

PIE成像中周期性重建误差的研究*

何小亮¹⁾ 刘诚^{1)†} 王继成¹⁾ 王跃科¹⁾ 高淑梅¹⁾ 朱健强²⁾

1) (江南大学理学院光电信息科学与工程系, 无锡 214122)

2) (中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

(2013年9月10日收到; 2013年10月31日收到修改稿)

本文分析了PIE技术中周期性误差出现的根本原因, 并在此基础上提出一种能明显减小此种误差的方法. 通过将现有PIE成像技术中的定步长二维周期扫描变为步长和方向都不确定的随机二维扫描, 可以根本上去除样品重建像中的周期性误差, 从而得到准确的相位和振幅像, 对提高PIE成像的精度有较好的现实意义.

关键词: 相干衍射成像, 相位恢复, 成像误差

PACS: 42.25.Fx, 42.30.Rx, 42.30.-d

DOI: 10.7498/aps.63.034208

1 引言

相干衍射成像(CDI)是一种无透镜成像技术, 它利用远场衍射强度通过迭代运算的方法重建被测量样品的振幅和相位^[1-7], 由于不需要使用高品质的光学元件, 所以其成像分辨率不受光学元件质量的影响, 理论上CDI可以达到接近衍射极限的空间分辨率, 因此在很多领域特别是X射线和电子束成像领域CDI具有重要意义^[8,9]. 相干衍射成像技术的基本思想是利用所记录的物体透射光的远场衍射强度, 通过在记录面和物面之间的重复迭代运算, 将物面上的收敛计算结果作为物体的真实分布函数, 从而计算出物体的相位信息. CDI的基本思想于20世纪70年代首先由Hoppe等^[10]提出, 后经Fienup等的工作而逐渐发展^[11-13]. 传统的CDI成像技术要求样品是孤立的^[11], 因此成像视场受到较大限制, 而且对于结构稍微复杂的样品, 用CDI往往很难得到可靠的重建图像. 为了克服传统CDI方法的缺点, Rodenburg等在提出了一种Ptychographic Iterative Engine (PIE)的改进方法^[14,15], 该方法用一个空间局域的照明光对待测

样品进行二维扫描, 并用CCD记录照明光在每个位置所形成的散射斑. 只要在扫描过程中保证相邻的两个扫描位置处有一定比例的样品被重复照明, 则可以快速重建出样品的高精度相位像和振幅像. 和传统的CDI方法相比, PIE方法具有收敛速度快、视场大、可靠性高等一系列突出优点. 目前PIE方法已经在可见光、X射线和电子束成像中获得了成功, 在高分辨成像领域产生较大的影响^[16-18].

2004年所提出的PIE方法要求精确知道照明光的解析表达式, 但大多数实际实验研究中, 照明光的分布函数往往不可能绝对精确地预知, 迭代运算中所采用的照明光分布和实际分布往往存在一定的误差, 从而在影响重建像的精度. 为了提高照明光的准确度, Maiden等提出了extended Ptychographic Iterative Engine (ePIE)算法^[19], 其可在照明光和物体的分布函数都未知的情况下, 仅用物体的远场衍射斑同时重建物体和照明光的分布. ePIE算法基本解决了标准PIE方法中难以解决的照明光测量问题, 使大部分的实验研究得以顺利进行, 但在实际的实验中往往发现用ePIE算法所得到的重建像中往往会有周期性的结构出现, 从而使重建像与样品的真实分布之间存在明显误差^[19].

* 江苏省自然科学基金(批准号: BK2012548)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: cheng.liu@hotmail.co.uk

即使是采用标准的PIE方法,在移动步长稍大或者所记录的数据有明显噪声的情况下,同样会出现类似的周期性误差.这种周期性误差产生的具体原因一直没有明确的分析,也没有可靠的办法来消除.为此本文从数学上对这种周期性误差产生的原因进行了详细分析,并在理论上提出了一种降低此种误差的方法,且给出了数字模拟验证.

2 PIE 成像基本原理

图 1(a) 为 PIE 成像的基本原理,一束平行光(电子束、X 射线或可见光)通过小孔后照射到固定在平移台的样品上,被照明的样品在远场形成衍射斑,平移台以固定的步长进行二维扫描时,CCD 记录样品在不同位置时的远场衍射斑 $I_n(k)$. 图 1(b) 是样品在扫描过程中照明光在样品表面的位置分布情况,从中可以看出,在样品的相邻两个扫描位置处,有一定比例的面积被照明光所重复照明,这是 PIE 方法相对传统 CDI 方法的主要改进,也是其具有很多突出优点的原因所在.简单地说,每个散射斑都可以看作是重叠区域和未重叠区域的干涉叠加,而重叠区域参与两个相邻位置的散射斑的形成,客观上锁定了相邻两个位置处的物体相位关系,起到了和全息中参考光相类似的作用^[15-18]. 分别给样品在第 n 个扫描位置处的复振幅分布 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 和照明光分布 $P(\mathbf{r})$ 为任意猜想值后,PIE 的迭代重建过程如下:

- 1) 计算样品后表面的透射光场函数 $U_n(\mathbf{r}) = O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \times P(\mathbf{r})$; 将 $U_n(\mathbf{r})$ 传播到 CCD 记录平面,得光场的复振幅分布为 $U_n(k)$;
- 2) 用 CCD 记录到的衍射斑 $I_n(k)$ 的平方根值替换 $U_n(k)$ 的模,保持 $U_n(k)$ 的相位不变,从而形成新的复值函数 $U'_n(k)$;
- 3) 将 $U'_n(k)$ 逆向传播到样品平面,得到更接近真实值的透射光场分布 $U'_n(\mathbf{r})$;
- 4) 将样品在第 n 位置处的样品和照明光的复数分布更新为

$$\begin{aligned}
 & O_{n+1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \\
 &= O_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + \frac{P(\mathbf{r})}{P_{\max}(\mathbf{r})} \frac{P^*(\mathbf{r})}{(|P(\mathbf{r})|^2 + \alpha)} \\
 & \quad \times \beta [U'_n(\mathbf{r}) - U_n(\mathbf{r})], \quad (1) \\
 & P_{n+1}(\mathbf{r}) = P_n(\mathbf{r}) + \frac{O_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)}{O_{\max(n)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \frac{O_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)}{(|O_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)|^2 + \alpha)} \\
 & \times \beta [U'_n(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - U_n(\mathbf{r}, \mathbf{R})], \quad (2)
 \end{aligned}$$

其中 α 和 β 一般取 0—1 之间的正数;

- 5) 物体移动到下一位置,与上一位置处有部分重叠.重复步骤 1) 到 4),直至得到准确的收敛结果.

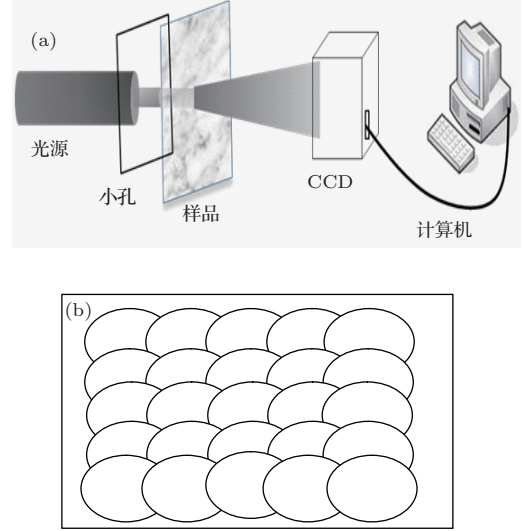


图 1 (a) PIE 成像原理; (b) 扫描过程中照明光在样品表面的相对位置分布

3 周期性结构出现的误差分析

假设 $P(\mathbf{r})$ 和 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 为照明光和样品的实际分布,样品后透射光的函数 $U_n(\mathbf{r}) = P(\mathbf{r})O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$,理想情况下 ePIE 在迭代足够多的次数后可以准确重建 $U_n(\mathbf{r})$. 但在这个迭代重建过程中, $P(\mathbf{r})$ 和 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 都是一个从不准确到准确的逐步逼近过程.若迭代到某个步骤后再再现所得照明光函数 $P'(\mathbf{r}) = \frac{P(\mathbf{r})}{J(\mathbf{r})}$,则重建所得的样品分布函数为

$$O'(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)J(\mathbf{r}). \quad (3)$$

由于计算所得的样品透射光,即上式中的 $O'(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 与 $P'(\mathbf{r})$ 的乘积等于真实透射光 $U_n(\mathbf{r}) = P(\mathbf{r})O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$,所以虽然它们和实际的分布并不相同,ePIE 算法并不能甄别,从而导致了在线误差的产生.

由于照明光的位置在样品扫描过程中保持不动,则样品移动位移 \mathbf{D} 到下一位置处时

$$O'(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \mathbf{D}) = O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \mathbf{D})J(\mathbf{r}). \quad (4)$$

对 (3) 式作变量代换 $\mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{D}$,则透射函数可

写为

$$O'(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \mathbf{D}) = O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)J(\mathbf{r} + \mathbf{D}). \quad (5)$$

比较(3)式和(5)式可得 $J(\mathbf{r}) = J(\mathbf{r} + \mathbf{D})$, 如果样品的扫描步长正好为 \mathbf{D} , 则 $J(\mathbf{r})$ 是周期为 \mathbf{D} 的函数. 此时, ePIE算法重建所得到的照明光和样品的分布函数分别为 $P(\mathbf{r})/J(\mathbf{r})$ 和 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)J(\mathbf{r})$, 由于二者的乘积和实际的透射光 $P(\mathbf{r})O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 完全一样, 继续增加迭代次数不可能将 $J(\mathbf{r})$ 消除, 所以与真实分布相比较, 重建的样品分布函数 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)J(\mathbf{r})$ 比真实值 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 多了 $J(\mathbf{r})$ 这个周期性的因子, 这是很多实验中ePIE算法的重建图像中产生周期性误差的原因^[19].

4 周期性误差的消除

从上文的分析中可以看出, 周期性误差产生的原因在于ePIE中样品每次移动的步长相同, 任何满足 $j(\mathbf{r}) = j(\mathbf{r} + \mathbf{D})$ 都可以以各种形式附加在重建结果中而不能ePIE算法所甄别. 但如果样品每次扫描的步长不完全相同, 即 $\mathbf{D}_n(n = 1, \dots, N)$ 都不完全相等, 则根据上述的分析, $J(\mathbf{r})$ 必须满足

$$\begin{aligned} J(\mathbf{r}) &= J(\mathbf{r} + \mathbf{D}_0) = J(\mathbf{r} + \mathbf{D}_0 + \mathbf{D}_1) \\ &= J(\mathbf{r} + \mathbf{D}_0 + \mathbf{D}_1 + \dots + \mathbf{D}_{N-1}) \\ &= J(\mathbf{r} + \mathbf{D}_0 + \mathbf{D}_1 + \dots + \mathbf{D}_{N-1} + \mathbf{D}_N). \end{aligned} \quad (6)$$

如果扫描过程中的步长大小和方向是完全随机的而且扫描次数很多, 则(6)式则意味着 $J(\mathbf{r})$ 是一个处处相等的均匀函数, 此时 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)J(\mathbf{r})$ 和真实分布 $O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ 仅仅相差一个常数系数, 从而可以认为重建的结果和实际分布完全一致. 由于实际实验往往需要记录数百个位置的散射斑, 如果每个位置的移动间距和方向各不相同, 周期性误差的几乎可以完全消除.

为了验证此方法, 我们将改进的方法与普通的ePIE方法利用数字模拟上进行了对比. 模拟中用两张 512×512 像素的图片分别作为样品的振幅和相位, 如图2(a)和(b)所示. 假设CCD的像素个数为 1024×1024 像素, 每个像素的宽度为10 mm, 小孔到样品以及样品到CCD的距离均为10 cm, 小孔的直径为 $600 \mu\text{m}$. 实际的照明光分布由菲涅耳传播公式将小孔传播到样品平面计算得出. 图2(c)和(d)为照明光的振幅和相位.

普通ePIE方法移动的步长为60像素, 二维方向上移动 11×11 个位置. 改进的办法中, 先产生二个 10×10 的数组, 数组中每个元素的大小为55到65之间的随机数, 一个数组作为 x 方向的扫描间隔, 另一个数组作为 y 方向的扫描间隔. 图3分别为普通ePIE方法和改进算法找照明位置的对比如. 从图中可以看出, 改进方法中照明位置不再是一个规整的周期阵列.

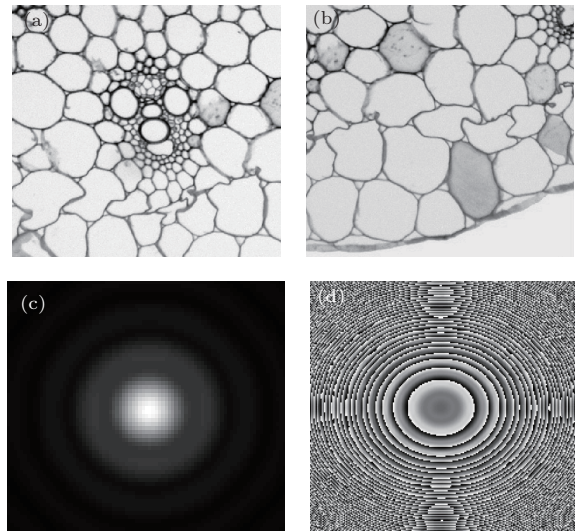


图2 (a) 模拟样品振幅图; (b) 模拟样品相位图; (c) 模拟中真实照明光振幅分布; (d) 模拟中真实照明光相位分布

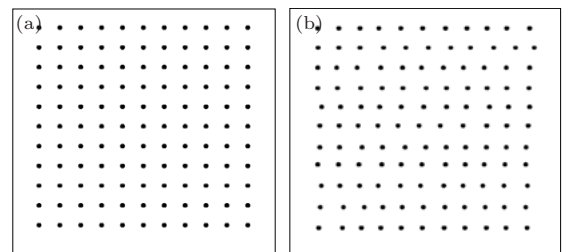


图3 (a) 普通ePIE方法的移动步伐图; (b) 改进方法的移动步伐图

为了尽量和实际的实验过程相似, 在计算照散射光斑时, 我们对计算的结果进行了取整, 以模拟CCD的数字量化过程. 经过150次迭代后, 普通ePIE算法的再现结果在图4中给出, 其中图4(a)为重建的样品振幅, 图4(b)为重建的样品相位, 从中可以看出重建相位像较为模糊, 而振幅像则有很多明显周期性的‘方格子’结构, 原图像的信息很难分辨. 图4(c)为重建的照明光振幅, 图4(d)为重建的照明光的相位, 和图2中的照明光相比较可以发现, 重建所得的照明光分布和实际照明光之间也有明显的差异.

而改进的方法重建像在图5中给出, 其中图5(a)为重建的样品振幅, 图5(b)为重建的样品相位, 图5(c)为重建的照明光振幅, 图5(d)为重建的照明光的相位. 和图2中的照明光相比较可以发现, 重建所得的分布和实际分布非常相似, 这和上文中的理论分析非常符合.

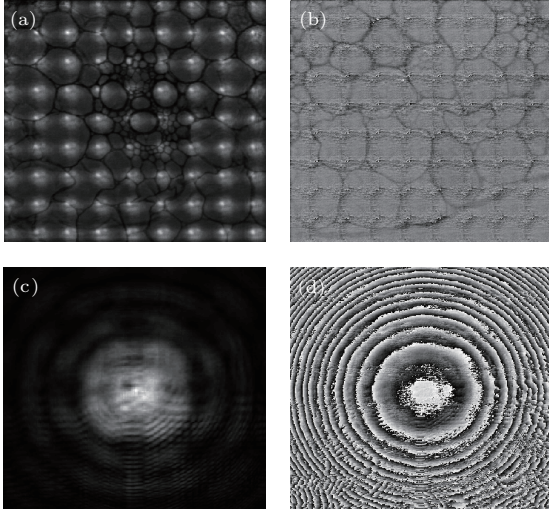


图4 普通 ePIE 算法重建的 (a) 样品振幅分布; (b) 样品相位分布; (c) 照明光振幅分布; (d) 照明光相位分布

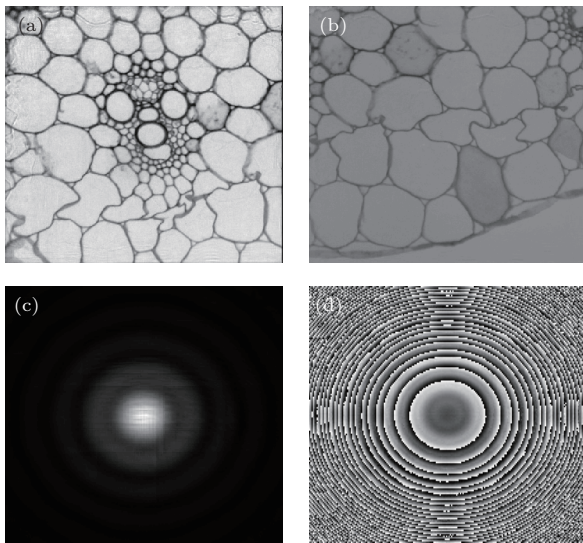


图5 改进方法重建的 (a) 样品振幅分布; (b) 样品相位分布; (c) 照明光振幅分布; (d) 照明光相位分布

为了量化衡量所提方法的优点, 我们采用下面的误差评价函数来比较是用来评价重建像质量:

$$\frac{\sum |G_k(u) - G'_k(u)|^2}{\sum |G_k(u)|^2}, \quad (7)$$

其中 $G_k(u)$ 是样品的真实复振幅分布, $G'_k(u)$ 是重建的复振幅分布. 随迭代次数增加, 普通 ePIE 与改进的 ePIE 重建像的误差值变化如图6所示, 虚线

所示为改进的方法误差曲线, 实线为普通 ePIE 误差曲线. 普通 ePIE 方法的误差值最后稳定在 57% 以上, 且随着迭代次数的增加没有明显下降的趋势, 实际上, 由于误差太大, 普通方法得到的重建像根本没有反映出样品的真实信息. 而改进的方法误差值稳定在 0.913%, 充分反映了样品及照明光的真实信息.

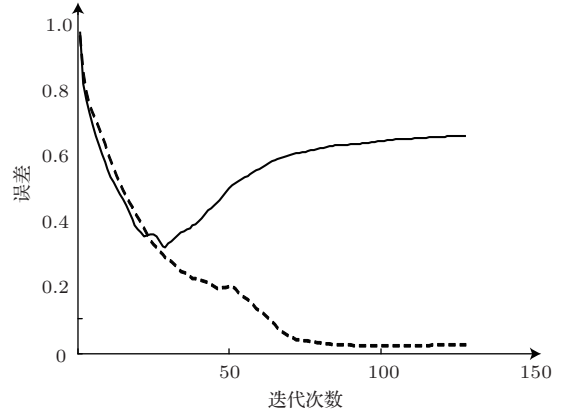


图6 两种重建方法迭代过程中的误差曲线 (虚线为改进方法的误差曲线, 实线为普通 ePIE 方法误差曲线)

5 结论和讨论

本文从数学上分析了 PIE 成像技术中周期性重建误差出现的具体原因, 指出具有和扫描步长完全相同的周期函数可以附加于再现结果中而不能被 PIE 算法所甄别, 这是产生周期性误差的根本原因. 在此基础上本文提出用变步长扫描方法打破扫描的周期性, 可以很好地去除这种周期性重建误差, 从而大幅度提高成像的精度. 在理论分析的同时本文给出了严格的数字模拟验证, 模拟结果和理论分析完全符合. 对于实际实验来说, 采用本文提出的方法将意味着, 需要在 x 和 y 两个方向上反复调整照明光的移动方向, 这要求平移台有足够小的回程误差.

参考文献

- [1] Miao J, Charalambous P, Kirz, J, Sayre D 1999 *Nature* **400** 342
- [2] Thibault P, Dierolf M, Bunk O, Menzel A, Pfeiffer F 2009 *Ultramicroscopy* **109** 338
- [3] Thibault P, Dierolf M, Menzel A, Bunk O, David C, Pfeiffer F 2008 *Science* **321** 379
- [4] Abbey B, Nugent A K, Williams G J, Clark J N, Peele A G, Pfeiffer M A, Jonge M, McNulty I 2008 *Nature Physics* **4** 394

- [5] Dierolf M, Thibault P, Menzel A, Kewish C M, Jefimovs K, Schlichting I, König K, Bunk O, Pfeiffer F 2010 *New. J. Phys.* **12** 035017
- [6] Rodenburg J M 2008 *Physics* **150** 87
- [7] Liu C, Pan X C, Zhu J Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 184204 (in Chinese)[刘诚, 潘兴臣, 朱健强 2013 物理学报 **62** 184204]
- [8] Fan J D, Jiang H D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 218702 (in Chinese)[范家东, 江怀东 2012 物理学报 **61** 218702]
- [9] Weierstall U, Chen Q, Spence J C H, Howells M R, Isaacson M, Panepucci R R 2002 *Ultramicroscopy* **90** 171
- [10] Hoppe W 1969 *Acta Cryst.* **25** 495
- [11] Fienup J R 1982 *Appl. Opt.* **21** 2758
- [12] Fienup J R 1978 *Opt. Lett.* **31** 27
- [13] Fienup J R 1987 *J. Opt. Soc. Am. A* **4** 118
- [14] Rodenburg J M, Faulkner H M L 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4795
- [15] Faulkner H M L, Rodenburg J M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 023903
- [16] Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G 2007 *Ultramicroscopy* **107** 227
- [17] Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G, Dobson B R, Pfeiffer F, Bunk O, David C, Jefimovs K, Johnson I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 034801
- [18] Humphry M J, Kraus B, Hurst A C, Maiden A M, Rodenburg J M 2012 *Nature Commun.* **3** 1733
- [19] Maiden M A, Rodenburg J M 2009 *Ultramicroscopy* **109** 1256

Study on the periodic error in ptychographic iterative engine imaging*

He Xiao-Liang¹⁾ Liu Cheng^{1)†} Wang Ji-Cheng¹⁾ Wang Yue-Ke¹⁾
Gao Shu-Mei¹⁾ Zhu Jian-Qiang²⁾

1) (Department of Photoelectric Information Science and Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

2) (Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

(Received 10 September 2013; revised manuscript received 31 October 2013)

Abstract

Based on the analysis of the periodic error in the reconstructed image of the ptychographic iterative engine (PIE), the cause in mathematics for this kind of error is found out, and then a method is proposed to eliminate it. By replacing the 2D periodic scanning of fixed step interval in common PIE imaging with the 2D raster scanning of changing step interval, the periodical error in the reconstructed images can be dramatically reduced, and then the accuracy of the PIE imaging is remarkably improved. Both the theoretical investigation and numerical simulations are presented.

Keywords: coherent diffraction imaging, phase retrieval, reconstruction error

PACS: 42.25.Fx, 42.30.Rx, 42.30.-d

DOI: 10.7498/aps.63.034208

* Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK2012548).

† Corresponding author. E-mail: cheng.liu@hotmail.co.uk