

多种图像采集策略下X射线折射信息的提取研究*

王云波 李公平† 潘小东 许楠楠

(兰州大学核科学与技术学院, 兰州 730000)

(2013年11月30日收到; 2014年1月13日收到修改稿)

不同的图像采集策略下, 基于分析晶体相衬成像技术的折射信息提取方法(衍射增强成像法、广义衍射增强成像法、多图成像法)的折射角提取结果有明显的差异. 与摇摆曲线腰位作为图像采集位置的传统策略相比, 采集位置靠近摇摆曲线中轴时, 衍射增强成像法能够提取得到更好的折射角结果. 广义衍射增强成像法的三个图像采集位置相对摇摆曲线中轴对称时, 折射角的提取结果好于采集位置非对称的结果, 并且采集位置靠近摇摆曲线中轴时, 折射角的提取结果好于摇摆曲线腰位或趾位的结果. 对于多图成像法, 相邻图像采集位置的角度间隔大于摇摆曲线半高全宽时, 折射角提取结果非常差; 而当角度间隔小于半高全宽并且图像采集位置对应的角度范围接近样品的最大折射角理论值时, 能够获得很好的折射角提取结果. 此研究有助于实验上对图像采集策略的合理选择以及对折射信息提取方法的更深理解.

关键词: 折射信息提取, 图像采集, 相衬成像技术, 摇摆曲线

PACS: 42.30.Rx, 42.25.Gy, 41.50.+h

DOI: 10.7498/aps.63.104206

1 引言

X射线穿过物体时不仅振幅会发生衰减且相位也会发生改变(相移), 其折射率 n 为复数形式, $n = 1 - \delta - i\beta$, 其中 δ 和 β 分别表示相位因子(X射线传播过程中的相移)和吸收因子(X射线的吸收), $\delta = r_e \rho_e \lambda^2 / 2\pi$, $\beta = \mu \lambda / 4\pi$. 这里 r_e 为经典电子半径, $r_e = 2.818 \times 10^{-15}$ m; ρ_e , λ 和 μ 分别为样品内某几何点的电子密度和入射X射线波长以及吸收系数^[1-3]. 传统的X射线成像技术仅考虑了X射线的衰减信息(吸收衬度), 忽略了折射信息(相位衬度). 轻元素样品(即对X射线弱吸收样品)的 δ 值比 β 值大1000倍左右, 而对于原子序数较高元素组成的样品, δ 与 β 也相差10倍甚至100倍左右(尤其在X射线能量较高情况下)^[3]. 因此, 与吸收衰减信息相比, 样品对相移信息更敏感, 利用相衬成像技术能够获得更高衬度的图像(尤其是轻元素样品)^[1,3-16]. 作为一种无损检测技术, 基于分析

晶体成像(ABI)技术^[1,4-16]是目前被广泛研究和应用的相衬成像技术之一, 可以提取出样品的折射信息、吸收信息和超小角散射信息. 本文仅对折射角信息的提取进行讨论. ABI是在分析晶体与单色晶体(样品置于两者间)的夹角位置采集得到的光子强度图像, 并利用折射信息提取算法实现样品相位信息的获取, 进而重建样品的内部结构. 因此, 在样品的相位衬度成像实现过程中, 折射信息的提取尤为重要. 目前, 存在的折射信息提取方法主要有衍射增强成像(DEI)法^[1,6-8]、扩展衍射增强成像(E-DEI)法^[6,9]、广义衍射增强成像(G-DEI)法^[6,10-12]、多图成像(MIR)法^[1,6,13,14]和高斯曲线拟合近似(GCF)法^[1,6,15]等. 在这些方法中, DEI和E-DEI方法需要采集两幅图像, G-DEI方法需要采集三幅图像, MIR和GCF方法则需要采集多幅(不少于三幅)图像, 其中MIR和GCF方法提取的折射信息最准确.

虽然基于不同的折射信息提取方法, 对折射角的提取已开展了大量研究^[1,4-16], 但同一提取方法

* 中央高等学校基本科研基金(批准号: 860452)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: ligp@lzu.edu.cn

在不同的图像采集策略下,对折射角提取结果的差异的研究还很缺乏.利用低原子序数(石墨,原子序数 $Z = 6$)和较高原子序数(铜, $Z = 29$)元素材料模型,在 59.31 和 30 keV 的平行束 X 射线条件下,本文对 DEI, G-DEI 或 MIR 方法在不同图像采集策略下折射角提取结果的差异进行了讨论和分析,同时指出为了实现良好的信息提取结果,上述三种折射信息提取方法应分别采取的图像采集策略.

2 基于分析晶体相衬成像原理

测量 ABI 的基本光路示意图如图 1 所示,单色晶体和分析晶体组成晶体衍射系统(整个成像装置的关键元件),样品置于两者之间.当穿过样品的 X 射线满足分析晶体(角度滤波器作用)的 Bragg 角或在 Bragg 角附近很窄角宽度内时, X 射线会经分析晶体衍射到达探测器上.分析晶体可绕垂直于纸面的转轴 (y 轴) 进行转动,未放置样品时, X 射线的反射率与转角(即分析晶体与单色晶体的夹角 θ_A) 的关系曲线称为本征摇摆曲线(RC),它是单色晶体和分析晶体对 X 射线的反射率的互相关^[1,2,8,10,13].基于晶体衍射动力学^[1,2]得到的晶体 Si(111) 的理论 RC 与文献^[10, 11, 16]的结果相近.图 2 给出了在 59.31 和 30 keV 的平行束 X 射线条件下,晶体 Si(111) 的理论 RC,可知 RC 半高全宽(FWHM) $\Delta\theta_A$ 分别约为 5.5 和 11 μrad .图 2 上点 $F_1(T_1)$, $F_2(T_2)$ 和 $F_3(T_3)$ 分别位于 RC 的上腰位,腰位和趾位区域,点 $F'_1(T'_1)$, $F'_2(T'_2)$ 和 $F'_3(T'_3)$ 则是它们在 RC 上的右对称点;点 $F_1(T_1)$, $F_2(T_2)$ 和 $F_3(T_3)$ 对应的角度分别为 $-0.25\Delta\theta_A$, $-0.5\Delta\theta_A$ 和 $-\Delta\theta_A$,点 $F'_1(T'_1)$, $F'_2(T'_2)$ 和 $F'_3(T'_3)$ 对应的角度则分别为 $0.25\Delta\theta_A$, $0.5\Delta\theta_A$ 和 $\Delta\theta_A$;点 O 是 RC 的峰位(角度值为 0 μrad).

放置样品时,通过转动分析晶体得到不同转角下的强度图像,并利用折射角提取算法获得样品中感兴趣区域的折射角信息.经分析晶体衍射后到达探测器上的光子强度 I 可表示为^[1,6]

$$I = I_R R(\theta_A + \Delta\theta), \quad (1)$$

其中, I_R 为穿过样品后的 X 射线光子强度, $R(\theta)$ 为分析晶体的反射率函数, $\Delta\theta$ 为样品在子午面内 (xz 平面) 的折射角, $\theta_A + \Delta\theta$ 为折射线偏离分析晶体 Bragg 角的大小.

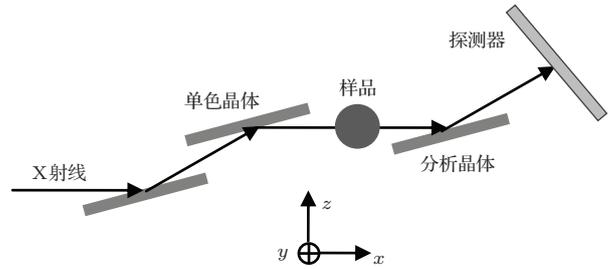


图 1 测量 ABI 的基本光路示意图

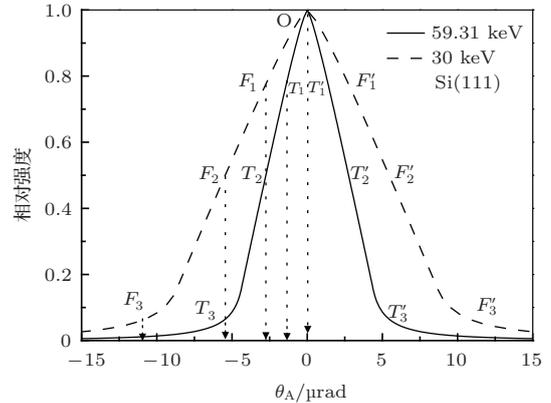


图 2 摇摆曲线示意图

3 折射信息提取算法

3.1 DEI 法

DEI 法是由 Chapman 等^[7]于 1997 年提出,该方法利用在 RC 上正斜率区域和负斜率区域的对称位置采集的两幅图像提取出折射角信息.由于 RC 上近似线性区域上的点的二阶导数近似为零(图 2),可将(1)式中反射率函数 $R(\theta_A + \Delta\theta)$ 进行一阶 Taylor 近似展开,

$$R(\theta_A + \Delta\theta) = R(\theta_A) + \frac{dR(\theta_A)}{d\theta_A} \Delta\theta, \quad (2)$$

其中, $\Delta\theta$ 为穿过样品后的 X 射线偏离入射方向的角度, $\frac{dR(\theta_A)}{d\theta_A}$ 为反射率函数的一阶导数.在负角 θ_{A-} (RC 左半区域) 和正角 θ_{A+} (RC 右半区域) 位置(图 2) 采集得到的光子强度 I_- 和 I_+ 可分别表示为

$$I_- = I_R \left(R(\theta_{A-}) + \frac{dR(\theta_{A-})}{d\theta_{A-}} \Delta\theta \right), \quad (3)$$

$$I_+ = I_R \left(R(\theta_{A+}) + \frac{dR(\theta_{A+})}{d\theta_{A+}} \Delta\theta \right), \quad (4)$$

联立(3)和(4)式可得到折射角

$$\Delta\theta = \frac{I_- R(\theta_{A+}) - I_+ R(\theta_{A-})}{I_+ \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_{A-}) - I_- \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_{A+})}. \quad (5)$$

DEI方法最大的优点是只需采集两幅强度图像就可得到折射角的近似解, 但仅凭两幅图像求解的结果受噪声影响会很大, 并且能够提取的折射角大小受限于RC的FWHM^[1,6-8].

3.2 G-DEI法

G-DEI法是利用反射率函数的二阶Taylor近似展开式, 并利用在RC上三个随机位置对应的晶体(分析晶体和单色晶体)夹角位置采集的三幅强度图像提取折射角信息, 采集得到的光子强度 I_i 为^[6,10-12]

$$I_i \cong I_R \left[R_i(\theta_A) + \frac{dR_i(\theta_A)}{d\theta_A} \Delta\theta + \frac{d^2R_i(\theta_A)}{d\theta_A^2} \times \frac{(\Delta\theta^2 + \sigma_\theta^2)}{2} \right] \quad (i = 1, 2, 3), \quad (6)$$

由(6)式可解得

$$\Delta\theta = - \frac{\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} I_i R_j \frac{d^2R_k(\theta_A)}{d\theta_A^2}}{\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} I_i \frac{dR_j(\theta_A)}{d\theta_A} \frac{d^2R_k(\theta_A)}{d\theta_A^2}}, \quad (7)$$

其中, $\varepsilon_{i,j,k}$ 为反对称张量, $\frac{dR(\theta_A)}{d\theta_A}$ 和 $\frac{d^2R(\theta_A)}{d\theta_A^2}$ 分别为分析晶体反射率函数的一阶导数和二阶导数, σ_θ^2 为由散射引起的标准偏差.

与DEI方法相比, G-DEI方法的优势在于可利用三幅强度图像提取超小角X射线散射(USAXS)信息. 本文仅研究不同强度图像采样策略对折射角信息提取效果的影响, 对USAXS信息的提取将不进行讨论.

3.3 MIR法

MIR法是在RC上多个位置($N \geq 3$)采集强度图像实现折射角信息的提取, 在无样品和有样品时得到两套强度图像, 再利用重心计算公式分别得到无样品和有样品时RC的峰位重心对应的角度, 两者之差即为样品的折射角近似解^[1,6,13,14],

$$\alpha_B = \frac{\sum_{i=1}^N \theta_A(i) I_B(i)}{\sum_{i=1}^N I_B(i)}, \quad (8)$$

$$\alpha_S = \frac{\sum_{i=1}^N \theta_A(i) I_S(i)}{\sum_{i=1}^N I_S(i)}, \quad (9)$$

$$\Delta\theta = \alpha_S - \alpha_B, \quad (10)$$

其中, $I_B(i)$ 和 $I_S(i)$ 分别为无样品和有样品时在RC上的第*i*个位置对应的晶体夹角位置采集得到的光子强度, $\theta_A(i)$ 为RC上的第*i*个位置对应的角度, α_B 和 α_S 分别为无样品和有样品时RC重心位置对应的角度.

与前两种方法相比, MIR方法能够提取更准确的样品折射角信息, 且不需要知道RC上图像采集位置的一阶导数或二阶导数, 但需要采集多幅强度图像(可有效抑制噪声), 从而增加了样品的辐照剂量和图像采集时间.

4 结果及讨论

4.1 模拟实验条件

预设模拟实验条件如下: 选用59.31 keV(钨靶 $K_{\alpha 1}$ 特征能量)和30 keV的平行束X射线; 模型材料为铜(密度 $\rho = 8.96 \text{ g/cm}^3$)和石墨($\rho = 1.7 \text{ g/cm}^3$); 探测器像素单元为 $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$. 图3(a)和(b)分别给出了样品的三维模型和模型的切片图. 模型为圆柱体(高度为9 mm, 直径为6 mm), 内部包含两个直径为1 mm的圆柱体, 三个直径分别为1, 1.5和2 mm的球体, 此五个几何体腔内均为空气或真空. 选取模型中段部分的一个切面作为折射角信息提取分析的几何面.

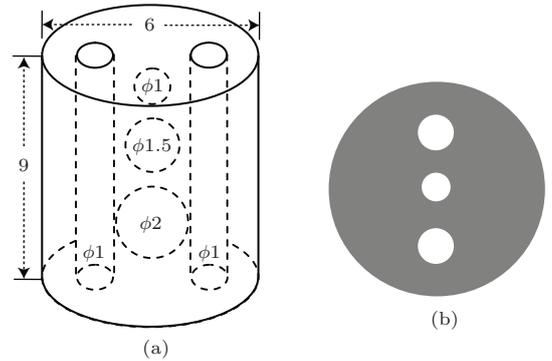


图3 样品三维模型及其切片示意图 (a) 样品三维模型, 图内数据单位为mm; (b) 模型切片示意图

模拟过程中, 我们不考虑样品模型对X射线的吸收效应. 这是因为DEI, G-DEI和MIR方法的折射角计算公式((5), (7), (8)和(9)式)的分子和分母项都存在光子强度, 因此影响计算结果的因素是光子相对强度, 而非绝对强度. 不考虑吸收效应和考虑吸收效应时, 相对强度没有发生变化(相对强度决定于分析晶体对X射线的反射率), 因此所提取

的折射角信息一致。

4.2 DEI法模拟结果及讨论

DEI法提取折射角信息时, 只需采集两幅强度图像, 本文采用了三种图像采集策略: $(-\theta_{A1}, \theta_{A1})$, $(-\theta_{A2}, \theta_{A2})$ 和 $(-\theta_{A3}, \theta_{A3})$, 其中, θ_{An} ($n = 1, 2, 3$) 对应的晶体夹角如表 1 所列, 角度的单位为 μrad . 将上述三种策略依次标注为 CD1, CD2 和 CD3, 以便于后续讨论. CD1 策略对应的图像采集位置为 RC 的点 $F_1(T_1)$ 和 $F'_1(T'_1)$ (图 2); CD2 的采集位置为点 $F_2(T_2)$ 和 $F'_2(T'_2)$ (即 RC 的腰位); CD3 的采集位置为点 $F_3(T_3)$ 和 $F'_3(T'_3)$ (即 RC 的趾位). 如图 4 (a) 和 (b) 所示, 对于铜材料模型, X 射线能量为 59.31 和 30 keV 时, CD1 策略的折射角提取结果最好, 其次是 CD2 策略的折射角提取结果, CD3 策略的折射角提取结果最差, 并且内插图表明折射角理论值越大的区域, 三种策略的提取结果差异越明显. 而由图 4 (c) 和 (d) 可知, 石墨材料模型下, 三种策略的折射角提取结果非常接近, 内插图表明, 在 $M = 50$ (M 为图 4 的横坐标值) 的附近区域 (与其他区域相比, 此区域的折射角理论值较大), CD1 的提取结果明显好于其他两种策略的提取结果. 因此, 利用 DEI 方法进行折射角信息提取时, 与传统的 RC 腰位图像采集策略 (CD2 策略)^[1,6-8] 相比, 图像采集位置靠近 RC 中轴的 CD1 策略能够获取更好的折射角结果. 此外, 从图 4 还可以看出, 三种图像采集策略的折射角提取结果均小于 RC 的 FWHM, 即受限于 RC 的 FWHM^[1,6-8].

上述结果表明, 当理论折射角略大时, CD1 策略下由 (5) 式得到的折射角的计算误差略小于 CD2 策略下折射角的计算误差, 能够得到更准确的折射角结果. 如理论折射角为 $0.75\Delta\theta_A$ 的 X 射线, CD2 策略下分析晶体的反射率为 $R(0.25\Delta\theta_A)$ 和 $R(1.25\Delta\theta_A)$; CD1 策略下分析晶体的反射率为 $R(0.5\Delta\theta_A)$ 和 $R(\Delta\theta_A)$. 将上述反射率数据代入 (5) 式中, CD2 策略下折射角可表示为

$$\Delta\theta = \frac{[R(0.25\Delta\theta_A) - R(1.25\Delta\theta_A)]R(0.5\Delta\theta_A)}{[R(0.25\Delta\theta_A) + R(1.25\Delta\theta_A)]k_1},$$

其中 k_1 为 RC 上点 $F_2(T_2)$ 的斜率 (图 2); CD1 策略下折射角可表示为

$$\Delta\theta = \frac{[R(0.5\Delta\theta_A) - R(\Delta\theta_A)]R(0.25\Delta\theta_A)}{[R(0.5\Delta\theta_A) + R(\Delta\theta_A)]k_2},$$

其中 k_2 为 RC 上点 $F_1(T_1)$ 的斜率, 且 $k_2 \approx k_1$ (图 2). 将 $R(0.25\Delta\theta_A)$, $R(0.5\Delta\theta_A)$, $R(\Delta\theta_A)$ 和 $R(1.25\Delta\theta_A)$ 在 RC 上对应的值代入上述两式中, 容易得到 CD1 策略下折射角的计算结果大于 CD2 策略下折射角的计算结果, 更接近理论值 $0.75\Delta\theta_A$. 当样品的折射角理论值很大时, 在 CD1 和 CD2 策略下, 一阶 Taylor 展开式 (2) 和折射角计算式 (5) 的误差都偏大, 折射角提取结果均会严重偏离理论值. 很明显, 对于 CD3 策略, 与其他两种策略的图像采集位置相比, 其在 RC 上的图像采集位置附近的线性部分明显偏短 (图 2), 因此, 样品的折射角理论值稍大时, CD3 策略与其他两种策略相比, 反射率函数的一阶 Taylor 展开式 (2) 的误差会略高, (5) 式的折射角计算结果相对理论值的偏离程度会更大.

此外, 由图 4 的内插图可知, 折射角提取曲线的峰值与理论曲线的峰值存在错位, 折射角理论值与提取值相差越大的区域, 错位越严重. 此现象的出现可理解为在理论折射角越大的情况下, 由于 (5) 式的计算误差越大, 折射角提取值会很小, 结果导致折射角提取曲线的峰值相对理论曲线的峰值发生位移. 因此, 当样品的感兴趣区域在 X 射线方向上的折射角理论值很大 (比 RC 的 FWHM 大很多) 时, DEI 方法提取的折射角衬度图像中感兴趣区域的尺寸与实际尺寸不相符; 当折射角理论值不是很大时, 其与实际尺寸相符.

如图 4 (e) 和 (f) 所示, 图像采集位置略有不对称的 CD1m 和 CD1p 策略 (即策略 $(-\theta_{A1}, \theta_{A1m})$ 和 $(-\theta_{A1}, \theta_{A1p})$, θ_{A1m} 和 θ_{A1p} 对应的晶体夹角如表 1 所列) 的折射角提取曲线与对称的 CD1 策略的结果非常接近, 因此, 可以利用 RC 上图像采集位置对称的理想条件对 DEI 方法的折射角提取进行讨论, 即使实验上很难达到这一理想条件.

4.3 G-DEI法模拟结果及讨论

与 DEI 方法相比, G-DEI 方法需要多采集一幅强度图像, 本文选用了五种图像采集策略, 分别为 $(-\theta_{A1}, \theta_{A0}, \theta_{A1})$, $(-\theta_{A2}, \theta_{A0}, \theta_{A2})$, $(-\theta_{A3}, \theta_{A0}, \theta_{A3})$, $(-\theta_{A3}, -\theta_{A1}, \theta_{A2})$ 和 $(-\theta_{A3}, -\theta_{A2}, \theta_{A1})$, θ_{An} ($n = 0, 1, 2, 3$) 对应的晶体夹角如表 1 所列, 角度的单位为 μrad . 将上述五种策略依次标注为 CG1, CG2, CG3, CG4 和 CG5, 以便于后续讨论. CG1 策略表示图像的采集位置依次为 RC 上点 $F_1(T_1)$, O

和 $F'_1(T'_1)$; CG2 策略的图像采集位置为点 $F_2(T_2)$, O 和 $F'_2(T'_2)$ (RC 的腰位); CG3 策略的图像采集位置为点 $F_3(T_3)$, O 和 $F'_3(T'_3)$ (RC 的趾位); CG4 策略的图像采集位置为点 $F_3(T_3)$, $F_1(T_1)$ 和 $F'_2(T'_2)$; CG5 策略的图像采集位置为点 $F_3(T_3)$, $F_2(T_2)$ 和 $F'_1(T'_1)$. 如图 5 (a) 和 (c) 所示, 对于铜材料模型, 在 59.31 keV 的 X 射线下, CG1 策略的折射角提取结果最好, CG3 策略的折射角提取结果次之, CG2 策略的结果最差; 而 30 keV 的 X 射线下, CG2 和 CG3

策略的结果非常接近, CG1 策略的结果则明显好于它们; 并且在折射角理论值越大的区域, CG1 策略与其他两种策略的结果差异越大. 对于石墨材料模型, 三种图像采集策略的折射角提取曲线非常接近, 在折射角理论值较大的区域, CG1 策略的结果明显好于其他两种策略的结果(图 6 (a) 和 (c)). 上述结果表明, 基于 (7) 式, 当折射角理论值较大时, 在 CG1 策略下折射角的计算误差明显小于其他两种策略下折射角的计算误差; 而当折射角理论值较

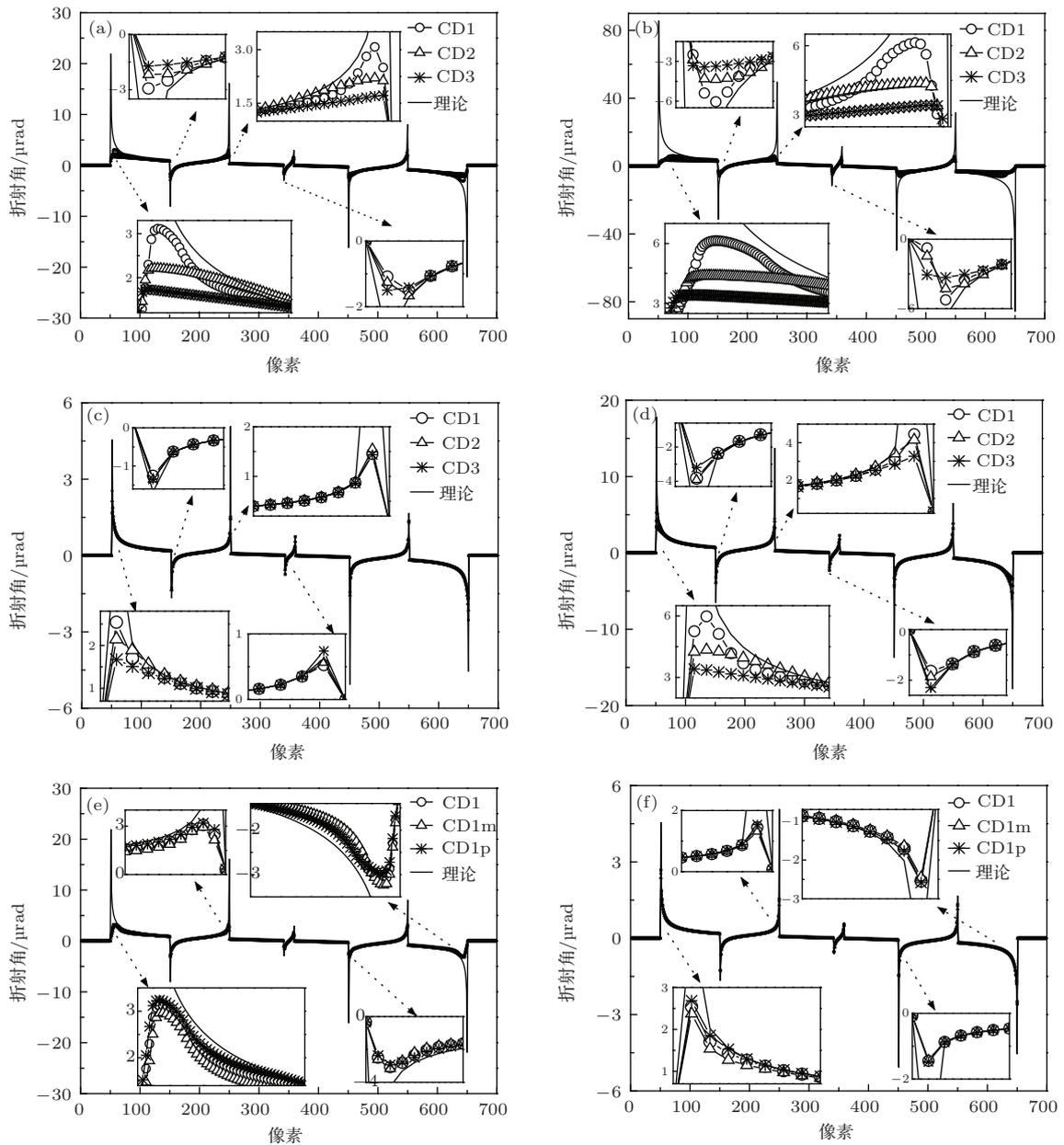


图 4 对于两种样品模型, 不同图像采集策略下, 采用 DEI 方法提取得到的折射角曲线 (a) CD1, CD2 和 CD3 策略, 59.31 keV (铜材料模型); (b) CD1, CD2 和 CD3 策略, 30 keV (铜材料模型); (c) CD1, CD2 和 CD3 策略, 59.31 keV (石墨材料模型); (d) CD1, CD2 和 CD3 策略, 30 keV (石墨材料模型); (e) CD1, CD1m 和 CD1p 策略, 59.31 keV (铜材料模型); (f) CD1, CD1m 和 CD1p 策略, 59.31 keV (石墨材料模型)

表1 图像采集策略中数字对应的晶体夹角(单位为 μrad)

提取方法	θ_{A0}	θ_{A1m}	θ_{A1}	θ_{A1p}	θ_{A2}	θ_{A3}
DEI	0	$0.2\Delta\theta_A$	$0.25\Delta\theta_A$	$0.3\Delta\theta_A$	$0.5\Delta\theta_A$	$\Delta\theta_A$
G-DEI	0	$0.2\Delta\theta_A$	$0.25\Delta\theta_A$	$0.3\Delta\theta_A$	$0.5\Delta\theta_A$	$\Delta\theta_A$

小时, 三种策略下折射角的计算误差相近. 因此, 利用G-DEI方法提取样品的折射角时, 可优先考虑利用采集位置靠近RC中轴的CG1策略对图像进行采集.

将图5和图6与图4对比后可以看出, CG1(或

CG2)策略的折射角提取曲线与DEI方法的CD1(或CD2)策略的提取曲线基本重合, 这是因为 θ_{A1} 和 θ_{A2} 在RC上对应的图像采集位置(图2上点 $F_1(T_1)$, $F'_1(T'_1)$, $F_2(T_2)$ 和 $F'_2(T'_2)$)的反射率二阶导数 $\frac{d^2R(\theta_A)}{d\theta_A^2} \approx 0$, θ_{A0} 对应位置(点O)的反射率一阶导数 $\frac{dR(\theta_A)}{d\theta_A} = 0$, 在上述条件下G-DEI折射角提取式(7)降为DEI折射角提取式(5)^[10]. CG3策略的折射角提取结果好于DEI方法的CD3策略的折射角提取结果, 这是由于反射率函数在图像采集位置(RC上点 $F_3(T_3)$ 和 $F'_3(T'_3)$)的二阶Taylor展开

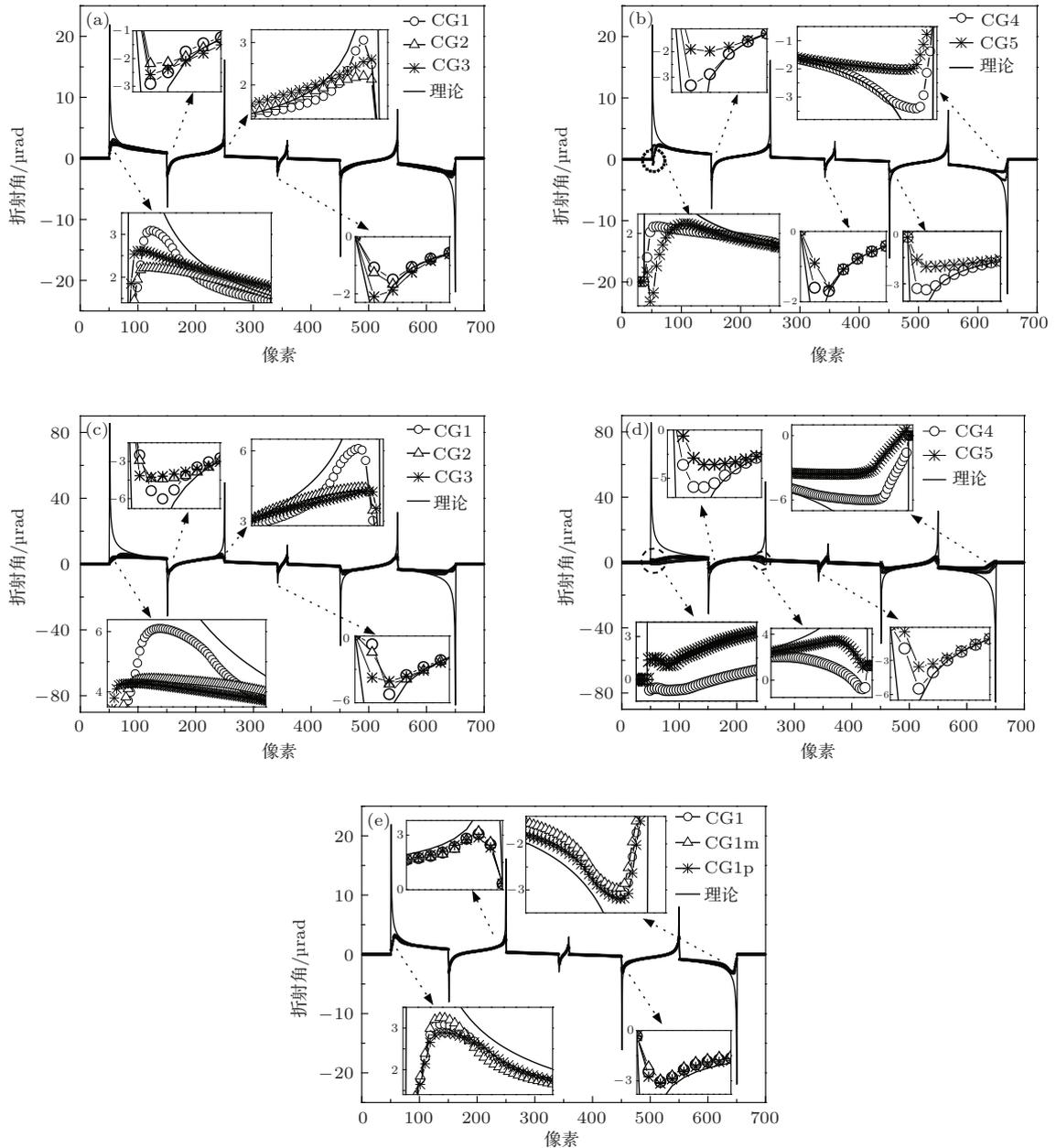


图5 对于铜材料模型, 不同图像采集策略下, 采用G-DEI方法提取得到的折射角曲线 (a) CG1, CG2, CG3策略, 59.31 keV; (b) CG4和CG5策略, 59.31 keV; (c) CG1, CG2, CG3策略, 30 keV; (d) CG4和CG5策略, 30 keV; (e) CG1, CG1m, CG1p策略, 59.31 keV

式(6)的误差小于一阶 Taylor 展开式(2)的误差所致.

如图 5(b), (d) 和图 6(b), (d) 所示, 由于 CG4 和 CG5 策略的图像采集位置相对 RC 中轴的不对称性, 模型对称位置上的折射角提取值大小明显不等(理论值相等). 很明显, 将这两种策略的折射角提取曲线与前三种策略(CG1, CG2 和 CG3)的结果进行对比, CG4 和 CG5 策略的折射角提取结果并不好, 甚至在折射角理论值较大的区域, 折射角提取曲线严重偏离理论曲线. 因此, 利用 G-DEI 方法进行折射角信息提取时, 建议采取如 CG1 等图像采集位置对称的策略采集样品的强度图像.

与 DEI 方法类似, G-DEI 所提取的折射角同样受限于 RC 的 FWHM. 当样品的折射角理论值比 RC 的 FWHM 大很多时, 提取的折射角衬度图像中感兴趣区域的尺寸与实际尺寸不相符. 图像采集位置略有不对称的 CG1m 和 CG1p 策略(即策略 $(-\theta_{A1}, \theta_{A0}, \theta_{A1m})$ 和 $(-\theta_{A1}, \theta_{A0}, \theta_{A1p}), \theta_{A1m}$ 和 θ_{A1p} 对应的晶体夹角如表 1 所列)的折射角提取曲线与位置对称的 CG1 策略的结果非常接近(图 5(e) 和图 6(e)), 因此可以利用 RC 上图像采集位置对称的理想条件对 G-DEI 方法的折射角提取进行讨论, 即使实验上很难达到这一理想条件.

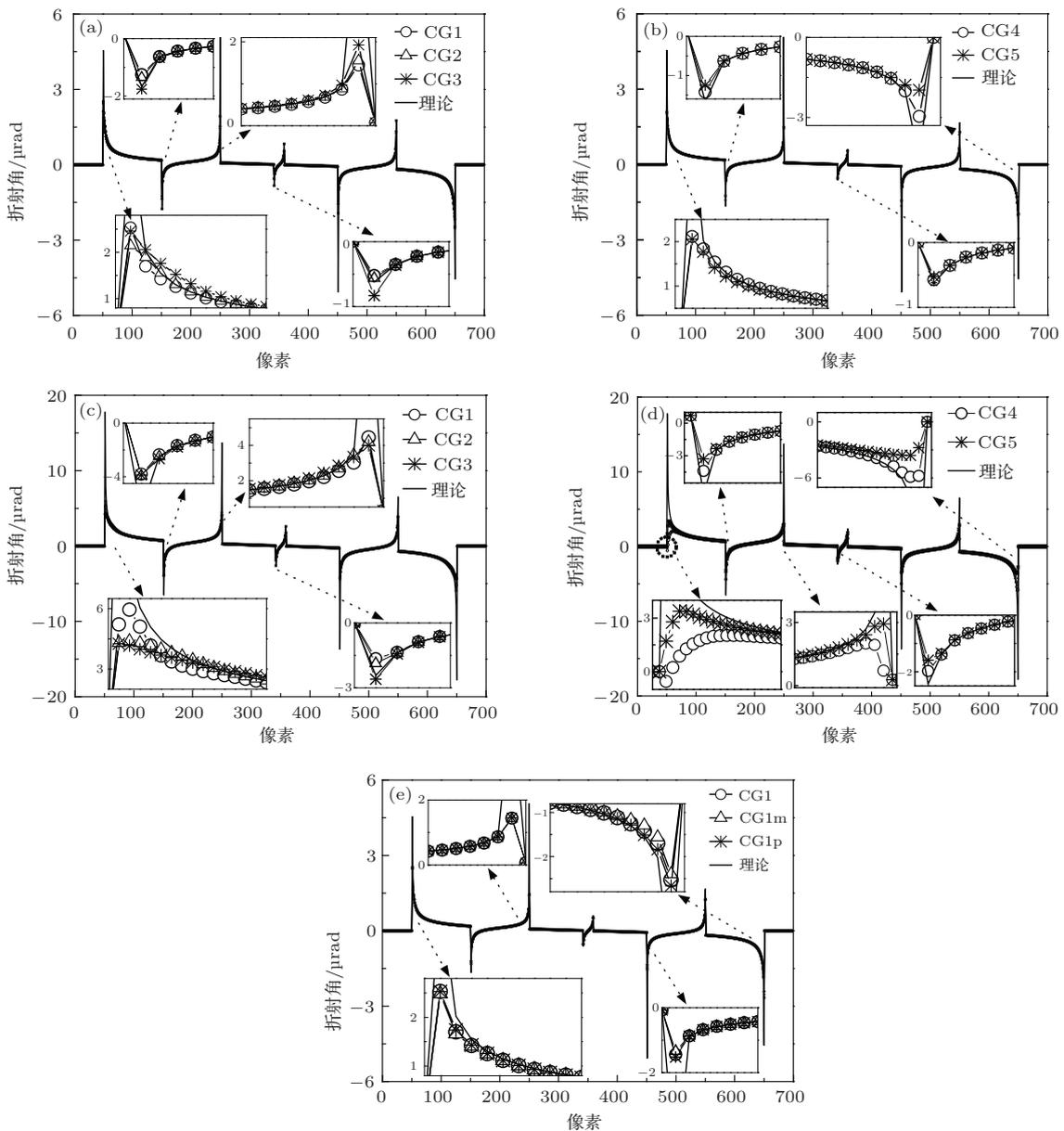


图 6 对于石墨材料模型, 不同图像采集策略下, 采用 G-DEI 方法提取得到的折射角曲线 (a) CG1, CG2, CG3 策略, 59.31 keV; (b) CG4 和 CG5 策略, 59.31 keV; (c) CG1, CG2, CG3 策略, 30 keV; (d) CG4 和 CG5 策略, 30 keV; (e) CG1, CG1m, CG1p 策略, 59.31 keV

4.4 MIR 法模拟结果及讨论

与 DEI 和 G-DEI 方法相比, MIR 方法需要采集多幅强度图像(不少于三幅), 本文选用了 17 种图像采集策略如下: $(\theta_{R6}, \theta_{S3}), (\theta_{R9}, \theta_{S3}), (\theta_{R12}, \theta_{S3}), (\theta_{R16}, \theta_{S8}), (\theta_{R24}, \theta_{S8}), (\theta_{R30}, \theta_{S1}), (\theta_{R30}, \theta_{S3}), (\theta_{R32}, \theta_{S8}), (\theta_{R40}, \theta_{S8}), (\theta_{R50}, \theta_{S5}), (\theta_{R60}, \theta_{S6}), (\theta_{R70}, \theta_{S14}), (\theta_{R80}, \theta_{S2}), (\theta_{R80}, \theta_{S8}), (\theta_{R100}, \theta_{S10}), (\theta_{R120}, \theta_{S12})$ 和 $(\theta_{R140}, \theta_{S14})$, 策略含义: 如 $(\theta_{R50}, \theta_{S5})$ 策略中 θ 的下标 R50 表示 RC 上图像采集位置对应的角度(分析晶体与单色晶体的夹角)范围为 $-50-50 \mu\text{rad}$, S5 则表示相邻图像采集位置的角度间隔(分析晶体转角步长)为 $5 \mu\text{rad}$, 即采集 21 幅图像, 其他图像采集策略含义同上, R 表示图像采集位置对应的角度范围, S 表示相邻位置的角度间隔. 为便于后续讨论, 上述策略依次标注为 CMr6s3, CMr9s3, CMr12s3, CMr16s8, CMr24s8, CMr30s1, CMr30s3, CMr32s8, CMr40s8, CMr50s5, CMr60s6, CMr70s14, CMr80r2, CMr80s8, CMr100s10, CMr120s12 和 CMr140s14. 从图 7 可以看出, 59.31 keV 的 X 射线下, 相邻图像采集位置的角度间隔为 1, 3, 5 μrad (对应的图像采集策略为 CMr30s1, CMr6s3, CMr9s3, CMr12s3, CMr30s3 和 CMr50s5 策略)时, 样品(铜或石墨材料模型)的折射角提取曲线与理论曲线非常接近, 折射角的提取结果很好; 而当角度间隔为 6, 8 μrad (对应的图像采集策略为 CMr60s6, CMr32s8 和 CMr80s8 策略)时, 折射角提取曲线明显偏离理论曲线, 折射角提取结果较差. 30 keV 的 X 射线下, 相邻图像采集位置的角度间隔为 2, 8, 10 μrad (对应的图像采集策略为 CMr80s2, CMr16s8, CMr24s8, CMr40s8, CMr80s8 和 CMr100s10 策略)时, 折射角的提取结果很好; 而当角度间隔为 12, 14 μrad (对应的图像采集策略为 CMr120s12, CMr70s14 和 CMr140s14 策略)时, 折射角提取效果较差. 很明显, 将上述相邻位置的角度间隔与 RC 的 FWHM 进行对比, 角度间隔低于 RC 的 FWHM 时, 能够得到很好的折射角提取结果; 高于 RC 的 FWHM 时, 折射角的提取结果较差. 并且 59.31 keV 的 X 射线下, CMr60s6, CMr80s8 策略的图像采集数(21 幅)与 CMr30s3, CMr50s5 策略的图像采集数相等; 30 keV 的 X 射线下, CMr120s12, CMr140s14 策略的图像采集数(21 幅)与 CMr80s8, CMr100s10 策

略的图像采集数相等, 因此排除了图像采集数目对上述结果的影响. 上述现象表明: 基于 (9) 式, 当相邻图像采集位置的角度间隔高于 RC 的 FWHM 时, 由于样品 RC 的重心位置附近的取值点数较少, 导致重心位置对应角度的计算误差较大, 因此计算结果与实际重心对应的角度相差较大, 以致于折射角的提取结果很差.

由图 7 (b), (d), (e) 和 (f) 可知, 相邻图像采集位置的角度间隔相同时(小于 RC 的 FWHM), 图像采集位置对应的不同角度范围对折射角的提取结果有明显影响. 表 2 列出了在 $M = 51$ (M 为图 7 的横坐标值)的位置, 样品的折射角理论值以及不同图像采集策略的折射角提取值, 其中增量表示两种图像采集策略的折射角提取值的差值(后者高于前者), 如 CMr30s3 策略比 CMr9s3 策略的折射角提取值大 $9.6 \mu\text{rad}$. 基于图像采集策略对应的角度范围值与折射角理论值的关系, 表 2 所列的策略可分为三类: 第一类是后者比前者大一倍以上(CMr9s3 和 CMr24s8 策略); 第二类是前者与后者相近(CMr30s3, CMr80s8, CMr6s3 和 CMr16s8 策略); 第三类是前者比后者大一倍以上(CMr12s3 和 CMr40s8 策略). 第二类策略与第一类策略的折射角提取值相比, 对于铜材料模型, 在 59.31 keV 的 X 射线下, CMr30s3 策略与 CMr9s3 策略的折射角提取值差值约为理论值的二分之一; 而在 30 keV 的 X 射线下, CMr80s8 策略与 CMr24s8 策略的折射角提取值差值大于理论值的二分之一. 第三类策略与第二类策略的折射角提取值相比, 对于石墨材料模型, 在 59.31 keV 的 X 射线下, CMr12s3 策略与 CMr6s3 策略的折射角提取值差值小于理论值的五分之一; 而在 30 keV 的 X 射线下, CMr40s8 策略与 CMr16s8 策略的折射角提取值差值约为理论值的五分之一. 上述结果表明, 随着角度范围的扩大, 折射角提取值有明显的提高, 尤其是第二类策略的折射角提取结果相对第一类策略的结果有很大程度的提高, 第三类策略与第二类策略相比, 提高的程度有所减弱. 在实验过程中, 虽然能够通过扩大角度范围来改善样品的折射角提取结果, 但是过大的角度范围下(第三类策略), 需要采集大量的图像, 这样会大量增加图像的采集时间和样品的辐射剂量, 不利于实验; 过小的角度范围下(第一类策略),

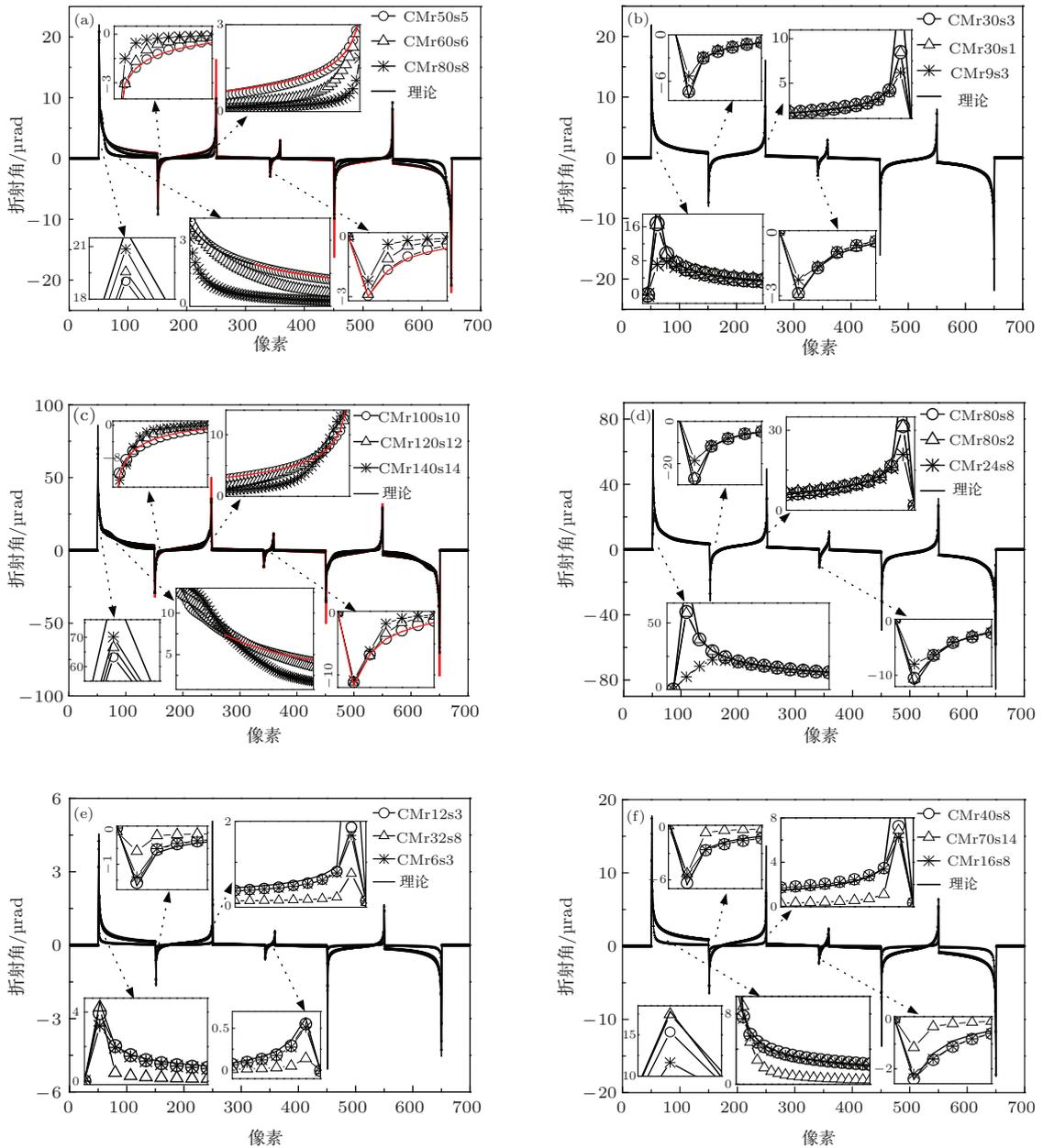


图7 对于两种样品模型,不同图像采集策略下,采用MIR方法提取得到的折射角曲线 (a) CMr50s5, CMr60s6和CMr80s8策略,59.31 keV(铜材料模型);(b) CMr30s3, CMr30s1, CMr9s3策略,59.31 keV(铜材料模型);(c) CMr100s10, CMr120s12, CMr140s14策略,30 keV(铜材料模型);(d) CMr80s8, CMr80s2, CMr24s8策略,30 keV(铜材料模型);(e) CMr12s3, CMr32s8, CMr6s3策略,59.31 keV(石墨材料模型);(f) CMr40s8, CMr70s14, CMr16s8策略,30 keV(石墨材料模型)

虽然图像采集数目较少,但是折射角提取值与理论值相差较大,如表2所列的CMr9s3和CMr24s8策略的结果.因此,需要选择合适的角度范围,可以选择与折射角理论值相近的角度范围(第二类策略),此时能够获得很好的折射角提取结果,如图7(b),(d),(e)和(f)所示的CMr30s3, CMr80s8, CMr6s3和CMr16s8策略的折射角提取曲线,并且与第三类策略相比,能够大量减少图像的采集数目,且提取结果相差不是很大.

图像采集位置对应的角度范围相同的情况下,相邻位置的角度间隔不同时(小于RC的FWHM),折射角提取结果没有明显的不同.从图7(b)和(d)可以看出,对于铜材料模型,在59.31 keV的X射线下,CMr30s1策略和CMr30s3策略相比,虽然图像采集数增加了近两倍,但两者的折射角提取曲线没有明显差异,均接近理论曲线;在30 keV的X射线下(图7(d)),CMr80s2策略的图像采集数比CMr80s8策略的图像采集数多了近三倍,但折射角

提取曲线也没有出现明显差异. 上述现象表明, 小的角度间隔与较大的角度间隔相比, 折射角的提取结果并没有出现明显的改善. 因此利用MIR方法提取折射角信息时, 应选择较大的角度间隔, 这样可以减少图像的采集数.

综合上述结果, 利用MIR方法提取样品折射角时, 相邻图像采集位置对应的角度间隔可以选择

较大的值(小于RC的FWHM); 图像采集位置对应的角度范围则可以选择与样品中感兴趣区域的最大折射角理论估计值相近的值. 这样在获得很好的折射角提取结果下, 又有效地限制了图像的采集数, 从而节约了图像的采集时间, 减少了样品的辐射剂量.

DEI方法和G-DEI方法能够提取得到的折射

表2 在像素51位置, 不同图像采集策略下, 采用MIR方法提取得到的折射角比较(单位为 μrad)

	59.31 keV (铜)	59.31 keV (石墨)	30 keV (铜)	30 keV (石墨)
理论值	22.0	4.6	85.8	17.8
CMr6s3	—	3.2	—	—
CMr9s3	7.1	—	—	—
CMr12s3	—	3.9	—	—
CMr30s3	16.7	—	—	—
CMr16s8	—	—	—	11.7
CMr24s8	—	—	9.6	—
CMr40s8	—	—	—	15.3
CMr80s8	—	—	58.3	—
增量	9.6	0.7	48.7	3.6

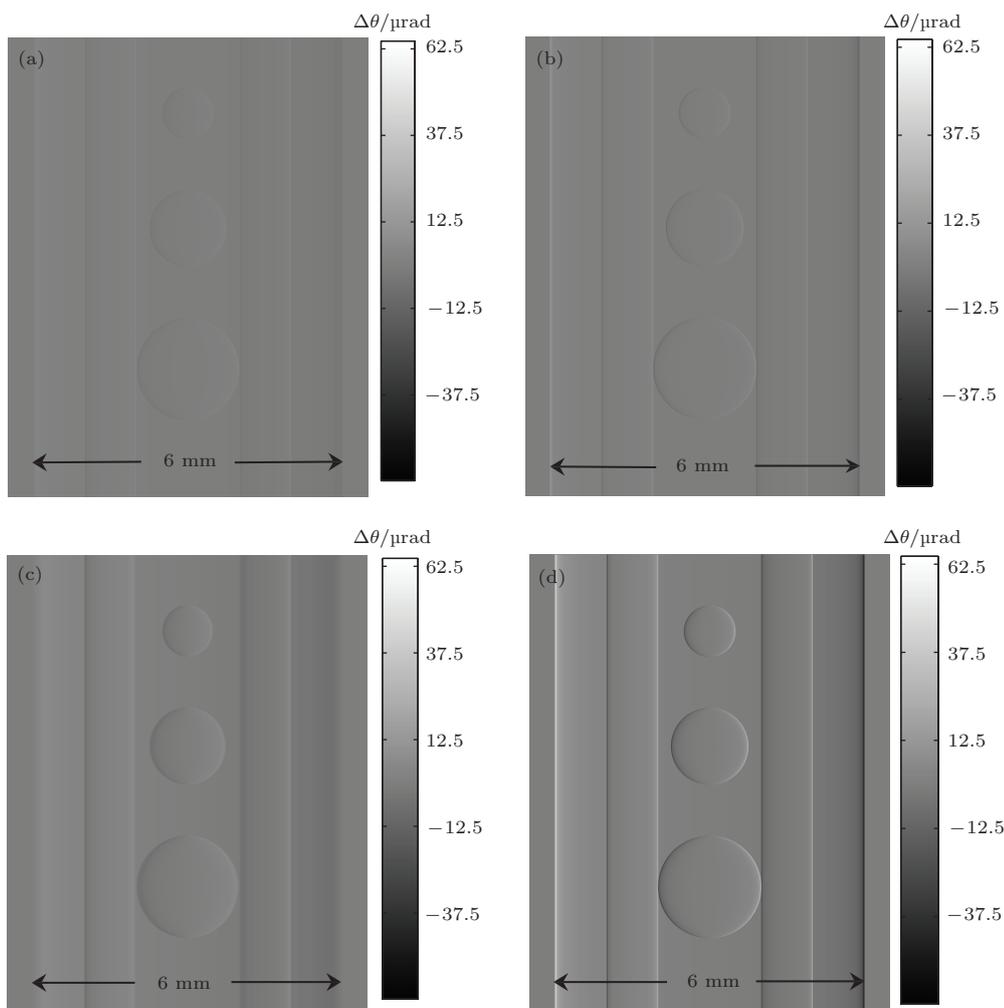


图8 利用DEI方法和MIR方法得到的铜材料模型折射角分布图 (a) DEI方法(CD1策略, 59.31 keV); (b) MIR方法(CMr25s5策略, 59.31 keV); (c) DEI方法(CD1策略, 30keV); (d) MIR方法(CMr80s8策略, 30 keV)

角值均小于RC的FWHM, 而MIR方法的提取值则不受此条件的限制, 能够获得更准确的折射角信息^[1,6,13,14]. 因此, 对比图7和图4(图5、图6)可知, 当样品的折射角理论值比RC的FWHM大很多时, MIR方法的折射角提取结果远远高于DEI或G-DEI方法的结果; 而当样品的折射角理论值小于RC的FWHM时, MIR方法的折射角提取结果与DEI或G-DEI方法的结果相差不大.

4.5 折射衬度图像

对于铜材料模型, 在59.31和30 keV的X射线线下, DEI方法和MIR方法提取得到的折射角分布如图8所示. 图像采集策略: 对于DEI方法, 两种能量下均采用CD1策略(图8(a)和(c)); 对于MIR方法, 59.31 keV下采用CMr25s5(即 $(\theta_{R25}, \theta_{S5})$)策略(图8(b)), 30 keV下采用CMr80s10(即 $(\theta_{R80}, \theta_{S8})$)策略(图8(d)), 其中, 图像采集位置对应的角度范围与样品的最大折射角理论估计值相近, 相邻位置的角度间隔略小于RC的FWHM.

从图8可以看出, MIR方法的折射角提取结果明显好于DEI方法的结果, 尤其在折射角理论值较高的位置(如外圆柱体的左右边缘). 由图8(c)可知, 模型的外圆柱体的左右边缘明显模糊, 其轮廓尺寸小于实际尺寸, 此现象的原因在前面已进行过讨论, 这里将不再累述. 对于同一折射角提取方法, 30 keV的X射线下的折射角提取结果与59.31 keV的X射线下的结果相比, 前者明显大于后者, 这是因为在30 keV的X射线下样品的折射角理论值远远高于53.91 keV的X射线下样品的折射角理论值(图4—图7), 并且RC的FWHM比后者大一倍(图2), 因此在30 keV的X射线下DEI方法和MIR方法能够提取得到更大的折射角值.

5 结 论

在多种图像采集策略下, 本文对基于分析晶体相衬成像技术的DEI法、G-DEI法和MIR法三种折射信息提取方法的折射角提取结果进行了数值模拟研究, 模型选用了铜或石墨材料, 59.31或30 keV的X射线. 结果表明, 不同的图像采集策略对折射角提取方法的折射角提取结果有较大影响, 折射角提取公式的计算误差有明显差异. 样品折射

角理论值与RC的FWHM相差不大时, 与传统的RC腰位(对应的角度为 $0.5\Delta\theta_A$)进行图像采集的策略相比, 采集位置更靠近RC中轴(如 $0.25\Delta\theta_A$)的策略下, DEI方法的折射角提取公式的计算误差略小, 因此能够提取得到更准确的折射角信息. 对于G-DEI方法, 三幅图像的采集位置关于RC中轴对称时, 折射角的提取结果好于非对称的结果; 当折射角理论值比RC的FWHM高很多时, 利用图像采集位置靠近RC中轴(如 $0.25\Delta\theta_A$)的策略, 折射角的提取结果明显好于在RC的腰位或趾位(对应的角度为 $\Delta\theta_A$)采集图像的结果, 后两种图像采集策略的折射角提取结果相近; 折射角理论值较小时, 上述三种策略的折射角提取结果非常接近; 折射角理论值比RC的FWHM高很多时, DEI或G-DEI方法的折射角提取结果会很差, 并且在提取的折射角信息图像中, 感兴趣区域的几何尺寸与实际尺寸不相符. 对于需要采集多幅(不少于三幅)图像的MIR方法, 应合理选择图像采集位置对应的角度范围以及相邻位置的角度间隔, 这样在获得很好的折射角提取结果的前提下, 又能够减少图像的采集时间和样品的辐射剂量; 角度间隔大于RC的FWHM时, 折射角提取公式的计算误差较大, 折射角的提取结果会很差; 而角度间隔小于RC的FWHM时, 可以得到很好的折射角提取结果, 并且此时较大角度间隔的折射角提取结果与较小角度间隔的结果非常接近; 角度范围的选取对折射角的提取结果也有很大影响, 当图像采集位置对应的角度范围与样品的最大折射角理论估计值相近时, 能够获得很好的折射角信息. 本文研究有助于实验上在提取样品的折射角信息时对图像采集策略进行合理的选择, 并对折射角信息提取方法存在的误差有了更深的理解.

参考文献

- [1] Huang Z F 2006 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [黄志峰 2006 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [2] Als-Nielsen J, McMorrow D 2011 *Elements of Modern X-ray Physics* (2nd Ed.) (Chichester: John Wiley & Sons, Ltd.) pp69–221
- [3] Momose A, Takeda T, Yoneyama A, Koyama I, Itai Y 2001 *Anal. Sci.* **17** (suppl.) i527
- [4] Davis T J, Gao D, Gureyev T E, Stevenson A W, Wilkins S W 1995 *Nature* **373** 595

- [5] Zhu P P, Wang J Y, Yuan Q X, Tian Y L, Huang W X, Li G, Hu T D, Jiang X M, Wu Z Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 58 (in Chinese) [朱佩平, 王寓越, 袁清习, 田玉莲, 黄万霞, 黎刚, 胡天斗, 姜晓明, 吴白玉 2005 物理学报 **54** 58]
- [6] Diemoz P C, Bravin A, Glaser C, Coan P 2010 *Phys. Med. Biol.* **55** 7663
- [7] Chapman D, Thomlinson W, Johnston R E, Washburn D, Pisano E, Guir N, Zhong Z, Menk R, Arfelli F, Sayers D 1997 *Phys. Med. Biol.* **42** 2015
- [8] Zhu P P, Yuan Q X, Huang W X, Wang J Y, Shu H, Wu Z Y, Xian D C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1089 (in Chinese) [朱佩平, 袁清习, 黄万霞, 王寓越, 舒航, 吴白玉, 洗鼎昌 2006 物理学报 **55** 1089]
- [9] Hu C H, Zhang L, Li H, Luo S Q 2008 *Opt. Express* **16** 16704
- [10] Chou C Y, Anastasio M A, Brankov J G, Wernick M N, Brey E M, Connor D M, Zhong Z 2007 *Phys. Med. Biol.* **52** 1923
- [11] Rigon L, Arfelli F, Menk R H 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 114102
- [12] Li H, Luo S Q, Wang X Y, Zhang L, Hu C H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2423 (in Chinese) [李辉, 罗述谦, 王雪艳, 张璐, 胡春红 2009 物理学报 **58** 2423]
- [13] Wernick M N, Wirjadi O, Chapman D, Zhong Z, Galatsanos N P, Yang Y Y, Brankov J G, Oltulu O, Anastasio M A, Muehleman C 2003 *Phys. Med. Biol.* **48** 3875
- [14] Pagot E, Cloetens P, Fiedler S, Bravin A, Coan P, Baruchel J, Härtwig J, Thomlinson W 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 3421
- [15] Nesterets Y I, Coan P, Gureyev T E, Bravin A, Cloetens P, Wilkins S W 2006 *Acta Cryst. A* **62** 296
- [16] Rigon L, Besch H J, Arfelli F, Menk R H, Heitner G, Besch H P 2003 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** A107

Simulation of X-ray refraction information extraction using multiple image-collecting strategies*

Wang Yun-Bo Li Gong-Ping[†] Pan Xiao-Dong Xu Nan-Nan

(School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

(Received 30 November 2013; revised manuscript received 13 January 2014)

Abstract

With different strategies collecting images, the extraction results of refraction information using the diffraction-enhanced imaging (DEI), generalized diffraction-enhanced imaging (G-DEI) or multiple-image radiography (MIR) algorithm of analyzer-based imaging technique are greatly different from each other. Compared with the conventional strategy in which the images are acquired at the waist positions of rocking curve (RC), the one with the positions closer to the central axis of RC can obtain more accurate refraction information for the DEI algorithm. For the G-DEI algorithm taking three images, if the positions, where images are obtained, are symmetrical with respect to the central axis of RC, the extraction result of refraction information is better when the positions are asymmetrical. Besides, by comparison with the strategy in which the images are acquired at the waist or toe positions, the one with the positions closer to central axis of RC can obtain better result. If the angle interval of neighbor positions is larger than the full-width at half-maximum (FWHM) of RC, the extraction result of the MIR algorithm is bad. When the angle interval is smaller than the FWHM, and the value of angle range of all positions collecting images is close to the maximum theoretical value of sample, the extraction result is very good. This study will be helpful for reasonably choosing the image-collecting strategies in experiment, and further understanding the extraction algorithms of refraction information.

Keywords: refraction-information extraction, image collection, phase-contrast imaging technique, rocking curve

PACS: 42.30.Rx, 42.25.Gy, 41.50.+h

DOI: 10.7498/aps.63.104206

* Project supported by the Fundamental Scientific Research Foundation for the Central Universities of China (Grant No. 860452).

[†] Corresponding author. E-mail: ligp@lzu.edu.cn