограничений алгоритмов CDI, связанных с недостатком априорной

информации, неоднозначностью решений и влиянием шума. В частности, демонстрируется алгоритмическая модификация с использованием адаптивной маски, позволяющей повысить устойчивость реконструкции. Эффективность разработанного подхода демонстрируется на примере данных эксперимента на стенде с гелий-неоновым лазером, а также на основе численного моделирования экспериментальной станции «Наноскопия» в мягком рентгеновском диапазоне строящегося ЦКП «СКИФ».

Работа состоит из шести глав. В **первой главе** рассматриваются основы распространения когерентного излучения, вводятся ключевые понятия когерентной дифракционной визуализации. **Вторая глава** посвящена описанию существующих алгоритмов реконструкции фазы и экспериментальных методик на их основе. В **третьей главе** обсуждаются существующие ограничения CDI. **Четвертая глава** содержит описание экспериментальной установки для апробации метода CDI в видимом диапазоне длин волн. В **пятой главе** описан численный эксперимент, включающий моделирование станции «Наноскопия» ЦКП «СКИФ» в мягком рентгеновском диапазоне и решение обратной задачи когерентной дифракционной визуализации. В заключительной, **шестой главе** приводится более подробный анализ и интерпретация результатов проведенных экспериментов.

1. РАСПРОСТРАНЕНИЕ КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

1.1. Распространение в свободном пространстве

Пусть имеется система, состоящая из точечного источника когерентного излучения, объекта S и детектора S' . Плоскость объекта совпадает с плоскостью $z = 0$, а плоскость детектора находится на расстоянии z от объекта (рис. 1). Распространение волнового пакета $\psi(\mathbf{r})$ ($\mathbf{r} \equiv (x, y, z) \equiv (\boldsymbol{\rho}, z)$) на расстояние z соответствует выражению, которое является точным решением волнового уравнения (волновой пропагатор) [15]:

$$\psi(\boldsymbol{\rho}, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(\mathbf{p}) \exp\left(iz\sqrt{k^2 - p^2}\right) \exp(i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho}) d^2\mathbf{p}. \quad (1)$$

В случае, когда расстояние z достаточно велико, так что выполняется условие дальней зоны:

$$z \gg \frac{\tilde{L}^2}{\lambda}, \quad (2)$$

где $\tilde{L}$ – размер объекта, λ – длина волны, волновой пакет выражается через фурье-образ $\varphi_0(\mathbf{p})$ распределения поля в плоскости объекта [16]:

$$\psi(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{2\pi k}{iz} \frac{z^2}{z^2 + \rho^2} \exp\left(ik\sqrt{z^2 + \rho^2}\right) \varphi_0\left(\mathbf{p} = k \frac{\boldsymbol{\rho}}{\sqrt{z^2 + \rho^2}}\right), \quad (3)$$

при этом $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, а $\varphi_0(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-2} \iint_{-\infty}^{\infty} \psi_0(\boldsymbol{\rho}', 0) \exp(-i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho}') d^2\boldsymbol{\rho}'$. Из вида связи координаты на детекторе и пространственной частоты следует тот факт, что в дальней зоне гармоники объекта с пространственными частотами $p > k$ не могут быть зарегистрированы. Именно это обстоятельство в общем случае определяет связь дифракционного

предела пространственного разрешения с длиной волны излучения $\lambda = 2\pi/k$ [16].

При малых апертурных углах:

$$\tan \theta = \rho/z \ll 1 \quad (4)$$

распространение поля волны описывается интегралом Френеля:

$$\psi(\mathbf{\rho}, z) = \frac{k \exp(ikz)}{2\pi iz} \iint_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{\rho}', 0) \exp\left(ik \frac{|\mathbf{\rho} - \mathbf{\rho}'|^2}{2z}\right) d^2 \mathbf{\rho}', \quad (5)$$

который в дальней зоне переходит в

$$\psi(\mathbf{\rho}, z) = \frac{2\pi k}{iz} \exp\left[ikz \left(1 + \frac{\rho^2}{2z^2}\right)\right] \varphi_0\left(\mathbf{p} = k \frac{\mathbf{\rho}}{z}\right). \quad (6)$$

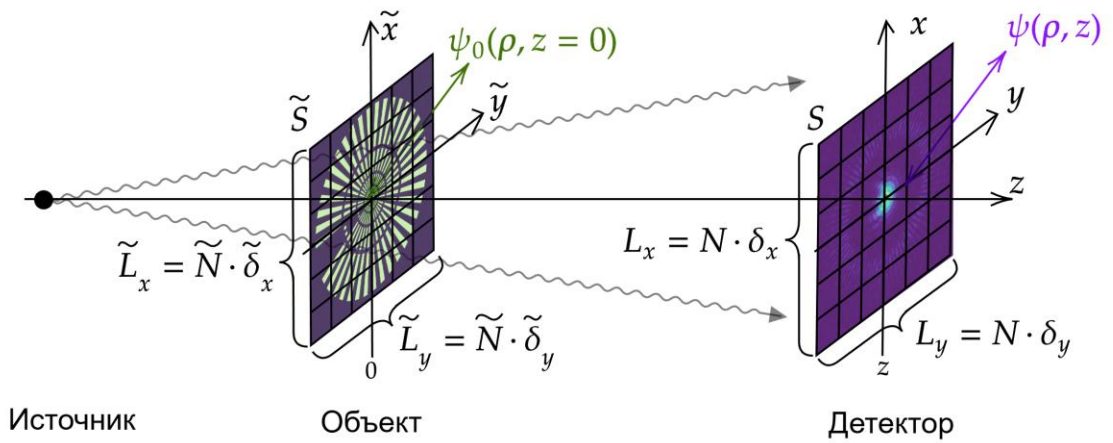


Рисунок 1. Схема эксперимента в методе когерентной дифракционной визуализации

Сравнение аргументов фурье-образов в (3) и (6) и сопоставление фазовых множителей в этих выражениях приводит к следующему ограничению в рамках параксиального приближения [16]:

$$\frac{\tilde{L}^2}{\lambda} \ll z \ll \frac{4}{\pi} \frac{\lambda}{\tan^4 \theta}. \quad (7)$$

На практике вычисление $\varphi_0(\mathbf{p})$ при моделировании распространения излучения сводится к двумерному быстрому преобразованию Фурье (БПФ):

$$F_{pq} \equiv FT\{f\} = (NM)^{-1} \sum_0^N \sum_0^M f_{nm} \exp(-i2\pi pn/N) \exp(-i2\pi qt/M), \quad (8)$$

$$n, p = 0, \dots, N; \quad m, q = 0, \dots, M.$$

Для расчета точного выражения (1) необходимо вычисление двух БПФ: прямого для получения спектра $\varphi_0(\mathbf{p})$ и обратного для вычисления поля в плоскости детектора $\psi(\mathbf{p}, z)$ (рис. 2, а). Тем не менее, в ряде случаев достаточно однократного вычисления БПФ. Так, в условиях дальней зоны (2), где волновое поле на детекторе определяется (3), фурье-образ вычисляется единожды (рис. 2, б).

Если же расстояние z удовлетворяет условию

$$z \geq z_{\text{fre}} = \frac{\tilde{L}\tilde{\delta}}{\lambda}, \quad (9)$$

где $\tilde{\delta}$ – размер пикселя в плоскости объекта, в параксиальном приближении применим подход «виртуальной линзы», который позволяет сохранить используемый для дальней зоны метод расчета распространения излучения [15]. В рамках этого подхода поле вычисляется с учетом введения в плоскость объекта виртуальной рассеивающей линзы с фокусным расстоянием $f = -z$, действие

которой сводится к умножению на заранее вычисляемый фазовый множитель (рис. 2, в):

$$\psi'(\rho, 0) = \psi(\rho, 0) \exp\left(\frac{-ik\rho^2}{2z}\right), \quad (10)$$

после чего к полю $\psi'(\rho, 0)$ применяется выражение (6) для дальней зоны в параксиальном приближении, что эквивалентно вычислению интеграла Френеля (5) от $\psi'(\rho, 0)$. Обратное распространение (от детектора к плоскости объекта) выполняется аналогично с комплексным сопряжением поля [15].

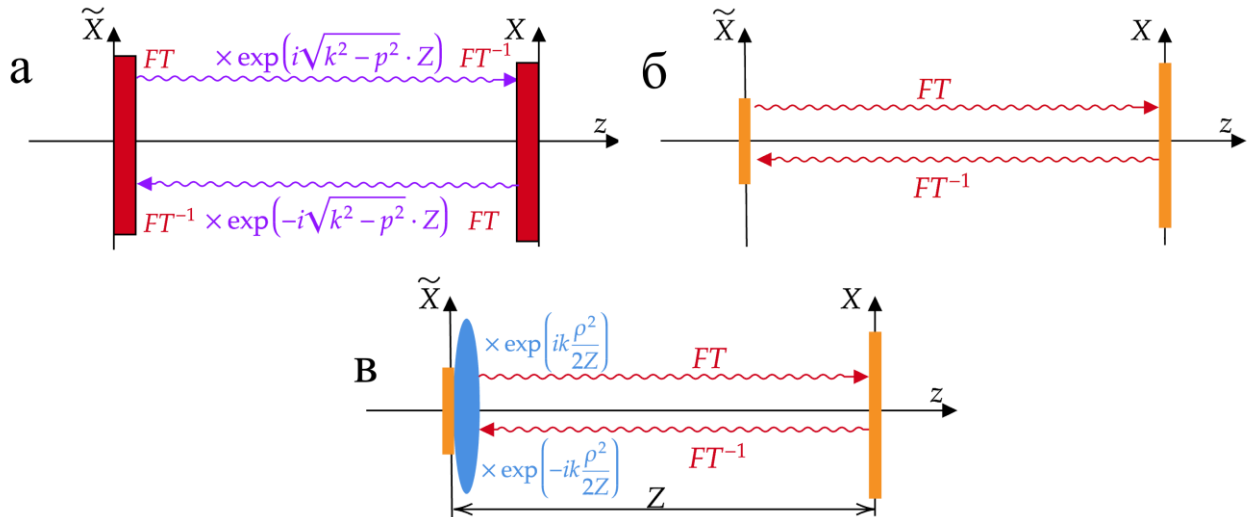


Рисунок 2. Операторы распространения излучения в свободном пространстве; *а* – волновой пропагатор, *б* – преобразование Фурье, *в* – виртуальная линза

1.2. Распространение в среде

При описании распространения поля излучения через оптически неоднородную среду необходимо охарактеризовать отклик электронов среды на внешнее электромагнитное поле. В рамках классической модели осцилляторов электроны рассматриваются как заряженные частицы с массой m_e , набором

собственных частот ω_j и коэффициентов затухания γ_j . Для гармонического внешнего поля $E_0 e^{i\omega t}$ движение электрона описывается уравнением [17]

$$m_e \ddot{x} + m_e \gamma_j \dot{x} + m_e \omega_j^2 x = e E_0 e^{i\omega t}. \quad (11)$$

Подстановка в (11) решения вида $x(t) = \tilde{x} e^{i\omega t}$ дает:

$$\tilde{x} = \frac{e/m_e}{(\omega_j^2 - \omega^2) + i\gamma_j \omega} E_0. \quad (12)$$

Это выражение описывает смещение электрона от положения равновесия по отношению к ядру и связано с возникновением дипольного момента $\tilde{p} = e \cdot x(t) = e \cdot \tilde{x} e^{i\omega t}$. Ансамбль атомов с концентрацией n_a и набором осцилляторных мод с весами g_j определяют объемную поляризацию вещества $\tilde{P}$ и диэлектрическую восприимчивость $\tilde{\chi}_e$ [17]:

$$\begin{aligned} \tilde{P}(t) &= \frac{n_a e^2}{m_e} \left(\sum_j \frac{g_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) + i\gamma_j \omega} \right) E_0 e^{i\omega t}; \\ \tilde{\chi}_e = \tilde{P}/(\epsilon_0 E_0) &= \frac{n_a e^2}{m_e \epsilon_0} \left(\sum_j \frac{g_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) + i\gamma_j \omega} \right) e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (13)$$

С учетом диэлектрических и магнитных проницаемостей вакуума ϵ_0, μ_0 и вещества ϵ, μ , коэффициент преломления среды определяется отношением волнового числа плоской волны в среде k к волновому числу в вакууме k_0 :

$$n = k/k_0 = \frac{\sqrt{\mu \epsilon} \cdot \omega}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \cdot \omega} = \sqrt{(1 + \tilde{\chi}_m)(1 + \tilde{\chi}_e)}, \quad (14)$$

где $\epsilon = \epsilon_0(1 + \tilde{\chi}_e)$ и $\mu = \mu_0(1 + \tilde{\chi}_m)$.

Магнитная компонента электромагнитного поля считается малой по сравнению с электрической, так что для большинства сред $\mu \approx \mu_0$. Принимая также диэлектрическую восприимчивость малой по сравнению с единицей, выражение (14) преобразуется в

$$\begin{aligned} n \approx 1 + \tilde{\chi}_e/2 &= 1 + \frac{n_a e^2}{2m_e \varepsilon_0} \sum_j \frac{g_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) + i\gamma_j \omega} = \\ &= 1 - \frac{n_a e^2}{2m_e \varepsilon_0} \sum_j \frac{g_j [(\omega^2 - \omega_j^2) + i\gamma_j \omega]}{(\omega_j^2 - \omega^2)^2 + \gamma_j^2 \omega^2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Характер зависимости действительной части показателя преломления в широком диапазоне частот представлен на рис. 3. В рентгеновском диапазоне выражение (15) можно рассматривать в высокочастотном пределе, то есть частота вынуждающей силы ω значительно выше резонансных частот ω_j , затуханием при этом можно пренебречь. В этом случае показатель преломления приобретает форму [18]

$$n \cong 1 - \delta(\omega) - i\beta(\omega), 0 < \beta < \delta \ll 1. \quad (16)$$

При описании прохождения излучения через протяженную неоднородную среду применяется метод «сплит-степ», который заключается в пошаговом распространении поля излучения с учетом поглощения и преломления. В рамках этого подхода среда с заданным трехмерным распределением комплексного показателя преломления (15, 16) вдоль направления распространения излучения разбивается на N плоскопараллельных слоев толщиной δz , в каждом из которых показатель преломления вдоль этого направления считается постоянным. Пусть в некоторой плоскости z напряженность поля монохроматического излучения равна $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, z)$, тогда после прохождения излучением расстояния δz напряженность $\tilde{\mathbf{E}}$ станет [1]

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, z + \delta z) &= \exp[(\hat{\mathcal{D}} + \hat{\mathcal{S}})\delta z] \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, z) \approx \\
&\approx \exp(\hat{\mathcal{S}}\delta z) \exp(\hat{\mathcal{D}}\delta z) \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, z) = \\
&= \exp(-ikn(\mathbf{r}, z)\delta z) \cdot FT^{-1} \left\{ \exp \left[-i \left(p_x^2 + p_y^2 \right) \delta z / (2k) \right] \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, z) \right\},
\end{aligned} \tag{17}$$

где оператор $\hat{\mathcal{D}}$ отвечает за свободное распространение, оператор $\hat{\mathcal{S}}$ – за преломление и затухание в среде, FT^{-1} – обратное преобразование Фурье.

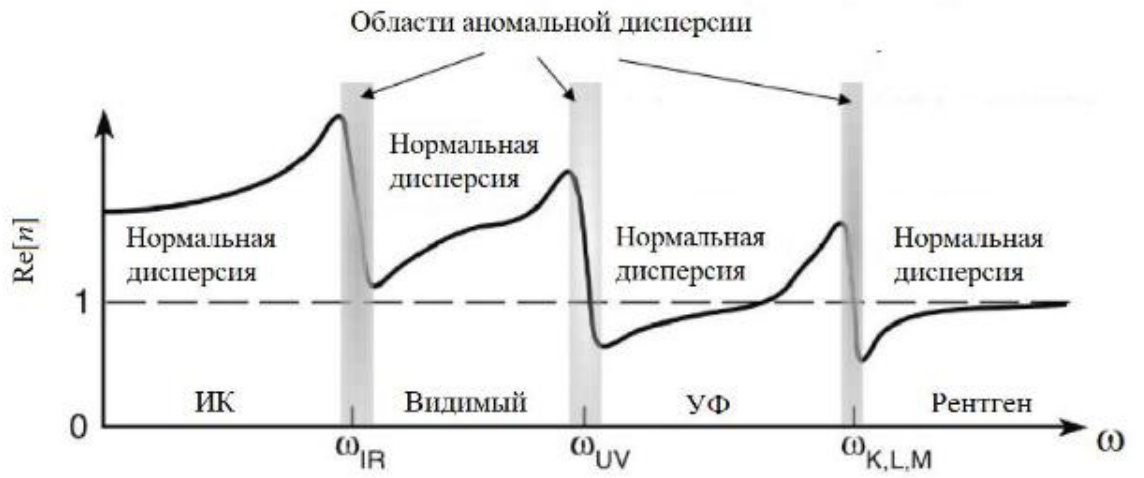


Рисунок 3. Дисперсия действительной части показателя преломления в широком частотном диапазоне

2. МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ РЕКОНСТРУКЦИИ ФАЗЫ

Задача восстановления фазы в когерентных безлинзовых методах визуализации является обратной. Ее суть состоит в восстановлении пространственного распределения волнового поля в плоскости объекта по измеренным результатам его взаимодействия с измерительной системой.

В наиболее общей форме искомая функция объекта связана с зарегистрированными данными операторным соотношением

$$D = P * O + N, \quad (18)$$

в котором процесс измерения данных (интенсивности) D в плоскости детектора описывается операцией свертки функции объекта O с аппаратной функцией системы P в присутствии шума N [19].

Функция объекта O содержит в себе искомую информацию о структурных и материальных свойствах исследуемого образца. Для точного и однозначного определения аппаратной функции необходима информация о характере взаимодействия излучения в измерительной системе. В конечном счете, это сводится к вопросу выбора оператора распространения электромагнитных волн в свободном пространстве, связывающего распределение поля в плоскости объекта с полем в плоскости детектора [19]. В наиболее общей постановке этот оператор задается функцией Грина уравнения Гельмгольца [20].

В реальном эксперименте процесс измерения поля излучения, рассеянного объектом, осложняется наличием шума. Присутствие шума связывают с наличием систематических ошибок в виде несовершенств параметров установки, в частности, источника излучения и детектора; в результате этого задача может стать некорректной.

Таким образом, наиболее общая постановка задачи в методах реконструкции фазы подразумевает разработку устойчивого алгоритма, позволяющего вычислить функцию объекта по зарегистрированному распределению интенсивности рассеянного поля с учетом физической модели измерения и при наличии шума.

2.1. Итерационные алгоритмы восстановления фазы

Алгоритм Гершберга–Сакстона является одним из первых итерационных методов решения задачи восстановления фазы. Формулировка этой задачи включает в себя две параллельные плоскости, а именно плоскость объекта S и детектора S' . На каждой из плоскостей известно распределение интенсивности $|\psi_0(\mathbf{r}', 0)|^2, |\psi(\mathbf{r}, z)|^2$, а также задан оператор распространения $\mathcal{F}$, описывающий переход волнового поля от объекта к детектору и обратно. Таким образом, задача Гершберга–Сакстона заключается в восстановлении комплексных полей на плоскостях объекта и детектора, которые соответствуют обоим наборам измеренных данных и заданному пропагатору [4].

Итерационное восстановление комплексных полей в алгоритме Гершберга–Сакстона представляет собой последовательное чередование ограничений в прямом и обратном пространстве в виде подстановки измеренных модулей полей. Типичная итерация алгоритма состоит из четырех этапов (рис. 4):

- 1) Строится текущая оценка поля в плоскости объекта. Амплитуда поля заменяется на измеренную (применяется ограничение объекта) $\psi_{k+1}(\mathbf{r}) = \psi'_k(\mathbf{r})$;
- 2) Поле переносится пропагатором в плоскость детектора $\Psi_k(\mathbf{p}) = \mathcal{F}[\psi_k]$;
- 3) На плоскости детектора выполняется замена текущей амплитуды на известную (применяется Фурье-ограничение) $\Psi'_k(\mathbf{p}) = \sqrt{I(\mathbf{p})} \cdot \Psi_k(\mathbf{p}) / |\Psi_k(\mathbf{p})|$;

- 4) Выполняется обратное распространение поля на плоскость объекта $\psi'_k(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1}[\Psi_k]$.

Описанный цикл повторяется многократно, причем каждая итерация уменьшает расхождение между вычисленным и экспериментальным распределениями интенсивности [21]. Восстановление фазы в этом случае осуществляется путем последовательного проецирования текущего решения на два множества ограничений в прямом и в обратном пространстве до достижения заданной точности.

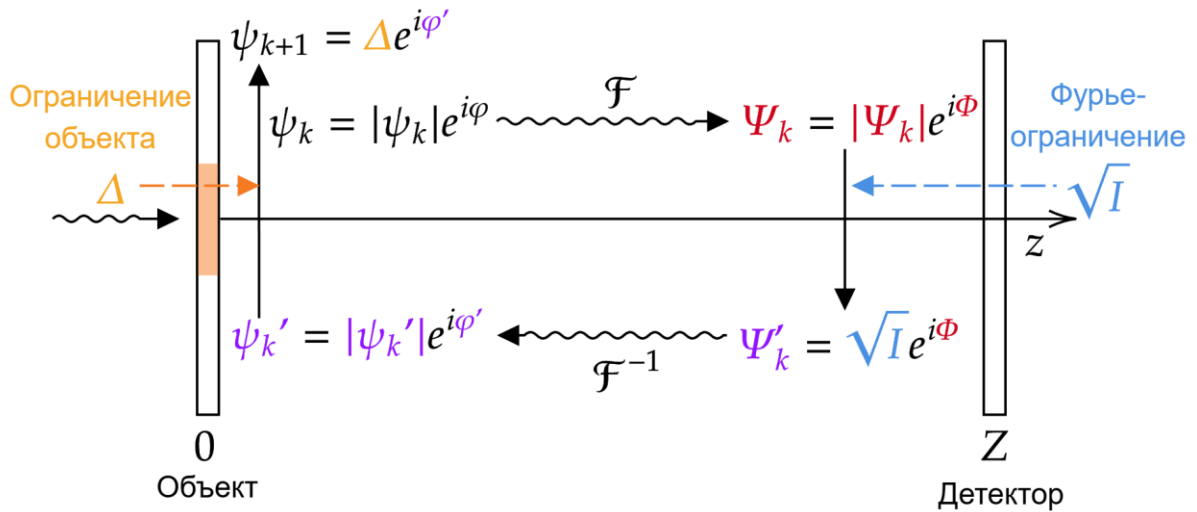


Рисунок 4. Схема итерации алгоритма восстановления фазы

Значительный прогресс был достигнут в работе [22], где были описаны алгоритм снижения ошибки (Error Reduction, ER) и гибридный алгоритм ввода-вывода (Hybrid Input-Output, HIO), ставшие базовыми инструментами в практической реконструкции фазовых объектов итерационным путем [21].

Рассматриваемые алгоритмы решают более общую задачу, характерную для эксперимента: требуется найти комплексную функцию объекта, которая воспроизводит в плоскости детектора зарегистрированную интенсивность. При

этом в качестве ограничений в пространстве объекта выступает некая априорная информация об объекте.

В алгоритме снижения ошибки решение корректируется ограничением объекта вида [22]:

$$\psi_{k+1}(\rho) = \begin{cases} \psi'_k(\rho), & \rho \in \gamma, \\ 0, & \rho \notin \gamma. \end{cases} \quad (19)$$

Здесь γ обозначает множество точек в плоскости объекта, вне которого значения $\psi'_k(\rho)$ отрицательны или отличны от нуля вне области, внутри которой содержится образец.

С вычислительной точки зрения ER можно интерпретировать как метод градиентного спуска для минимизации функционала ошибки. В данном случае функционал выражается в виде энергии поля в области, не удовлетворяющей ограничениям объекта ($\rho \notin \gamma$) [22]:

$$\varepsilon_k = \sum_{\rho} |\Psi'_k - \Psi_k|^2 \quad (20)$$

Вследствие того, что ER накладывает строгие ограничения на поле в плоскости объекта, алгоритм становится чувствительным к локальным минимумам функционала, что является его ключевым недостатком. Для преодоления этого ограничения был предложен гибридный алгоритм ввода-вывода НЮ, в котором нарушение ограничений не приводит к немедленному обнулению решения, а вызывает его переопределение с отрицательной обратной связью $0 < \beta < 1$ [22]:

$$\psi_{k+1}(\rho) = \begin{cases} \psi'_k, & \rho \in \gamma, \\ \psi_k - \beta \psi'_k, & \rho \notin \gamma. \end{cases} \quad (21)$$

Данная модификация ограничений объекта повышает вероятность выхода из неудачной области сходимости. Тем не менее, алгоритм НЮ допускает колебания функционала ошибки, что отличает его от ER, который обеспечивает медленное, но монотонное приближение к решению [24]. В связи с этим на практике в CDI реализуется стратегия, которая заключается в комбинировании алгоритмов ER и НЮ. Несколько десятков итераций гибридного алгоритма ввода-вывода обеспечивают быстрый поиск глобального решения, а последующая серия итераций алгоритма снижения ошибки стабилизирует реконструируемое комплексное поле [23].

Несмотря на то, что вышеописанные алгоритмы обеспечивают сходимость функционала ошибки решения к глобальному минимуму, в ряде ситуаций они могут демонстрировать медленную сходимость. Это стимулировало развитие целого семейства модифицированных итерационных алгоритмов на основе ER и НЮ [21], в которых идея поочередного наложения ограничений в плоскости объекта и детектора сохраняется, однако переход к новому шагу итерации происходит путем комбинирования операторов проекций $\hat{P}_F(\psi)$:

$$\hat{P}_F(\psi) = F \cdot \frac{\psi}{|\psi|}, \quad (22)$$

операторов отражений $\hat{R}_F(\psi)$:

$$\hat{R}_F(\psi) = 2\hat{P}_F(\psi) - \psi = 2F \cdot \frac{\psi}{|\psi|} - \psi \quad (23)$$

и параметров релаксации, призванного повысить устойчивость алгоритмов к шумам и уменьшить вероятность застревания в локальных минимумах. К таким методам относятся, в частности, алгоритм релаксированных усредненных попеременных отражений («Relaxed Averaged Alternating Reflections», RAAR) [25].

2.2. Методы на основе CDI

В классической схеме эксперимента CDI когерентный монохроматический пучок освещает изолированный образец, а на удаленном детекторе регистрируется дифракционная картина, пропорциональная квадрату модуля фурье-образа прошедшего через объект комплексного поля волны. В этом случае используется геометрия на прохождение, т. е. плоская волна проходит через тонкий объект (рис. 5, *а*). К достоинствам такой схемы относят относительную простоту геометрии эксперимента, а также возможность съемки в одноимпульсном режиме, что позволяет исследовать объекты в динамике. Вместе с тем, в классической CDI предъявляются строгие требования к степени когерентности источника и изолированности объектов для задания ограничений области объекта [26].

Одним из вариантов развития схемы CDI является когерентная дифракционная визуализация с модуляцией (с англ. «Coherent Modulation Imaging», CMI) [27], [28]. Эта модификация метода предполагает наличие на пути между объектом и детектором заранее охарактеризованного модулятора, вносящего известное пространственное изменение комплексного поля (рис. 5, *б*). Наличие модулятора делает дифракционную картину более информативной с точки зрения фазовой проблемы, что позволяет ускорить сходимость функционала ошибки алгоритмов и ослабить требования к ограничениям образца [26]. В контексте анализа данных CMI опирается на итерационные алгоритмы CDI, за исключением наличия в операторе распространения компоненты, описывающей модуляцию поля. Это несколько усложняет математическую постановку, но все еще позволяет реализовать одноимпульсную съемку и реконструкцию динамики в фазовых объектах с повышенной устойчивостью к шумам. CMI демонстрирует устойчивость восстановления даже в отсутствие части дифракционных данных [27].

Помимо геометрии на пропускание, существует реализация CDI в отражательной геометрии (рис. 5, *в*) [29]. Такая конфигурация (с англ. «Reflection

CDI», RCDI) эффективна при исследовании поверхностей и тонких пленок. Основным преимуществом RCDI является высокая чувствительность к поверхностным и приповерхностным структурам. По сравнению с пропусканием, однако, анализ данных в RCDI весьма затруднен, так как учет геометрии скользящего падения требует видоизменения модели распространения излучения [26]. Кроме того, к недостаткам метода причисляют сложность создания и юстировки экспериментальной установки.

В Брэгг-CDI («Bragg CDI», BCDI) объектом исследования является одиночный нанокристалл, освещаемый когерентным рентгеновским пучком в окрестности конкретного брэгговского максимума, то есть образец устанавливается так, что для выбранной отражательной плоскости выполняется условие Брэгга (рис. 5, *г*) [30]. Многократное экспонирование образца при различной ориентации формирует трехмерное распределение дифракционной картины вокруг брэгговского пика [26]. При реконструкции в BCDI восстанавливается трехмерное распределение комплексной плотности в решетке нанокристалла, при этом модуль соответствует электронной плотности, а фаза связана с полем смещений и тензором напряжений. К достоинствам BCDI относится возможность трехмерной картографии напряжений, дефектов, дислокаций и доменных структур в нанокристаллах при неразрушающем характере измерений, что делает Брэгг-CDI особенно востребованным для изучения нанокатализаторов, электродных материалов для батарей, биоминералов и др., в том числе для исследования эволюции дефектов и напряжений *in operando* [6], [31]. Ключевым препятствием анализа данных является необходимость точного учета геометрии рассеяния и преобразования фазовой информации в реальные компоненты поля деформаций.

Томографическая модификация CDI наряду с брэгговской когерентной дифракционной визуализацией позволяет восстанавливать трехмерные структуры вместе с фазовой информацией [32], [33]. В этом случае при различных ориентациях образца (или различных положениях зондирующего

пучка) в рентгеновском диапазоне регистрируется набор дифракционных картин (рис. 5, *д*). Следует отметить, что постановка обратной задачи в CDI-томографии включает в себя не только восстановление фазы для каждого направления, но и решение некорректной задачи с обратным преобразованием Радона или его аналога в условиях неполного углового покрытия, ограниченной дозы и шума. Возможность получения трехмерных карт распределений показателя преломления вплоть до нанометрового разрешения является существенным достоинством этой реализации CDI [3]. Недостатки данного метода напрямую связаны с ограничениями томографии, такими как требование высокой механической стабильности установки и сложность обработки данных [1].

В контексте гибридных методов, включающих в себя CDI, необходимо отметить также объединение CDI с голографией (HCDI). В голографической HCDI в схему вводится сформированная опорная волна, так что на детекторе регистрируется интерференционная картина, содержащая компоненты дифракционной картины и опорной волны (рис. 5, *е*) [34]. Реализация метода допускает как геометрию на пропускание, так и геометрию на отражение. Такое усовершенствование позволило улучшить устойчивость фазовой реконструкции и снизить поглощаемую образцом дозу излучения. Особенностью анализа данных в HCDI является возможность использовать дополнительную информацию, вносимую голографией, для быстрого начального восстановления или для частичного разрешения неоднозначностей, характерных для классической схемы CDI, после чего итоговое решение уточняется итерационными алгоритмами [26]. Вместе с рядом преимуществ, дополнительная опорная волна усложняет осуществление эксперимента, поскольку требует дополнительной юстировки опорного пучка. Метод HCDI нашел применение в исследованиях магнитных доменных структур, динамических фазовых переходов, а также для визуализации биологических образцов [35], [36].

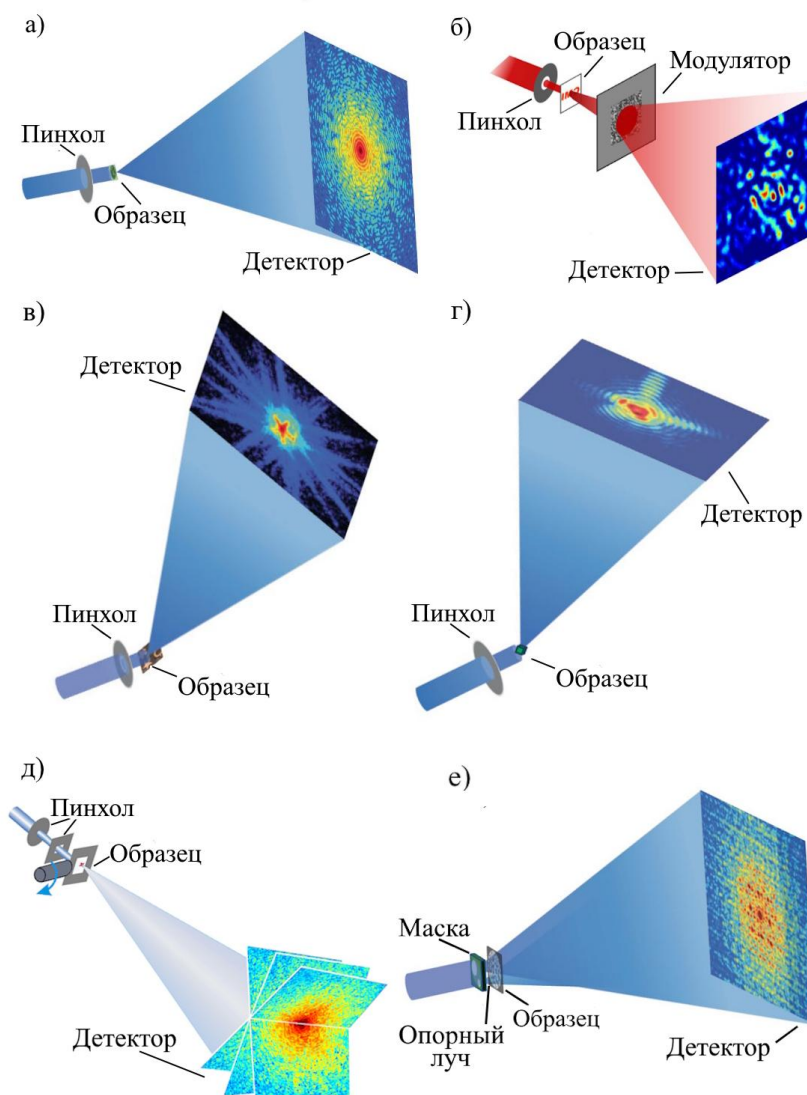


Рисунок 5. Схемы экспериментальных реализаций методов на основе CDI. Буквами обозначены: *а* – традиционная схема CDI, *б* – CDI с модуляцией (CMI), *в* – CDI с отражением (RCDI), *г* – Брэгг-CDI (BCDI), *д* – томографическая CDI, *е* – CDI с голографией (HCDI). Адаптировано из [26], [27], [33]

2.3. Птихография

Птихография представляет собой сканирующую разновидность когерентной дифракционной визуализации. В рамках этого метода осуществляется восстановление комплексного поля как протяженного объекта, так и поля излучения освещающего пучка [37].

В простейшей схеме эксперимента когерентный источник формирует в плоскости образца ограниченный по размеру зондирующий пучок $\mathcal{P}(\mathbf{p}')$ (рис. 6, *a*). Система позиционирования последовательно смещает объект $\mathcal{O}(\mathbf{p}')$ по дискретному набору позиций $\mathbf{p}_i$ ($i = 1, 2, \dots$), причем шаг смещения выбирается так, чтобы соседние экспонируемые области существенно перекрывались. Для каждого положения зонда на двумерном детекторе регистрируется дифракционная картина интенсивности I_i [38]. Задача реконструкции фазы в птихографии заключается в нахождении таких распределений $\mathcal{O}(\mathbf{p}')$ и $\mathcal{P}(\mathbf{p}')$, которые для всех позиций зонда воспроизводят измеренные интенсивности, при этом значительное перекрытие сканируемых областей обеспечивает необходимую избыточность и устраняет неоднозначность восстановления изображения объекта.

Первые практические реализации птихографии были связаны с появлением алгоритма PIE (Ptychographical Iterative Engine). Концептуально он имеет схожую с классическими алгоритмами восстановления фазы в CDI структуру, однако, в отличие от CDI, использует дополнительную информацию о перекрывающихся сканах. PIE работает с одним дифракционным паттерном поочередно и на каждом шаге использует следующие операции: формирование выходной волны $\psi_i(\mathbf{p}') = \mathcal{P}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}_i) \cdot \mathcal{O}(\mathbf{p}')$, ее распространение на плоскость детектора, применение Фурье-ограничения, обратное распространение и обновление функций объекта и зонда. Процедура обновления происходит только в области зонда и включает в себя определение новой выходной волны $\psi'_i(\mathbf{p}')$ и разности $\psi'_i - \psi_i$, трактуемой как коррекция, которую следует внести в объект и зонд в данной освещенной области. Алгоритм PIE последовательно перебирает все позиции $\mathbf{p}'_i$, обновляя объект и зонд по указанным правилам. Многократное повторение прохождения алгоритма по всем точкам сканирования приводит к постепенному согласованию полученных дифракционных картин с измеренными [37].

2.4. Методы на основе птихографии

Птихография, так же, как и CDI, имеет широкий ряд различных экспериментальных конфигураций. Многие из них воспроизводят схемы экспериментов, особенности и ограничения аналогичных методов в когерентной дифракционной визуализации (Брэгг-птихография [39] – Брэгг-CDI, птихография с отражательной геометрией [40] – RCDI, птихотомография [41] – томографическая CDI, кодированная птихография [42] – CMI). Тем не менее, стандартная схема птихографии ввиду особенности сбора данных и реконструкции изображений стала отправной точкой для ряда иных специфических расширений, адаптированных для решения различных классов исследовательских задач.

Метод Фурье-птихографии адаптирует принципы птихографии к линзовой оптической микроскопии [38]. В нем объект освещается плоскими волнами, создаваемыми программируемой светодиодной матрицей, при различных углах падения, а изображения регистрируются объективом с числовой апертурой NA_{obj} (рис. 6, б) [43]. Последовательная запись изображений при различных углах обеспечивает смещение фурье-образа объекта внутри апертуры объектива, что создает избыточность, аналогичную перекрытию зондов и позволяет синтезировать гораздо более высокую эффективную числовую апертуру $NA_{eff} = NA_{obj} + NA_i$ с числовой апертурой пучка излучения $NA_i = \sin \beta$, падающего под максимальным углом β [26], [38]. Метод привлекателен для оптических исследований биологических тканей и клеток благодаря простоте оснащения и широкому полю зрения при высоком разрешении [43]. Его недостатками являются чувствительность к нестабильности освещения и необходимость точной калибровки положений источников в матрице [44].

Спектроскопическая птихография (спектро-птихография) использует зависимость комплексного показателя преломления элементов, из которых состоит объект, от длины волны вблизи краев поглощения этих элементов. На

каждой длине волны в диапазоне, охватывающем край поглощения присутствующего в образце элемента, регистрируется отдельная птихограмма. Таким образом, спектро-птихография объединяет ключевые преимущества птихографии с элементным и химически-специфическим картированием абсорбционной спектроскопии [37]. Метод применяется для картирования химического состава, степеней окисления и магнитного состояния вещества в мягком рентгеновском диапазоне [45]. Практическим ограничением является необходимость использования перестраиваемого источника с высокой яркостью, а также значительное время набора данных из-за необходимости выполнять полное сканирование на каждой длине волны.

Альтернативный подход позволяет не разделять спектральные компоненты физически, а регистрировать их одновременно и разделять на этапе обработки птихограмм [46]. В данном случае источник обладает широкой полосой спектра генерируемого излучения, и измеренная дифракционная картина является некогерентной суммой вкладов нескольких длин волн (рис. 6, в). Смешанный сигнал от разных гармоник моделируется как некогерентная сумма картин, каждая из которых описывается своей парой функций «объект–зонд», а реконструкция восстанавливает все пары одновременно. За счет сканирования полихроматическим пучком достигается увеличение потока фотонов, попадающих на образец, одновременно с этим производится спектральная характеристика образца. Это позволяет значительно снизить время экспозиции и дозу излучения [47], [48]. Однако, следует учесть, что данная конфигурация требует большего перекрытия сканируемых областей и увеличения числа точек сканирования для успешной реконструкции.

2.5. Другие методы восстановления фазы

Наряду с рассмотренными выше итеративными методами восстановления комплексного поля объекта по измеренным дифракционным картинам существует обширное семейство неитеративных подходов, фазовая информация в рамках которых может быть извлечена как аналитически, так и с

использованием специфических экспериментальных схем. Понимание их принципов и областей применимости необходимо для определения места CDI/птихографии, занимаемого среди современных методов фазочувствительной визуализации.

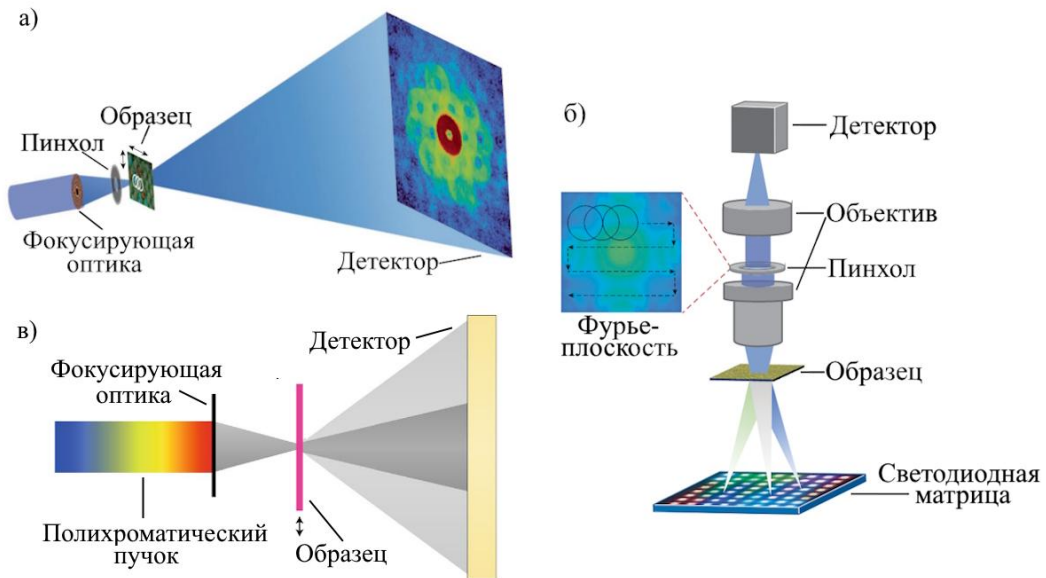


Рисунок 6. Схемы экспериментальных реализаций методов на основе птихографии. Буквами обозначены: *а* – традиционная схема птихографии, *б* – Фурье-птихография, *в* – спектроскопическая птихография. Адаптировано из [26], [37]

Уравнение переноса интенсивности (с англ. «Transport of Intensity Equation», TIE) описывает связь между продольной производной интенсивности и поперечным распределением фазы для когерентного поля излучения с огибающей $u(x, y, z) = \sqrt{I(x, y, z)} \cdot \exp(i\varphi(x, y, z))$, удовлетворяющего параксиальному приближению (5). В простейшей форме оно записывается как:

$$\frac{\partial I(x, y, z)}{\partial z} = -\frac{\lambda}{2\pi} \nabla_{\perp} [I(x, y, z) \nabla_{\perp} \varphi(x, y, z)], \quad (24)$$

где $\nabla_{\perp}$ – оператор поперечного градиента [49], [50]. На практике ТІЕ реализуется через регистрацию нескольких изображений объекта (рис. 7, а). Измеренные на разных расстояниях интенсивности используются для численной аппроксимации $\partial I / \partial z$, после чего задача восстановления сводится к решению уравнения (24) [21]. Этот расчет может быть реализован аналитически (в предположении слабого поглощения и однородной интенсивности) или численными методами. Решение уравнения ТІЕ лежит в основе фазоконтрастного безлинзового метода РВ-РСІ (с англ. «Propagation-Based Phase Contrast Imaging») [1], [51], который стал стандартным инструментом рентгеновской фазовой микроскопии однородных объектов, включая биологические ткани и материалы с относительно малой неоднородностью по составу.

В методе спеклового фазового контраста (с англ. «Speckle-Based Phase Contrast Imaging», SB-РСІ) фазовая информация извлекается из статистических изменений случайных спекловых полей [52]. В типичной реализации между источником и объектом располагается рассеивающая маска-диффузор, формирующая на детекторе устойчивую, но нерегулярную спекловую картину (рис. 7, б). Объект, помещенный в этот спекловый пучок, вызывает локальные поперечные смещения, размытие и изменение контраста спеклов на детекторе. Сопоставляя полученную картину в присутствии объекта с опорным изображением спеклов, определяют поле поперечных сдвигов вместе с размытием и снижением видности [53]. В связи с этим, в SB-РСІ требования к когерентности источника значительно мягче. Ключевым ограничением является чувствительность к механической нестабильности маски относительно объекта и детектора. Разрешение метода определяется характерным размером спеклов [54].

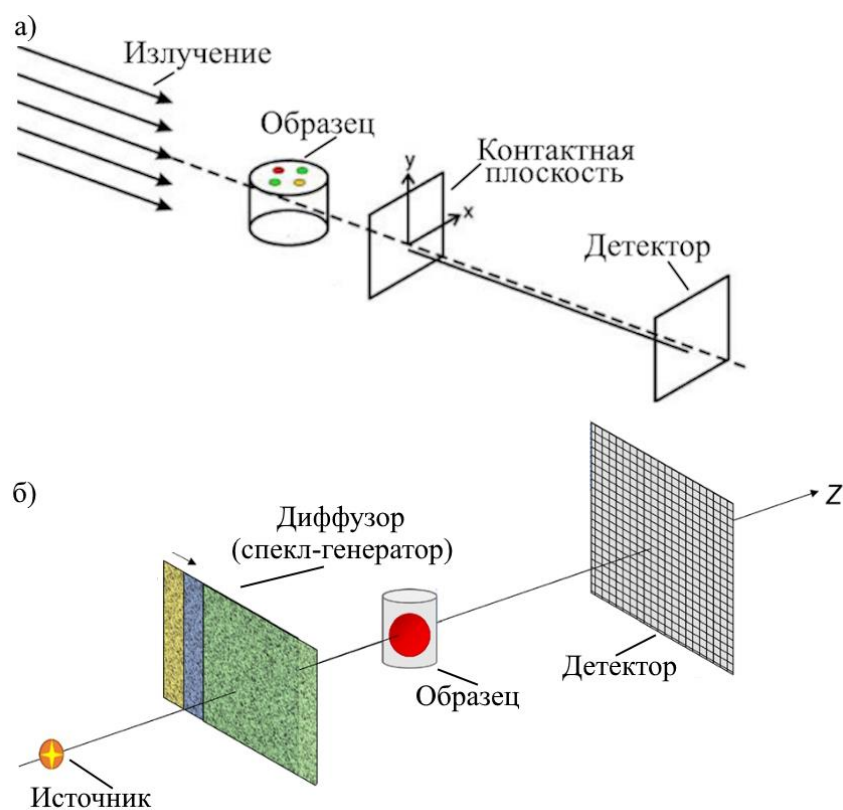


Рисунок 7. Схемы экспериментальных реализаций альтернативных методов безлинзовой реконструкции фазы. Буквами обозначены: *а* – метод на основе решения уравнения переноса интенсивности, *б* – метод спеклового фазового контраста. Адаптировано из [50], [53]

3. ОГРАНИЧЕНИЯ АЛГОРИТМОВ CDI

3.1. Существование и единственность решения

В общем случае восстановление комплексного поля из модуля фурье-образа не дает однозначного решения. Допускается существование множества решений, элементы которого имеют одинаковый модуль фурье-образа. Если обратная задача реконструкции имеет решение $\psi(\mathbf{p})$ (рис. 8, а), то решениями этой задачи будут следующие наборы функций, называемые тривиальными неоднозначностями [21]:

1. Множество функций с произвольным фазовым сдвигом: $\psi(\mathbf{p}) \exp(i\phi)$ (рис. 8, б);
2. Множество функций $\psi(\mathbf{p} + \mathbf{p}_0)$ с произвольным пространственным сдвигом $\mathbf{p}_0$ (рис. 8, в);
3. Комплексно-сопряженная функция с инверсией: $\psi^*(-\mathbf{p})$ (рис. 8, г).

Глобальный фазовый сдвиг не представляет практической проблемы, а третья неопределенность снимается при реконструкции изображений нецентросимметричных объектов. Вместе с тем пространственный сдвиг представляет собой особую трудность в контексте восстановления движущихся объектов в условиях отсутствия данных об их точном позиционировании. Во избежание возникновения этой неоднозначности экспериментально применяют метки, позволяющие определять относительное положение объекта на каждом снятом кадре.

Следует отметить, что существование и единственность решения описываемой задачи существенно зависит от размерности решения. В одномерном случае задача не имеет единственного решения даже при наличии строгих ограничений объекта [55]. При переходе к пространствам высших размерностей (размерность ≥ 2) решение может быть восстановлено с точностью до вышеописанных тривиальных неоднозначностей. Для

вещественных двумерных сигналов была доказана однозначность решения на множестве полной меры, тогда как для более сложных случаев (в т.ч. для комплексных распределений) доказательство единственности остается открытым вопросом [21].

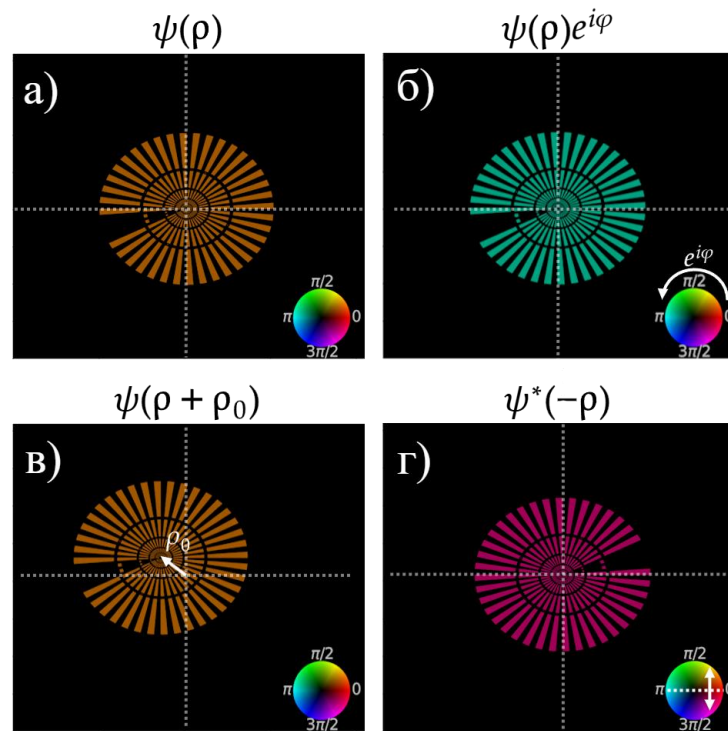


Рисунок 8. Тривиальные неоднозначности, возникающие при восстановлении фазы. Буквами обозначены: *а* – исходное изображение, *б* – изображение с фазовым сдвигом, *в* – изображение с пространственным сдвигом, *г* – комплексно-сопряженная инверсия

3.2. Оверсэмплинг и априорная информация об объекте

Возможность восстанавливать комплексное поле излучения по измеренному модулю его фурье-образа принципиально обусловлена достаточным уровнем переопределенности (оверсэмплинга, с англ. «oversampling») системы уравнений, связывающих набор неизвестных в плоскости объекта с измеренными данными. Пусть объект характеризуется двумя наборами переменных (действительная и мнимая часть комплексного

числа), число значений в каждом из которых равно M^d (здесь и далее d – размерность задачи), тогда число уравнений N^d должно удовлетворять условию [56]:

$$N^d \geq 2M^d; \sigma = (N/M) \geq 2^{1/d}. \quad (25)$$

Коэффициент σ называется линейным коэффициентом оверсэмплинга и характеризует соотношение числа точек на измеренной дифракционной картине к числу неизвестных точек на объекте. Физически условие (25) означает изолированность объекта, то есть число уравнений увеличивается за счет дополнения нулями значений поля в плоскости объекта.

Условие оверсэмплинга должно выполняться для каждого пространственного измерения, поскольку при нарушении (25) даже по одному измерению восстановленное изображение содержит неустраняемые артефакты [56] (рис. 9). Необходимо также отметить, что на практике для успешной реконструкции требуемое значение σ может быть выше [57].

Итерации алгоритмов восстановления изображений включают в себя этап применения ограничений объекта. Ограничения объекта определяются путем задания области γ , внутри которой содержится восстанавливаемый объект, и точность его задания в значительной мере определяет качество реконструкции. Некорректное определение γ зачастую является одной из ключевых причин неудачного восстановления, поскольку слишком большой размер области снижает степень предопределенности [1], а при задании малого размера этой области возможно отсечение реальных частей объекта, что делает задачу его восстановления неразрешимой [58].

Форма ограничения объекта не играет ключевой роли в контексте качества восстановления, однако более жесткое ограничение способно значительно ускорить сходимость алгоритмов. С экспериментальной точки зрения форма и протяженность объекта могут быть установлены комплементарными методами

микроскопии. В условиях отсутствия возможности применения сторонних методов для получения априорной информации об объекте, в качестве ограничения применяется прямоугольная область, удовлетворяющая условию (25) или размытая автокорреляционная функция объекта. Автокорреляционная функция может быть получена из модуля фурье-образа дифракционной картины [56].



Рисунок 9. Влияние коэффициента пероопределенности на результат восстановления изображения. Буквами обозначены: *а* – исходное изображение с $\sigma = 2$ для всех направлений; *б* – результат восстановления изображения *а*; *в* – исходное изображение, в котором условие оверсэмплинга было нарушено вдоль горизонтального направления; *г* – результат восстановления изображения *в*

Наиболее эффективным подходом, используемым для устранения неопределенности, связанной с построением ограничения объекта, является метод термоусадочной оболочки (с англ. «shrinkwrap») [59] динамической коррекции γ в процессе реконструкции. В данной работе была предложена полуавтоматическая модификация этого подхода – метод адаптивной маски. Процесс динамического уточнения области для ограничений объекта содержит в себе следующие этапы (рис. 10):

1. Задается начальное распределение комплексного поля в плоскости объекта, которое может быть сформировано случайным образом. На это распределение накладывается прямоугольная бинарная маска, размер которой выбирается таким образом, чтобы удовлетворять условию оверсэмплинга;
2. Определенное на предыдущем шаге поле подается на вход алгоритмов восстановления фазы (в настоящей работе использовались блоки, состоящие из комбинации алгоритма НЮ и ER), при этом последовательно уточняется распределение поля. При применении ограничения объекта используется заданная прямоугольная область;
3. Результирующее поле в плоскости объекта вновь проходит через ту же последовательность алгоритмов с сохранением текущего ограничения. Эта процедура повторяется заданное количество раз;
4. Полученный таким образом набор амплитуд комплексного поля объекта подвергается усреднению. К усредненному распределению модуля поля после применяется пороговая фильтрация, а также регулируемое число морфологических операций эрозии и дилатации, что позволяет сформировать новое, скорректированное ограничение носителя, которое применяется в следующем цикле итераций (с п.2).

3.3. Ограничения при регистрации дифракционных данных

Наряду с вышеописанными ограничениями, реальные эксперименты по когерентной дифракционной визуализации неизбежно сопровождаются шумами

различной природы, вносящими вклад в искажение реконструируемого изображения. Наличие шума нарушает точное соответствие модуля фурье-образа поля и квадратного корня из измеренной детектором интенсивности, что приводит к снижению скорости сходимости алгоритмов восстановления и появлению артефактов, что снижает результирующее пространственное разрешение [56].

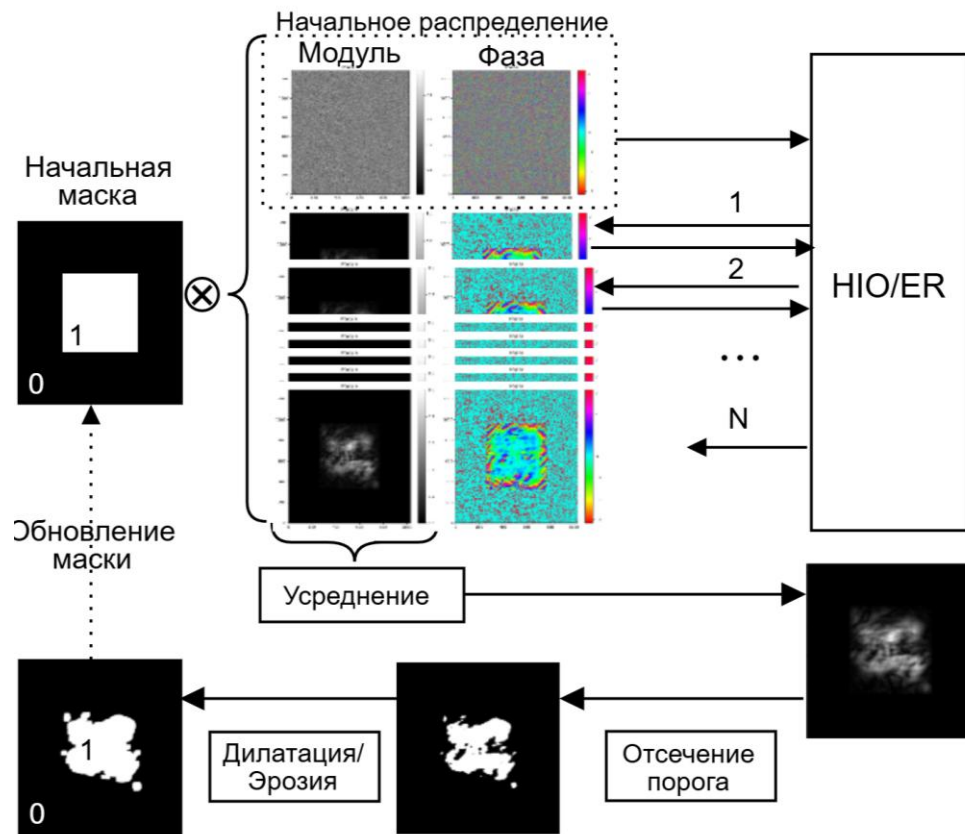


Рисунок 10. Схема реализации автоматической коррекции области объекта методом адаптивной маски

В формулировке обратной задачи восстановления фазы (12) допускается, что шумы N имеют аддитивный характер, тогда как в действительности они могут иметь иную модель влияния на систему [60]. Выделяют несколько источников зашумления при регистрации дифракционных картин: пуассоновский фотонный шум, шум и искажения при регистрации детектором, а

также паразитное рассеяние при распространении излучения от образца до детектора.

Пуассоновский шум является одним из доминирующих вкладов в зашумление данных в экспериментах CDI [21]. Поскольку регистрируемая детектором интенсивность пропорциональна числу фотонов N_{ph} , зарегистрированных пикселем детектора, стандартное отклонение шума Пуассона равно $\sigma_{Poisson} = \sqrt{N_{ph}}$. При этом отношение сигнал-шум (с англ. «Signal-to-Noise Ratio», SNR) составляет $SNR = N_{ph}/\sqrt{N_{ph}} = \sqrt{N_{ph}}$. Таким образом, в периферийных областях дифракционной картины, содержащих высокочастотную информацию об объекте, число фотонов невелико и SNR оказывается крайне низким. Наряду с этой составляющей шума, несовершенства детектора, например, неоднородность считывания сигнала, дефектные пиксели, дробовой шум и др., также вносят искажения в дифракционную картину.

Устранение вышеперечисленных типов шумов начинается на уровне проведения эксперимента. Повышение времени экспозиции позволяет увеличить соотношение сигнал-шум за счет накопления числа фотонов, зарегистрированных детектором. Следует подчеркнуть, что длительность экспозиции должна определяться исходя из предельной дозы излучения, поглощаемой детектором без значительной деградации его характеристик. Альтернативным способом увеличения SNR служит усреднение по многократным измерениям [56].

Регистрация калибровочных изображений также является стандартным методом избавления от шумов на дифракционной картине. Измерение «темного» изображения без источника излучения позволяет оценить аддитивную составляющую шума, связанную с темновым током детектора. Для устранения мультипликативной компоненты шума, вызванной неоднородностью пикселей детектора и распределения поля излучения используется измеренная интенсивность «белого» пучка [18].

В тех случаях, когда экспериментальные способы устранения зашумления затруднительны в реализации, применяют фильтрацию шума на этапе предварительной обработки интенсивности рассеянного излучения. В этой работе был использован фильтр Баттерворта для устранения высокочастотных компонент шума, а оценка фона из исходных данных выполнялась с помощью алгоритма сигма-отсечения (с англ. « σ -clipping»).

Фильтр Баттерворта используется для подавления случайных выбросов и высокочастотных флуктуаций и имеет вид [19]:

$$B(p_x, p_y) = \left[1 + \left(\frac{p_0}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2}} \right)^{2n} \right]^{-1}, \quad (26)$$

где n – задаваемый положительный целочисленный параметр, который называется порядком фильтра, а p_0 – частота отсечки, измеряемая от центра дифракционной картины. Фильтр (26) срезает меньше полезных пространственных частот, нежели плавный гауссовский фильтр, однако в отличие от идеального фильтра высоких частот, минимизирует эффект Гиббса на краях частоты отсечки.

Сигма-отсечение – это устойчивый метод оценки аддитивной составляющей шума, широко применяемый при обработке астрономических изображений [61]. В рамках этой процедуры изображение преобразуется в одномерный массив данных и анализируется целиком. Далее вычисляется медиана распределения значений пикселей, медианное абсолютное отклонение и стандартное отклонение σ . Пиксели, отклоняющиеся от этого значения более, чем втрое, исключаются из текущего массива. Процесс повторяется до тех пор, пока набор значений пикселей не стабилизируется. Итоговые значения медианы и стандартного отклонения определяют искомый фон, который может быть вычтен из измеренной интенсивности. Выбор метода обусловлен его

устойчивостью к выбросам и отсутствием предположений о гауссовом характере распределения.

Помимо вышеперечисленных препятствий, связанных с регистрацией изображения детектором, практические ограничения связаны также с регистрацией центральной части дифракционной картины. Именно эта область является самой яркой частью изображения, вследствие чего на практике это приводит к насыщению значений пикселей и к значительному снижению возможного диапазона значений, считываемых детектором. Снижение диапазона регистрируемых значений существенно влияет на качество регистрируемой периферии, интенсивность которой, как правило, меньше на несколько порядков [56]. Следует также помнить, что наряду с ухудшением динамического диапазона существует риск деградации характеристик области детектора под воздействием интенсивного пучка излучения. По этим причинам в эксперименте нередко применяют поглотитель пучка, закрывающий центральную область детектора.

С другой стороны, центральная область содержит низкочастотную информацию о форме исследуемого объекта, и потеря этой информации делает задачу восстановления комплексного поля образца неразрешимой. Алгоритмически проблема потери информации может быть решена внутри итерационной процедуры восстановления, где отсутствующая часть дифракционной картины заменяется на модуль восстановленной на предыдущем этапе. Альтернативный способ восстановления части картины, закрытой поглотителем прямого пучка, связан с использованием фурье-образа изображения объекта, полученного альтернативными методами с низким разрешением [56].

3.4. Численная характеристика качества реконструкции

Определение однозначной метрики качества восстановленных комплексных изображений исследуемых образцов является не менее важной

задачей в рамках методов когерентной дифракционной визуализации [25]. Наличие этой численной характеристики позволило бы сформировать оптимальную стратегию реконструкции. Под оптимальной стратегией понимается такая последовательность итераций алгоритмов восстановления фазы, которая обеспечивает получение наиболее близкого к истинному изображения объекта за наименьшее вычислительное время.

В реальных экспериментах, как правило, эталонное изображение объекта с высоким пространственным разрешением недоступно, поскольку его получение и составляет цель CDI как обратной задачи. Это делает затруднительным сравнение восстановленного изображения объекта с эталоном. В работе [22] Финап определил функцию ошибки, выражающуюся в сходстве модуля фурье-образа реконструкции с исходными данными, однако такая величина не может характеризовать ошибку восстановления самого объекта [57]. Этот подход не учитывает того факта, что идентичные дифракционные картины могут порождаться разными распределениями поля в плоскости объекта. В качестве примера таких распределений могут быть рассмотрены описываемые выше тривиальные неоднозначности.

В численных экспериментах, тем не менее, проблема поиска метрики, основанной на сравнении с эталонным распределением поля объекта, устраняется, поскольку в этом случае изображение объекта исходно задается и используется для решения прямой задачи. В качестве величины, позволяющей установить соответствие между восстановленными и эталонными изображениями в настоящей работе, как и в ряде литературных источников [47], используется индекс структурного сходства (SSIM):

$$\text{SSIM}(x, y) = \frac{(2\mu_x\mu_y + C_1)(2\sigma_{xy} + C_2)}{(\mu_x^2 + \mu_y^2 + C_1)(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + C_2)} \quad (27)$$

где μ_x, μ_y – средние значения рассматриваемых участков изображений x, y , σ_x^2, σ_y^2 – дисперсии, σ_{xy} – ковариация, а C_1, C_2 – малые регуляризующие константы [62]. Индекс структурного сходства принимает значения от -1 до 1, при этом SSIM для идентичных изображений равен 1.

SSIM включает в себя оценку схожести двух изображений по трем критериям: яркость $(2\mu_x\mu_y + C_1)/(\mu_x^2 + \mu_y^2 + C_1)$, контраст $(2\sigma_x\sigma_y + C_2)/(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + C_2)$ и локальная схожесть структуры $(\sigma_{xy} + C_2/2)/(\sigma_x\sigma_y + C_2/2)$. Такое разложение отражает степень схожести изображений с точки зрения зрительного восприятия, что зачастую не достигается при помощи попиксельных метрик и позволяет избежать ситуаций, в которых при низкой величине ошибки не достигается визуального сходства объекта с эталоном.

Таким образом, в рамках численного эксперимента индекс структурного сходства представляет собой рабочий инструмент верификации алгоритмов и разработки оптимальной стратегии реконструкции, пригодной для последующего применения в реальных экспериментах.

4. ЭКСПЕРИМЕНТ С ГЕЛИЙ-НЕОНОВЫМ ЛАЗЕРОМ

4.1. Описание экспериментальной установки

Апробация метода когерентной дифракционной визуализации проводилась на лабораторном стенде, реализующем безлинзовую схему регистрации дифракционных картин (рис. 11). Источником когерентного монохроматического излучения в схеме служит гелий-неоновый лазер с выходной мощностью 5 мВт, излучающий на основной TEM₀₀ моде излучение с длиной волны $\lambda = 632.8 \pm 0.16$ нм [15].

Тестовые объекты были расположены на расстоянии $L = 295$ см от источника, полная ширина на полувывсоте распределения лазерного пучка в плоскости образца была равна 6 мм. В качестве исследуемых объектов методом лазерной резки из пластины нержавеющей стали толщиной 1.1 мм были изготовлены диафрагмы размером $\tilde{L}_x \times \tilde{L}_y = 3 \times 2$ мм² в форме букв «Ф», «И», «А», «Н». Точность позиционирования станка равна 0.1 мм.

Дифрагированное излучение регистрировалось на расстоянии $z = 60$ см от объекта КМОП-камерой CMOS1300 модели Deltatech. Матрица камеры содержит $N_x \times N_y = 1032 \times 1288$ пикселей, размер каждого пикселя $\delta_{\{x|y\}} = 6$ мкм (светочувствительная область $L_x \times L_y = 6.192 \times 7.728$ мм). Динамический диапазон детектора 10 бит. Для каждой диафрагмы подбиралось оптимальное время экспозиции, которое в среднем составило 7 мс [15].

4.2. Реконструкция тестовых объектов

Перед использованием алгоритмов восстановления комплексного поля объекта выполнялась процедура предобработки измеренных данных. Поскольку в ходе эксперимента регистрация калибровочных изображений «белого пучка» и «темного поля» не представлялась возможной, подавление шумов в исходных данных требовалось произвести вычислительными методами, а именно отсечением порога, установленного методом сигма-отсечения.

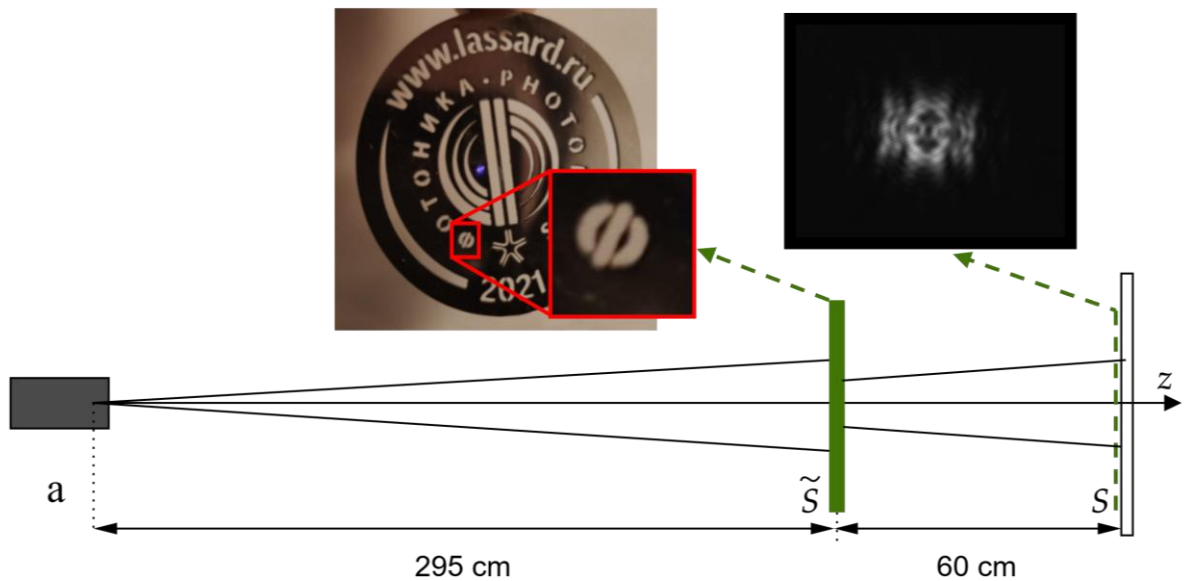


Рисунок 11. Схема эксперимента с гелий-неоновым лазером (отмечен буквой *a*). В плоскости $\tilde{S}$ находится тестовый образец (диафрагма в виде букв), в плоскости S – КМОП-матрица

Оператор распространения излучения, необходимый для выполнения алгоритмов реконструкции фазы, был выбран исходя из геометрии эксперимента. Поскольку на расстоянии $z = 60$ см условие дальней зоны (2) $z \gg z_{far} \approx 14.2$ м не выполняется и при этом справедливо неравенство (9) $z \geq z_{fre} = 2.8$ см, обосновано применение метода виртуальной линзы. В рамках данной работы было проведено сравнение двух подходов к распространению излучения: с использованием точного решения (волнового пропагатора) (1) и приближения виртуальной линзы (10). Необходимо отметить, что расчетный домен объекта совпадает с доменом КМОП-матрицы, что избавляет от необходимости согласования пространственных сеток.

Восстановление комплексного поля объекта выполнялось по блочной схеме. Каждый блок содержал четыре пары, состоящих из 30 итераций гибридного алгоритма НЮ с 10 итерациями алгоритма снижения ошибки ER.

При этом параметр релаксации β алгоритма НЮ последовательно снижался, принимая значения $\beta = \{1.0, 0.7, 0.4, 0.1\}$. Выбор такой последовательности обусловлен необходимостью постепенного перехода от активного поиска в пространстве решений к более точному поиску истинного решения. Таким образом, каждый блок содержал $40 \cdot 4 = 160$ элементарных итераций. По завершении каждого блока фазовая компонента распределения обращалась в нуль при сохранении модуля, а полученное поле передавалось в следующий блок в качестве начального приближения. Всего выполнялось 10 блоков, в заключительном блоке число итераций ER было увеличено до 200 для более точного завершения сходимости. Подход адаптивной маски был реализован при усреднении полей на выходе каждого из этих блоков. Последующий набор из 10 блоков выполнялся с обновленным ограничением объекта.

Сравнение результатов восстановления комплексных распределений для тестовых объектов, полученных для двух различных пропагаторов излучения с изображениями объектов, полученными на оптическом микроскопе, представлено на рис.12.

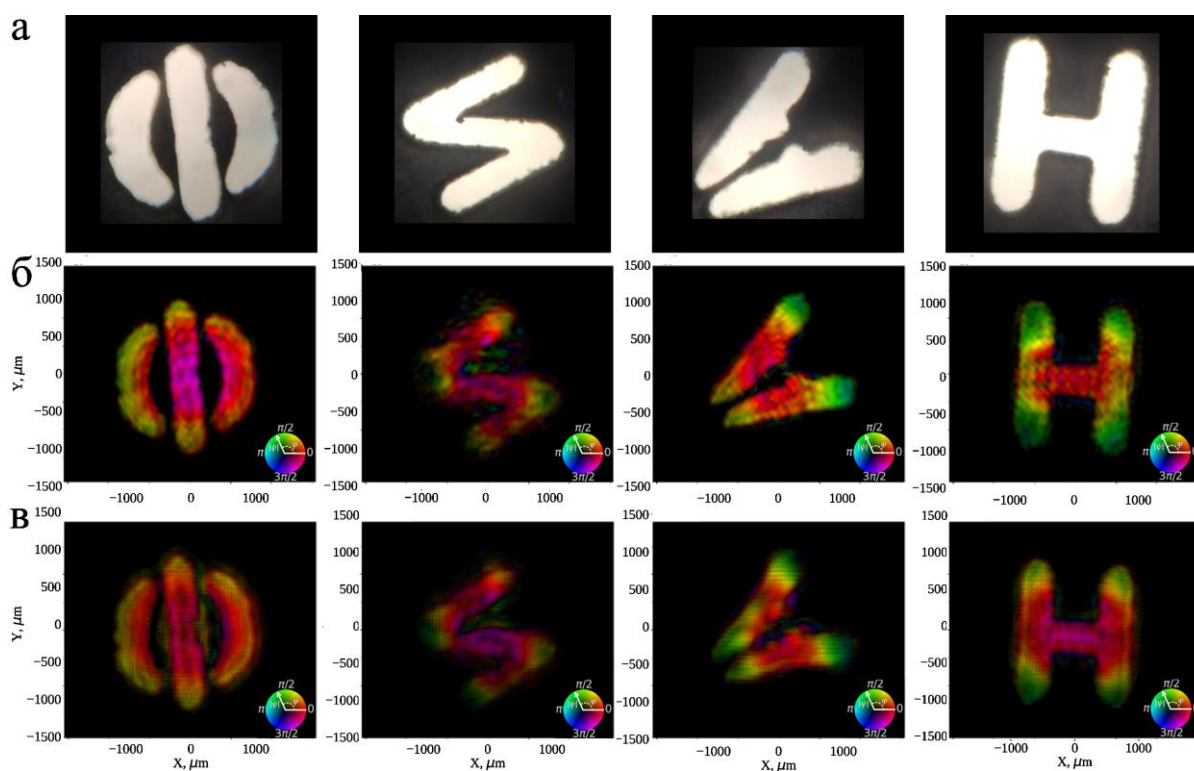


Рисунок 12. Результаты реконструкции комплексного поля диафрагм в виде букв с использованием двух моделей распространения излучения: *а* – изображения, полученные с помощью оптического микроскопа; *б* – модель виртуальной линзы (10); *в* – волновой пропагатор (1)

5. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ С ИСТОЧНИКОМ СИ

5.1. Источник синхротронного излучения ЦКП «СКИФ»

Методы когерентной безлинзовой визуализации предъявляют к источнику излучения ряд требований, выполнение которых приближает реально достижимое пространственное разрешение к теоретическому. Среди этих требований выделяется высокая степень пространственной когерентности в плоскости образца и высокий поток фотонов. В связи с этим особенно востребованными в контексте когерентных безлинзовых методов стали источники синхротронного излучения, обеспечивающие высокий поток когерентных фотонов. В настоящее время на таких установках по всему миру создаются специализированные экспериментальные станции, ориентированные на методики CDI и птихографии [18], [26].

В физике синхротронного излучения используют понятие яркости, имеющей смысл нормированного на единицу фазового объема потока фотонов в узкой спектральной полосе [18]. Яркость источника и степень пространственной когерентности связывают с величиной эмиттанса накопительного кольца – фазовым объемом электронного пучка. В зависимости от этой величины источники синхротронного излучения принято классифицировать по поколениям. Источники с наименьшим на данный момент эмиттансом (порядка сотен и десятков пм·рад) относят к четвертому поколению и называют дифракционно-ограниченными, поскольку при таких параметрах становится достижимым нижний предел фазового объема генерируемого пучка фотонов [18].

Вводимый в эксплуатацию в р.п. Кольцово Новосибирской области Сибирский кольцевой источник фотонов (ЦКП «СКИФ») является первым российским источником 4-го поколения и представляет особый интерес для широкого круга исследователей, в том числе в контексте исследований с

применением когерентных безлинзовых методов [63]. Основные параметры накопительного кольца «СКИФ» приведены в табл.1

Таблица 1. Основные параметры накопительного кольца ЦКП «СКИФ» [64]

Параметр	Значение
Энергия накопительного кольца, ГэВ	3
Периметр накопительного кольца, м	476
Ток электронного пучка в накопителе, мА	400
Натуральный эмиттанс, пм·рад	75

5.2. Ондюляторная станция «Наноскопия»

Конструкция синхротронных источников, начиная со второго поколения, предполагает наличие в накопительном кольце прямолинейных промежутков, в которых вводятся специализированные устройства генерации излучения. Эти устройства называются вставными и представляют собой периодические магнитные структуры, отклоняющие электронный пучок по периодическому закону. Среди вставных устройств выделяют ондуляторы, вигглеры и шифтеры, отличающиеся магнитной структурой и характеристиками выходного излучения. Ондюлятор представляет собой длинную последовательность из нескольких сотен магнитов переменной полярности со слабым магнитным полем. Вследствие особенностей устройства ондулятора поле, генерируемое каждым движущимся в нем электроном, формирует высокоинтенсивный пучок излучения с малой расходимостью, спектр которого состоит из набора узких гармоник [18], [65].

В рамках создания исследовательских станций второй очереди ЦКП «СКИФ» планируется разработка станции «Наноскопия», использующей ондуляторное излучение (ОИ) в мягком рентгеновском диапазоне. К задачам станции относятся исследования строения клеток и субклеточных структур в их нативном состоянии с нанометровым пространственным разрешением без

контрастирования и применения флуоресцентных меток [66]. Такая возможность во многом обусловлена рабочим энергетическим диапазоном станции так называемого «окна прозрачности воды». Этот спектральный диапазон занимает энергии от К-края поглощения углерода (290 эВ) до К-края кислорода (540 эВ), а особенность диапазона заключается в большом абсорбционном контрасте между органическими соединениями и водой [1], [18].

Рабочая энергия блока когерентной дифракционной визуализации составляет 530 эВ (что соответствует длине волны $\lambda \approx 2.34$ нм). При этой энергии абсорбционный контраст между углеродосодержащими образцами и водой достигает ~ 20 , а длина поглощения составляет ~ 10 мкм, что оказывается достаточным для исследования немодифицированных клеток в геометрии на прохождение. Наряду с этим, на энергии 530 эВ ондулятор генерирует излучение с высокой степенью когерентности. Предполагается, что при оптимизации дизайна эксперимента становится возможным применение CDI в качестве инструмента для дозоэффективного исследования динамики внутриклеточных процессов путем многократной съемки объекта в реальном времени (молекулярно-клеточное «кино»).

Станция «Наноскопия» ЦКП «СКИФ» проектируется по модульному принципу, то есть содержит несколько блоков, включающих собственную рентгенооптическую схему, систему окружения образца и систему детектирования сигнала. Переключение между модулями осуществляется вводом-выводом отклоняющих зеркал. В режиме «когерентного наноскопа» пучок синхротронного излучения поступает на входную апертуру модуля. Зеркало полного внешнего отражения отклоняет излучение на монохроматор с фиксированным выходом, обеспечивающий монохроматизацию до уровня $\Delta E/E \sim 10^{-3}$. Монохроматический пучок затем попадает на фокусирующую систему зеркал Киркпатрика-Баеза (КБ), в результате чего СИ фокусируется в пятно диаметром ~ 20 мкм в плоскости пинхола. Расходящееся от пинхола

излучение попадает на исследуемый объект, рассеянное излучение регистрируется двухкоординатным детектором [67].

5.3. Решение прямой задачи распространения излучения

Для предварительной оценки эффективности применения когерентных методов на станции «Наноскопия» синхротрона «СКИФ» был проведен численный эксперимент, моделирующий ондуляторное излучение и его распространение вдоль рентгенооптического тракта модуля CDI. Моделирование источника и выходного излучения производилось с учетом параметров реального источника [68] и когерентных свойств излучения (см. Приложение). Для этого был разработан скрипт на языке программирования Python с инструментами библиотеки Ocelot [69], [70]. В ходе решения прямой задачи полученное на выходе из ондулятора излучение распространялось вдоль вышеописанной рентгенооптической схемы, за исключением фокусирующей системы КБ-зеркал. Для численного моделирования распространения излучения через тестовые образцы применялся метод «сплит-степ» (17). Результаты моделирования прямой задачи представлены на рис. 13

В качестве тестового объекта задавалась золотая диафрагма (плотность $\rho(\text{Au}) = 19.32 \text{ г/см}^3$) в форме асимметричной звезды Сименса диаметром 10 мкм и толщиной 1.5 мкм, нанесенная на мембрану нитрида кремния (плотность $\rho(\text{Si}_3\text{N}_4) = 3.44 \text{ г/см}^3$) такой же толщины (рис. 14, б). Наряду с неорганическим тестовым объектом, рассмотрен модельный образец размером 10 мкм и толщиной 0.5 мкм, состоящий из липидных кластеров (химическая формула $\text{H}_{62.5}\text{C}_{31.5}\text{O}_{6.3}$, плотность 1 г/см^3) в водной среде (рис. 14, е).

Детектор обладает характеристиками модели Dhyana XF400BSI [71] с рабочей областью $N_x \times N_y = 2048 \times 2048$ пикселей и размером пикселя $\delta_x \times \delta_y = 6.5 \times 6.5 \text{ мкм}$ (размер светочувствительной области $L_x \times L_y = 13.3 \times 13.3 \text{ мм}$). В рамках численного эксперимента полагалось, что детектор

регистрирует квадрат модуля комплексного поля, полученного в результате решения прямой задачи.

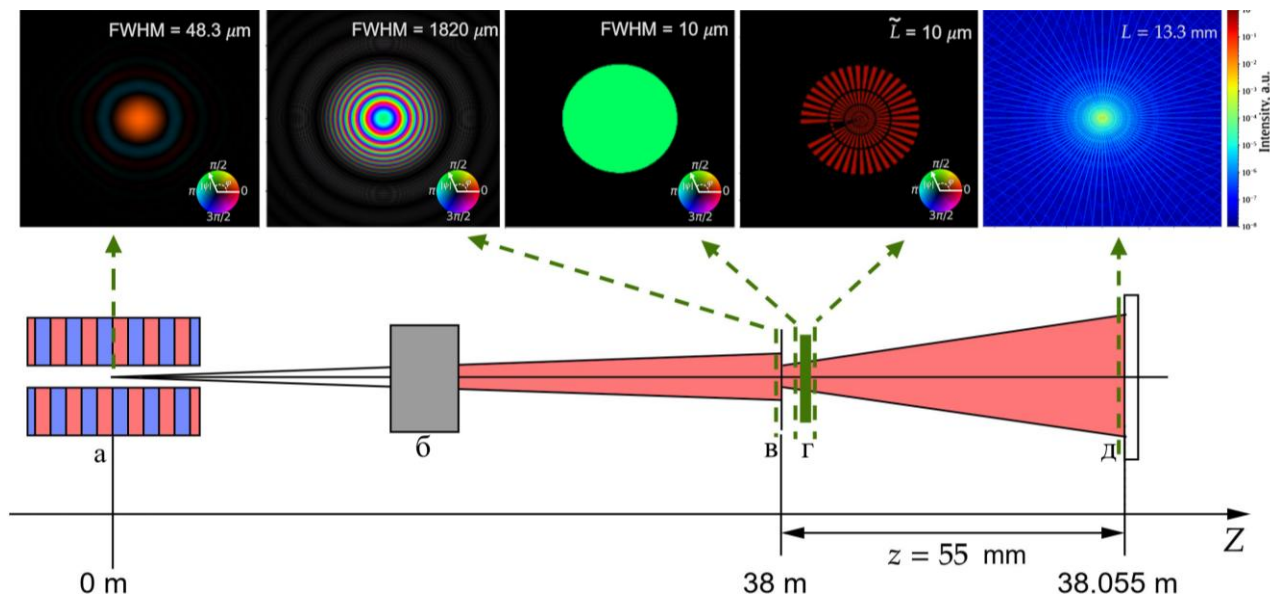


Рисунок 13. Схема распространения пучка ондуляторного излучения станции «Наноскопия». Верхний ряд – распределения комплексного поля в плоскостях, отмеченных стрелками (в плоскости детектора изображено распределение интенсивности). FWHM – полная ширина на половине максимума распределения интенсивности, $\tilde{L}$ – размер тестового объекта, L – размер детектора. Буквами отмечены элементы станции: a – ондулятор, $б$ – монохроматор, $в$ – пинхол, $г$ – образец, $д$ – детектор

Для учета влияния шумов, возникающих в реальном эксперименте, и для оценки эффективности алгоритмов CDI к полученной интенсивности излучения, рассеянной звездой Сименса, добавлялся шум Пуассона, математическое ожидание которого в каждой точке полагалось равным значению сигнала. Уровень пуассоновского шума регулировался путем изменения динамического диапазона входных данных. Физически это соответствует различным временам экспозиции (числу фотонов, попавших на детектор). Были рассмотрены два

набора данных с пиковым отношением сигнал-шум (с англ. «Peak Signal-to-Noise Ratio», PSNR) 80 дБ в первом случае и 60 дБ – во втором.

5.4. Решение обратной задачи реконструкции объекта

В описываемой схеме эксперимента расстояние между плоскостью объекта и детектора равно $z = 55$ мм. При этом приближение дальней зоны в целом применимо, поскольку $z_{far} = 42.7$ мм, так что в качестве оператора распространения излучения в алгоритмах восстановления использовалось БПФ (8). Предобработка дифракционных картин (рис. 14, *а, д*) включала в себя оценку фона методом сигма-отсечения и подавление высокочастотных флуктуаций фильтром Баттерворта (26). Для решения обратной задачи использовалась блочная структура, аналогичная применявшейся в эксперименте с гелий-неоновым лазером, состоящая из той же комбинации алгоритмов НЮ и ER в сочетании с методом адаптивной маски.

Результаты реконструкции тестового объекта в виде звезды Сименса представлены на рис.14 *в, з*. Сравнение с эталонным объектом, полученным в ходе решения прямой задачи, показало, что для данных с PSNR = 80 дБ (рис. 14, *в*) индекс структурного сходства SSIM (27) равен 0.88, а для PSNR = 60 дБ (рис. 14, *з*) SSIM = 0.85. Для восстановленного комплексного поля в плоскости органического образца, состоящего из липидных кластеров в водной среде, значение SSIM составило 0.81 (рис.14, *ж*).

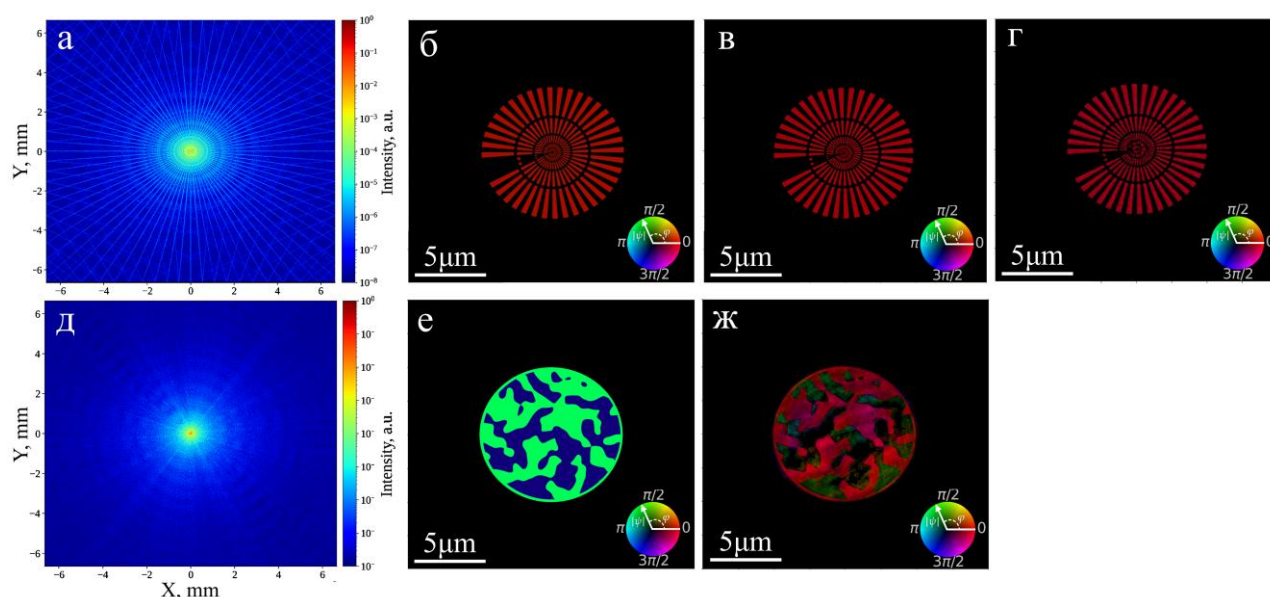


Рисунок 14 Реконструкция комплексного поля тестовой миры в виде звезды Сименса (верхний ряд): *а* – регистрируемая интенсивность в отсутствие шума (логарифмическая шкала), *б* – эталон, *в*, *г* – восстановленное изображение при PSNR = 80 dB и 60 dB соответственно; реконструкция фазового объекта в виде липидной взвеси в воде (нижний ряд): *д* – регистрируемая интенсивность в отсутствие шума (логарифмическая шкала), *е* – эталон, *ж* – восстановленное изображение

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

6.1. Экспериментальный стенд с гелий-неоновым лазером

Эксперимент по когерентной дифракционной визуализации амплитудных объектов в видимом диапазоне позволил отработать стратегию комбинированного применения алгоритмов восстановления фазы в сочетании с методом адаптивной маски. Вместе с этим, однако, имеет место ряд принципиальных ограничений. Учитывая то обстоятельство, что в ходе эксперимента с гелий-неоновым лазером не проводилась регистрация калибровочных снимков, способствующих более точной оценке модели шума и то, что детектор имеет ограниченный динамический диапазон 10 бит и дефекты в рабочей области, разрешение восстановленных изображений было снижено.

Реконструированные комплексные поля ряда объектов демонстрируют характерную неоднородную структуру: наличие полос и спекл-подобных паттернов на фоне и в окружении восстановленного объекта. Источником полос, вероятно, выступают паразитные интерференционные полосы, регистрируемые детектором. Спеклы, наблюдаемые в плоскости реконструкции, предположительно обусловлены ограниченной поперечной когерентностью пучка и его нестабильностью.

Следует отметить, что для каждого измерения проводилось усреднение по 16 снимкам, что позволило повысить PSNR и частично решить вышеперечисленные проблемы. Определение качества восстановления осуществлялось по комплементарным данным оптической микроскопии и носило качественный характер, поскольку в эксперименте отсутствовало эталонное изображение объекта в том виде, в каком оно подразумевается в численном моделировании. Путем такого сравнения установлено, что наилучшее качество восстановления наблюдалось для буквы «Ф» с наибольшим PSNR, а худшее качество продемонстрировала буква «И» (табл. 2). Связь длительности экспонирования с качеством реконструкции не была четко установлена. Это может быть связано с

нестабильностью пучка относительно объекта, что приводило к неоднородности освещения отдельных частей объекта при усреднении кадров.

Таблица 2. Пиковое соотношение сигнал-шум (PSNR) для тестовых объектов в виде букв

Буква	Ф	И	А	Н
PSNR, дБ	66	46	50	46

Вычисления проводились в среде Google Colab с графическим процессором (с англ. «Graphics Processing Unit», GPU) NVIDIA Tesla T4, 15 Гб оперативной памяти. Время выполнения 30 итераций НЮ и 10 итераций ER для восстановления изображения размером 1032×1288 пикселей составило 6.57 сек при использовании пропагатора с виртуальной линзой (10) и 35.13 сек с волновым пропагатором (1). Различие в скорости обусловлено вычислительными затратами на вычисление дополнительных преобразований Фурье и создание сетки пространственных частот в обратном пространстве.

6.2. Численный эксперимент с синхротронным источником

Эксперимент, моделировавший условия эксперимента с источником СИ со звездой Сименса в качестве тестового объекта, был призван оценить влияние пуассоновского шума на разрешение, достигаемое в результате реконструкции. Предполагается, что дробовой шум фотонов, соответствующий статистике Пуассона, является доминирующей компонентой зашумления дифракционной картины. Стоит отметить, что моделирование детектора не учитывало конечный динамический диапазон, как и тот факт, что в реальных экспериментах с высокоинтенсивными пучками для центральной области используется поглотитель пучка (бимстоп, с англ. «beamstop»).

Поскольку моделирование допускает наличие эталонного изображения, становится возможным ввести метрику качества реконструкции. Результаты

восстановления показали, что индекс структурного сходства SSIM снижается с 0.88 до 0.85 при понижении PSNR с 80 дБ до 60 дБ соответственно, что демонстрирует устойчивость алгоритмов восстановления фазы с применением адаптивной маски.

Звезда Сименса представляет собой тестовую мишень, по которой удобно определять пространственное разрешение. Под разрешением в данном случае понимается минимальный размер различаемого элемента (полосы). Разрешение, оцениваемое в том числе для физической интерпретации значений SSIM восстановленных изображений (рис.15, *а, в*), выполнялось следующим образом. По реконструированному изображению для нескольких фиксированных радиусов с центром в центре звезды вычисляется азимутальный профиль амплитуды поля (рис.15, *б, г*). Согласно глубине модуляции профиля при различных радиусах вычислялось значение модуляционной передаточной функции (Modulation Transfer Function, MTF). По набору значений MTF строится кривая, по границе в 30% которой определяется наименьший разрешаемый период.

В результате расчетов установлено, что для данных с PSNR = 80 дБ разрешение равно 12.92 нм, а для уровня шума PSNR = 60 дБ минимальный размер разрешаемой полосы равен 40.39 нм. Разрешение, в целом, приближено к дифракционному пределу, но в значительной степени определяется уровнем зашумления дифракционной картины.

При использовании той же среды для вычислений, время прохождения 30 итераций алгоритма НЮ и 10 итераций ER применительно к изображению размером 2048×2048 пикселей оказалось равным 6.89 сек.

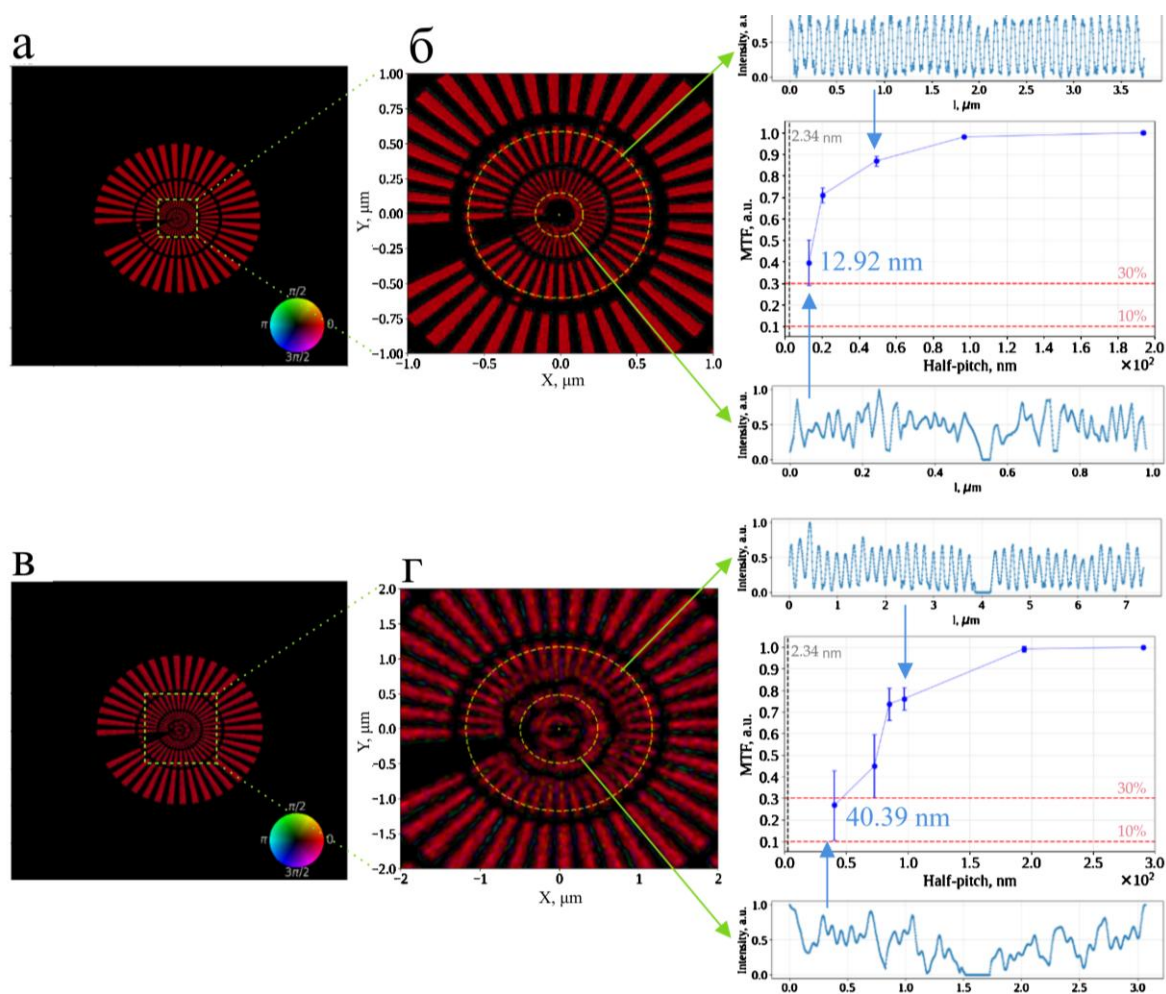


Рисунок 15. К расчету пространственного разрешения миры в виде звезды Сименса: *а, в*– восстановленное комплексное поле при PSNR = 80 дБ и 60 дБ соответственно; *б, д* – увеличенные фрагменты изображений, отмеченные радиусы на которых соответствуют азимутальным профилям интенсивности и модуляционные передаточные функции с указанием минимального размера разрешаемой полосы

Органический образец продемонстрировал более низкое структурное сходство с эталоном, что может быть обусловлено сильным поглощением липидов по сравнению с окружающей водной средой, тогда как адаптивная маска отсекает участки с меньшей амплитудой поля. Возникающие артефакты свидетельствуют о том, что алгоритм восстановления необходимо модифицировать с учетом специфики таких «инвертированных» объектов.

ВЫВОДЫ

1. Проведен систематический анализ факторов, снижающих пространственное разрешение методов когерентной безлинзовой визуализации. Рассмотрены алгоритмические и практические подходы, направленные на повышение качества реконструируемых изображений при сохранении вычислительной эффективности;
2. Разработан подход адаптивной маски на основе алгоритма термоусадочной оболочки, позволяющий гибко, в полуавтоматическом режиме, корректировать ограничение объекта во время итерационного процесса восстановления;
3. Алгоритмы CDI в сочетании с адаптивной маской были протестированы в эксперименте с источником излучения в видимом диапазоне. Продемонстрирована устойчивость восстановления комплексных изображений объектов даже при наличии шумов, природу которых невозможно установить напрямую;
4. Выполнено моделирование частично когерентного ондуляторного излучения в мягком рентгеновском диапазоне, распространяющегося вдоль рентгенооптического тракта станции «Наноскопия» ЦКП «СКИФ». Решена прямая задача расчета дифракционной картины после прохождения СИ через тестовые объекты в виде звезды Сименса и модельного биологического образца;
5. С учетом добавления шумов при длине волны 2.34 нм для миры в виде звезды Сименса определено пространственное разрешение, равное 12.92 нм (для шума с PSNR = 80 дБ) и 40.39 нм (для шума с PSNR = 60 дБ);
6. Реконструкция комплексного поля в плоскости органического образца в виде липидных кластеров при его освещении монохроматическим пучком СИ стала первым шагом к прижизненной визуализации биологических объектов без использования контрастных меток, что соответствует ключевой научной задаче станции «Наноскопия».

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрен метод когерентной безлинзовой визуализации, позволяющий вычислительным образом охарактеризовать комплексное поле, рассеиваемое объектом с теоретически близким к дифракционному пределу пространственному разрешению. Были предложены модификации итеративных алгоритмов, приближающим реально достижимое качество восстановления к модельному. Разработанный алгоритм адаптивной маски был протестирован в серии экспериментов и продемонстрировал повышение устойчивости и качества реконструкции фазы при наличии зашумления регистрируемых дифракционных картин.

Совокупность полученных результатов подтверждает осуществимость метода CDI в целом и усовершенствованных алгоритмов восстановления фазы в частности к задачам прижизненной визуализации биологических объектов в нативном состоянии с нанометровым разрешением в реальных экспериментальных условиях. Это является одним из заделов для реализации модуля полнопольной когерентной дифракционной визуализации станции второй очереди «Наноскопия» Сибирского кольцевого источника фотонов.

Приоритетным направлением дальнейших исследований является модификация алгоритмов реконструкции для сильнопоглощающих относительно фона объектов. Разработка однозначной метрики качества восстановления, которая не требует эталона и не чувствительна к неоднозначности решений, остается актуальной задачей, решение которой позволит перейти к формализованной оптимизации стратегии реконструкции.

БЛАГОДАРНОСТИ

В завершение автор хотела бы выразить высокую степень признательности коллективу лаборатории рентгеновской оптики отделения квантовой радиофизики ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН за содержательные обсуждения теоретических и практических аспектов проведения и обработки экспериментов, а также сотруднику ЦКП «СКИФ» Хомякову Ю.В. за плодотворное сотрудничество в контексте численного эксперимента с источником СИ. Отдельную благодарность автор выражает Марковой Д.С., Горбуновой М.В. и Мурзиной Л.Н. за их безграничную поддержку и терпение.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Jacobsen C. X-ray Microscopy. 1-е изд. Cambridge University Press, 2019.
2. Aidukas T. и др. High-performance 4-nm-resolution X-ray tomography using burst ptychography // Nature. 2024. Т. 632, № 8023. С. 81–88.
3. Michelson A. и др. Three-dimensional visualization of nanoparticle lattices and multimaterial frameworks // Science. 2022. Т. 376, № 6589. С. 203–207.
4. Gerchberg R. W., Saxton W. O. Practical algorithm for determination of phase from image and diffraction plane pictures // Optik. 1972. Т. 35, № 2. С. 237–.
5. Takayama Y. и др. Atmospheric coherent X-ray diffraction imaging for *in situ* structural analysis at SPring-8 Hyogo beamline BL24XU // J Synchrotron Rad. 2018. Т. 25, № 4. С. 1229–1237.
6. Li L. и др. Methods for *operando* coherent X-ray diffraction of battery materials at the Advanced Photon Source // J Synchrotron Rad. 2019. Т. 26, № 1. С. 220–229.
7. Chapman H. N. и др. Femtosecond diffractive imaging with a soft-X-ray free-electron laser // Nature Phys. 2006. Т. 2, № 12. С. 839–843.
8. Mancuso A. P. и др. Coherent-Pulse 2D Crystallography Using a Free-Electron Laser X-Ray Source // Phys. Rev. Lett. 2009. Т. 102, № 3. С. 035502.
9. Barty A. и др. Ultrafast single-shot diffraction imaging of nanoscale dynamics // Nature Photon. 2008. Т. 2, № 7. С. 415–419.
10. Thibault P., Rankenburg I. C. Optical diffraction microscopy in a teaching laboratory // Am. J. Phys. 2007. Т. 75, № 9. С. 827–832.
11. Sandberg R. L. и др. Lensless Diffractive Imaging Using Tabletop Coherent High-Harmonic Soft-X-Ray Beams // Phys. Rev. Lett. 2007. Т. 99, № 9. С. 098103.
12. Ravasio A. и др. Single-Shot Diffractive Imaging with a Table-Top Femtosecond Soft X-Ray Laser-Harmonics Source // Phys. Rev. Lett. 2009. Т. 103, № 2. С. 028104.

13. Sandberg R. L. и др. High numerical aperture tabletop soft x-ray diffraction microscopy with 70-nm resolution // Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2008. Т. 105, № 1. С. 24–27.
14. Batey D. J. и др. X-Ray Ptychography with a Laboratory Source // Phys. Rev. Lett. 2021. Т. 126, № 19. С. 193902.
15. Артюков И. А. и др. Метод виртуальной линзы для восстановления фазы изображения в ближней зоне // КСФ ФИАН, 2023. Т. 50, № 10. С. 11-19.
16. Попов Н. Л. и др. Волновой пакет в фазовой проблеме оптики и птихографии // УФН. 2020. Т. 190, № 08.
17. Griffiths D. J. Introduction to electrodynamics. 3-е изд. San Francisco: Pearson/Benjamin Cummings, 2008. 576 с.
18. Willmott P. R. An introduction to synchrotron radiation: techniques and applications. 2-е изд. Hoboken: John Wiley & sons, 2019.
19. Blackledge J. M. Quantitative coherent imaging. Academic Press, 1989.
20. Goodman J. W., Cox M. E. Introduction to fourier optics. 2-е изд. American Institute of Physics, 1969.
21. Shechtman Y. и др. Phase Retrieval with Application to Optical Imaging: A contemporary overview // IEEE Signal Process. Mag. 2015. Т. 32, № 3. С. 87–109.
22. Fienup J. R. Phase retrieval algorithms: a comparison // Appl. Opt. 1982. Т. 21, № 15. С. 2758.
23. Бусаров А. С., Глаголев П. Ю., Попов Н. Л. Рентгеновская безлинзовая оптика и птихография // ВМУ. 2024. № 2. С. 2420206-1-2420206–5.
24. Takajo H., Takahashi T., Shizuma T. Further study on the convergence property of the hybrid input–output algorithm used for phase retrieval // J. Opt. Soc. Am. A. 1999. Т. 16, № 9. С. 2163.
25. Luke D. R. Relaxed averaged alternating reflections for diffraction imaging // Inverse Probl. 2005. Т. 21, № 1. С. 37–50.
26. Miao J. Computational microscopy with coherent diffractive imaging and ptychography // Nature. 2025. Т. 637, № 8045. С. 281–295.

27. Zhang F. и др. Phase retrieval by coherent modulation imaging // Nat Commun. 2016. Т. 7, № 1. С. 13367.
28. Dong X. и др. Single shot multi-wavelength phase retrieval with coherent modulation imaging // Opt. Lett. 2018. Т. 43, № 8. С. 1762.
29. Marathe S. и др. Coherent diffraction surface imaging in reflection geometry // Opt. Express. 2010. Т. 18, № 7. С. 7253.
30. Robinson I., Harder R. Coherent X-ray diffraction imaging of strain at the nanoscale // Nature Mater. 2009. Т. 8, № 4. С. 291–298.
31. Liu T. и др. Origin of structural degradation in Li-rich layered oxide cathode // Nature. 2022. Т. 606, № 7913. С. 305–312.
32. Guizar-Sicairos M. и др. Phase tomography from x-ray coherent diffractive imaging projections // Opt. Express. 2011. Т. 19, № 22. С. 21345.
33. Jiang H. и др. Quantitative 3D imaging of whole, unstained cells by using X-ray diffraction microscopy // PNAS, 2010. Т. 107, № 25. С. 11234–11239.
34. Latychevskaia T., Longchamp J.-N., Fink H.-W. When holography meets coherent diffraction imaging // Opt. Express, 2012. Т. 20, № 27. С. 28871–28892.
35. Johnson A. S. и др. Ultrafast X-ray imaging of the light-induced phase transition in VO₂ // Nat. Phys. 2022.
36. Rivenson Y. и др. Phase recovery and holographic image reconstruction using deep learning in neural networks // Light Sci Appl. 2017. Т. 7, № 2. С. 17141–17141.
37. Pfeiffer F. X-ray ptychography // Nature Photon. 2018. Т. 12, № 1. С. 9–17.
38. Wang R. и др. Ptychography at all wavelengths // Nat Rev Methods Primers. 2025. Т. 5, № 1. С. 68.
39. Hruszkewycz S. O. и др. Quantitative Nanoscale Imaging of Lattice Distortions in Epitaxial Semiconductor Heterostructures Using Nanofocused X-ray Bragg Projection Ptychography // Nano Lett. 2012. Т. 12, № 10. С. 5148–5154.
40. Jørgensen P. S. и др. Hard x-ray grazing-incidence ptychography: large field-of-view nanostructure imaging with ultra-high surface sensitivity // Optica. 2024. Т. 11, № 2. С. 197.

41. Dierolf M. и др. Ptychographic X-ray computed tomography at the nanoscale // Nature. 2010. Т. 467, № 7314. С. 436–439.
42. Jiang S. и др. Resolution-Enhanced Parallel Coded Ptychography for High-Throughput Optical Imaging // ACS Photonics. 2021. Т. 8, № 11. С. 3261–3271.
43. Zheng G., Horstmeyer R., Yang C. Wide-field, high-resolution Fourier ptychographic microscopy // Nature Photon. 2013. Т. 7, № 9. С. 739–745.
44. Pan A. и др. System calibration method for Fourier ptychographic microscopy // J. Biomed. Opt. 2017. Т. 22, № 09. С. 1.
45. Maiden A. M. и др. Soft X-ray spectromicroscopy using ptychography with randomly phased illumination // Nat Commun. 2013. Т. 4, № 1. С. 1669.
46. Lin H. и др. Ultra-broadband ptychography for dispersive samples // Nat Commun. 2025. Т. 16, № 1. С. 5714.
47. Oh S. и др. Tabletop Lensless Imaging in the Extreme Ultraviolet with Reduced Radiation Dose: arXiv:2505.13075. arXiv, 2025.
48. Batey D. J. и др. Spectroscopic imaging with single acquisition ptychography and a hyperspectral detector // Sci Rep. 2019. Т. 9, № 1. С. 12278.
49. Gureyev T. E., Nugent K. A. Phase retrieval with the transport-of-intensity equation II Orthogonal series solution for nonuniform illumination // J. Opt. Soc. Am. A. 1996. Т. 13, № 8. С. 1670.
50. Beltran M. A. и др. 2D and 3D X-ray phase retrieval of multi-material objects using a single defocus distance // Opt. Express. 2010. Т. 18, № 7. С. 6423.
51. Diemoz P. C., Bravin A., Coan P. Theoretical comparison of three X-ray phase-contrast imaging techniques: propagation-based imaging, analyzer-based imaging and grating interferometry // Opt. Express. 2012. Т. 20, № 3. С. 2789.
52. Morgan K. S., Paganin D. M., Siu K. K. W. X-ray phase imaging with a paper analyzer // Appl. Phys. Lett. 2012. Т. 100, № 12. С. 124102.
53. Alloo S. J. и др. Multimodal intrinsic speckle-tracking (MIST) to extract images of rapidly-varying diffuse X-ray dark-field // Sci Rep. 2023. Т. 13, № 1. С. 5424.
54. Zhou T. и др. Speckle-based x-ray phase-contrast imaging with a laboratory source and the scanning technique // Opt. Lett. 2015. Т. 40, № 12. С. 2822.

55. Bruck Yu. M., Sodin L. G. On the ambiguity of the image reconstruction problem // Opt. Commun. 1979. T. 30, № 3. С. 304–308.
56. Latychevskaya T. Iterative phase retrieval in coherent diffractive imaging: practical issues // Appl. Opt. 2018. T. 57, № 25. С. 7187.
57. Miao J., Sayre D., Chapman H. N. Phase retrieval from the magnitude of the Fourier transforms of nonperiodic objects // J. Opt. Soc. Am. A. 1998. T. 15, № 6. С. 1662.
58. Huang X. и др. Incorrect support and missing center tolerances of phasing algorithms // Opt. Express. 2010. T. 18, № 25. С. 26441.
59. Marchesini S. и др. X-ray image reconstruction from a diffraction pattern alone // Phys. Rev. B. 2003. T. 68, № 14. С. 140101.
60. Bates R. H. T., Mc. Donnell M. J. Image Restoration and Reconstruction. Oxford University Press, Inc., 1986.
61. Beers T. C., Flynn K., Gebhardt K. Measures of location and scale for velocities in clusters of galaxies - A robust approach // Astron. J. 1990. T. 100. С. 32.
62. Zhou Wang и др. Image quality assessment: from error visibility to structural similarity // IEEE Trans. on Image Process. 2004. T. 13, № 4. С. 600–612.
63. Левичев Е. Б., Журавлев А. Н., Золотарев К. В. и др. Проект создания синхротронного источника поколения 4+ ЦКП «СКИФ» в р.п. Кольцово Новосибирской области: общая информация и статус реализации // Технологическая инфраструктура Сибирского кольцевого источника фотонов «СКИФ»: электронный сборник статей. Т. 1 / под общ. ред. К. И. Шефер. - Новосибирск, 2022. С. 5–13.
64. Baranov G. и др. Lattice optimization of a fourth-generation synchrotron radiation light source in Novosibirsk // Phys. Rev. Accel. Beams. 2021. T. 24, № 12. С. 120704.
65. Винокуров Н. А., Левичев Е. В. Ондюляторы и вигглеры для генерации излучения и других применений // УФН. 2015. Т. 185, № 9. С. 917–939.
66. Ракшун Я. В. и др. Проект сканирующего и проекционного микроскопов для станции "Наноскопия" для биологических исследований в "окне

- прозрачности воды" // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. № 5. С. 3–15.
67. Малышев И. В., Реунов Д. Г., Чхало Н. И. и др. Концептуальный проект экспериментальной станции 2-5 «Наноскопия в мягком диапазоне»: [технический отчет] / ЦКП «СКИФ». – Новосибирск, 2024. С 98.
68. Седов А. А. и др. Разработка сверхпроводящих спиральных ондуляторов для ЦКП «СКИФ» // ЖТФ. [готовится к публикации].
69. Agapov I. и др. OCELOT: A software framework for synchrotron light source and FEL studies // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A. 2014. Т. 768. С. 151–156.
70. Geloni G. и др. Fourier treatment of near-field synchrotron radiation theory // Optics Communications. 2007. Т. 276, № 1. С. 167–179.
71. Dhyana XF [Электронный ресурс]. URL: <https://www.tucsen.com/> (дата обращения: 18.05.2026).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Моделирование частично когерентного источника ондуляторного излучения

Ондуляторное излучение возникает при движении релятивистской заряженной частицы (электрона с зарядом e и массой m_e) через периодическую магнитную структуру с периодом λ_u (рис. А.1). Поле излучения движущегося точечного заряда описывается запаздывающими потенциалами Лиенара-Вихерта. Траектория движения заряженной частицы в периодическом магнитном поле с амплитудой B_0 также имеет периодический вид. С учетом траектории движения спектрально-угловое распределение излучения, испускаемого одним электроном, может быть получено при подстановке запаздывающего потенциала в уравнения Максвелла. При этом электрон на каждом периоде излучает волну, конструктивная интерференция которых задает резонансную частоту ω_n гармоники с номером n [18]:

$$\omega_n = \frac{4\pi n \gamma^2 c}{\lambda_u \left(1 + \frac{K^2}{2} + \gamma^2 \theta^2\right)}, \quad (\text{A.1})$$

где $\gamma = E/(m_e c^2)$ – Лоренц-фактор, E – энергия электрона, $K = eB_0 \lambda_u / (2\pi m_e c)$ – ондуляторный параметр, c – скорость света, θ – угол наблюдения.

Выражение поперечной компоненты электрического поля $\tilde{E}_\perp$ одного электрона на частоте фундаментальной гармоники ω_1 в дальней зоне (на расстоянии $z \gg L_u/(4\pi)$ от центра ондулятора длиной L_u), используемое для аналитических расчетов, принимает вид [70]:

$$\tilde{E}_\perp(z, \omega, l, \eta, \theta) = -\frac{\omega e A_{JJ} L_u K}{2c^2 z \gamma} \exp\left[\frac{i\omega z |\theta - l/z|^2}{2c}\right] \times \quad (\text{A.2})$$

$$\times \text{sinc} \left[\frac{\omega L_u |\boldsymbol{\theta} - \mathbf{l}/z - \boldsymbol{\eta}|^2}{4c} \right],$$

где $\mathbf{l}, \boldsymbol{\eta}$ – поперечное смещение электрона и наклон его траектории относительно оси ондулятора, $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{r}_\perp/z$ ($\mathbf{r}_\perp$ – поперечный радиус-вектор точки наблюдения), $A_{JJ} = J_0[K^2/(4 + 2K^2)] - J_1[K^2/(4 + 2K^2)]$ (J_n – функция Бесселя первого рода n -го порядка). Излучение от сгустка электронов N_e , проходящих через ондулятор, можно представить в виде суммы полей (А.2), где электрон с номером k характеризуется случайными поперечными смещениями $\mathbf{l}_k, \boldsymbol{\eta}_k$ и временем прибытия t_k в центр вставного устройства:

$$\tilde{E}_\perp^b(z, \omega, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{N_e} \tilde{E}_\perp(z, \omega, \mathbf{l}_k, \boldsymbol{\eta}_k, \boldsymbol{\theta}) \exp(i\omega t_k) \quad (\text{А.3})$$

Выражение (А.3) лежит в основе метода сложения амплитуд, который представляет собой способ моделирования ОИ с любой степенью когерентности.

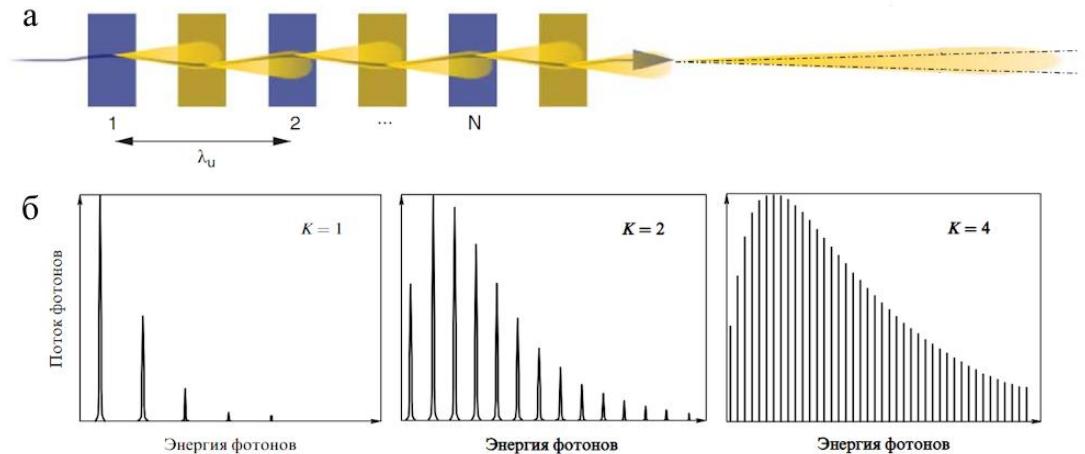


Рисунок А.1. К описанию свойств ОИ: *а* – распространение электронного пучка в ондуляторе (вид сверху), *б* – спектр ОИ при различных параметрах K .

Адаптировано из [18], [65]