

基于软 X 射线成像菲涅耳波带片精确光学传递函数的离焦图像恢复

李法虎, 关勇, 熊瑛, 张晓波, 刘刚, 田扬超

(中国科学技术大学国家同步辐射实验室, 安徽合肥 230029)

摘要: 高分辨率软 X 射线显微成像已被广泛用于获得样品的三维结构, 然而, 焦深的受限问题导致样品投影图像离焦模糊, 严重影响图像质量. 提出了一种基于菲涅耳波带片的光学传递函数离焦图像的恢复方法. 利用这种恢复方法, 恢复了 Siemens star 测试板的离焦图像. 结果表明, 基于光学传递函数的恢复方法能够去除因离焦而造成模糊现象并且恢复由离焦引起的离焦图像. 而且, 相关的模拟说明这种方法可以真正用于解决 X 射线显微成像中焦深受限问题, 完成样品的三维成像.

关键词: 光学传递函数; X 射线显微成像; 图像恢复; 菲涅耳波带片

中图分类号: TP391 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.0253-2778.2017.11.006

引用格式: 李法虎, 关勇, 熊瑛, 等. 基于软 X 射线成像菲涅耳波带片精确光学传递函数的离焦图像恢复[J]. 中国科学技术大学学报, 2017, 47(11): 918-923.

LI Fahu, GUAN Yong, XIONG Ying, et al. Defocus image restoration by an accurate optical transfer function of Fresnel zone plate in soft X-ray microscopy [J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2017, 47(11): 918-923.

Defocused image restoration by an accurate optical transfer function of Fresnel zone plate in soft X-ray microscopy

LI Fahu, GUAN Yong, XIONG Ying, ZHANG Xiaobo, LIU Gang, TIAN Yangchao

(National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230029, China)

Abstract: High-resolution soft X-ray microscopy has been widely adopted for obtaining the three-dimensional structure of physical objects. However, the limited depth of focus may cause sample defocusing and, subsequently, lead to blurring of images. A defocused image restoration method was proposed based on an optical transfer function (OTF) of a Fresnel zone plate (FZP). Using this restoration method the defocused image of Siemens star was restored. The results show that the restoration method based on OTF is capable of suppressing the blurring effect and restore defocus images caused by defocusing of the object. Furthermore, related simulations have been carried out to demonstrate the effectiveness of this method in overcoming the limitations to focal depth and accomplishing three dimensional imaging of samples.

Key words: optical transfer function; X-ray microscopy; image restoration; Fresnel zone plate

收稿日期: 2017-03-31; 修回日期: 2017-05-26

基金项目: 国家自然科学基金(11475175, 11405175, 11275204), 国家重点研发计划(2016YFA0400902)资助.

作者简介: 李法虎, 男, 1988 年生, 博士. 研究方向: 加速器物理. E-mail: lifahu@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 关勇, 博士/工程师. E-mail: yongg@ustc.edu.cn

0 引言

高分辨率软 X 射线显微镜(X-ray microscopy, XRM)作为重要的实验工具已被应用于许多研究领域,包括生物学^[1,2],材料科学^[3,4]和环境研究^[5].然而,由于焦深(depth of focus, DOF)的受限问题^[6,7],高分辨率 X 射线显微镜^[8]不适合大尺度样品的显微成像.当采集不同角度一系列投影时,如果样本的尺寸大于焦深,则会在某些投影角度下部分样品将在焦深之外,这将会导致图像模糊,从而进一步影响图像三维重建的质量.因此,发展一种图像处理算法来解决投影图像离焦问题,以获得高质量的 3D 重建图像是非常重要的^[9,10].

当前,人们已提出图像融合^[6,7]和光学传递函数(optical transfer function, OTF)去卷积^[11-14]等方法来恢复离焦图像.通过对对象进行过采样,图像融合方法可以从图像堆栈中提取各个投影清晰部分以获得清晰的图像^[7,8].但这就意味着图像融合方法需要更多的曝光时间来获得一系列过采样投影.而基于 OTF 的去卷积图像恢复方法不需要图像堆栈,只需要知道离焦图像和样品的离焦距离.如何获得准确的 OTF 是基于 OTF 去卷积图像恢复方法中的关键步骤.有两种来获得用于恢复离焦图像的 OTF 的方法.一个是基于实验数据来获得^[12-17].该方法可以获得良好的特定成像系统的 OTF.但在这种情况下,OTF 依赖于实验测量的精度,并且需要一幅精确在焦图像作为基准平面.然而,由于实际实验条件的限制,这种方法的精度大小往往取决实验是否准确.另一种方法通过公式计算获得 OTF,是将 FZP(Fresnel zone plate)考虑为光学圆形透镜,并且可以基于光学透镜的光瞳函数获得 FZP 的 OTF,将 FZP 的 OTF 近似为光学透镜的 OTF^[18].当样品离焦时,FZP 显示与透镜成像相比类似的成像性质.因此,模拟 OTF 可以用于去除离焦图像中的模糊现象.然而,近似的 OTF 不能真实反映作为 FZP 作为成像元件的特性.

本文使用基于 FZP 的精确 OTF 来恢复离焦的软 X 射线显微成像图像.本文中的 FZP 的 OTF 通过公式计算获得,因此可以获得任意位置的 OTF. OTF 在中高频和非零频率下具有低透过率,非零频的数值随着离焦距离的增加而迅速衰减,这与 FZP 的成像性能符合.为了验证恢复方法的有效性,给出了模拟仿真和实验分析,结果证明了基于 FZP 的

OTF 的离焦恢复方法对于恢复离焦 X 射线投影和图像 3D 重建是有效和可靠的,并提出了按照离焦距离区域分割方法,很好地解决了样品不在同一焦面的问题,突破了软 X 射线成像焦深的限制.

1 原理

基于 OTF 的去卷积恢复方法的流程图如图 1 所示.首先,根据去噪算法去除原图像的噪声.然后,通过傅里叶变换获得去噪图像的傅里叶频谱.另一方面,根据 FZP 的参数,可以计算 FZP 的 OTF.然后我们通过将图像的傅里叶频谱与计算出的 OTF 进行傅里叶频域的去卷积得到恢复图像的傅里叶频谱.最后,使用反傅里叶变换来恢复去卷积后的图像.

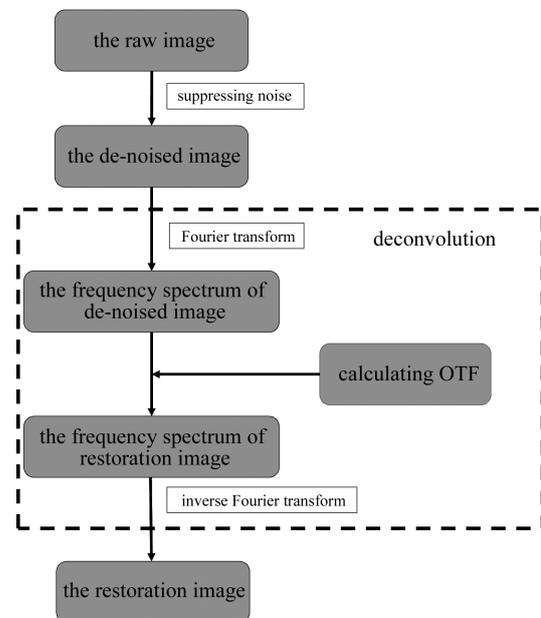


图 1 基于 OTF 的去卷积的恢复过程

Fig.1 The restoration procedure of the OTF-based deconvolution

在理论上,OTF 是成像系统中建立输入和输出之间的关系中较容易的方法,对于线性光学系统尤其重要.OTF 可用于描述 X 射线成像系统在频域中的光学系统的物理性质^[19,20].因此,图像恢复过程中的关键点在于计算的 OTF 的精度,其将决定恢复结果的恢复质量. FZP 是 X 射线显微镜中的关键光学元件,由在平坦透明基板上的中心沿径向向交替出现的离散的不透明和透明圆环组成^[5]. FZP 的透过函数 $P(\xi, \eta)$ 定义如下:

$$P(\xi, \eta) = \begin{cases} 1, & \rho_{2k} < r \leq \rho_{2k-1}; \\ 0, & \rho_{2k-1} < r \leq \rho_{2k}. \end{cases} \quad (1)$$

式中, $k=1, 2, 3, \dots$. $r = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$ 是波带片的半径, $\rho_k = \sqrt{k\lambda f}$ 是第 k 项半波带的半径, ρ_k 是由光源的

波长 λ 和焦距 f 所决定. X 射线显微成像系统的 OTF 是 FZP 的相干传递函数的自相关运算. 根据波带片的特性和其透过函数 $P(\xi, \eta)$ 可以获得 FZP 的相干传递函数 $H_p(f_x, f_y)$.

当样品处在离焦位置时, 在真实成像平面和理想成像平面之间将存在一定的像差. 为了获得离焦 OTF, 需要将波前像差引入到相干传递函数 $H_p(f_x, f_y)$ 中. 波前像差是理想参考球面与实际参考球面之间的光程差 $W(\xi, \eta)$, 其公式是

$$W(\xi, \eta) = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{d'_i} - \frac{1}{d_i} \right) \cdot (\xi^2 + \eta^2) = \frac{\omega(\xi^2 + \eta^2)}{(\lambda d_i f_0)^2} \quad (2)$$

式中, d_i 表示从 FZP 到在焦平面的距离, d'_i 是 FZP 和离焦平面之间的距离, $\omega = \frac{1}{8} \left(\frac{1}{d'_i} - \frac{1}{d_i} \right) l^2$ 是最大光程差, $f_0 = \frac{l}{2\lambda d_i}$ 是成像系统的相干截止频率^[19].

离焦的 OTF 可以通过具有像差的相干传递函数来计算. 具有像差的 FZP 相干传递函数相位含有光程差, 定义如下:

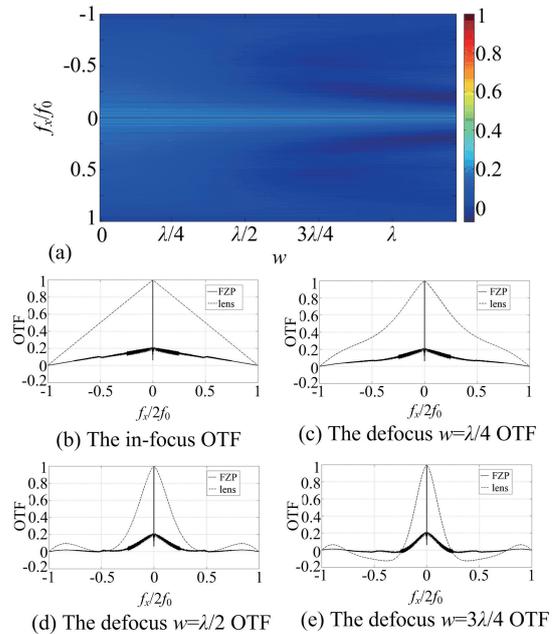
$$H_{pw}(f_x, f_y) = H_p(f_x, f_y) \exp[jk W(\lambda d_i f_x, \lambda d_i f_y)] \quad (3)$$

因此, 波带片的 OTF 计算如下:

$$H_{\text{otf}}(f_x, f_y) = \frac{H_{pw}(f_x, f_y) \star H_{pw}(f_x, f_y)}{\iint_{-\infty}^{+\infty} P_{pw}(\xi, \eta) d\xi d\eta} \quad (4)$$

式中, \star 表示自相关的计算, 相干传递函数 $H_{pw}(f_x, f_y) = P_{pw}(\lambda d_i f_x, \lambda d_i f_y)$. 根据 FZP 的参数, 如图 2 所示计算各位置处的 FZP 的 OTF. 通过函数计算获得的 OTF 与 X 射线成像系统的参数相关, 不受系统噪声干扰.

图 2(a) 展现了 FZP 的 OTF 与离焦距离之间的关系. 图 2(b), (c) 给出了 OTF 曲线的变化趋势. 随着距离的增加, OTF 曲线逐渐接近中轴, OTF 在非零频的数值急剧衰减. 当离焦距离增加到 $\lambda/2$ (也就是 DOF) 时, OTF 开始出现零点, 如图 2(d) 所示. 当离焦距离大于 $\lambda/2$ (DOF) 时, OTF 出现负值, 如图 2(e) 所示. OTF 的变化趋势可以反映 X 射线成像系统的成像特性. 例如, 当样本和 FZP 之间的距离稍大于 DOF 时, 图像开始模糊. 当离焦距离进一步增加时, 图像显示出对比度反转, 这与 OTF 的变



(a) 在各个位置处的 FZP 的 OTF 曲线, w 表示最大光程差; (b) FZP 和透镜在焦的 OTF; (c) FZP 和透镜在光程差 $w = \lambda/4$ 的 OTF; (d) FZP 和透镜在光程差 $w = \lambda/2$ 的 OTF; (e) FZP 和透镜在光程差 $w = 3\lambda/4$ 的 OTF

图 2 菲涅尔波带片的光学传递函数

Fig.2 Optical transfer function of Fresnel zone plate

化趋势一致. 因此, 可以应用在不同位置处的 OTF 以恢复 X 射线显微成像图像.

不同于传统的光学透镜, FZP 是离散衍射元件. 基于参考文献[19]给出的透镜 OTF 的模拟方法, 光学透镜的 OTF 如图 2 所示. 可以发现, FZP 和透镜的 OTF 是不同的. 除了零频分量之外, 振幅型 FZP 的 OTF 值远小于理想光学透镜的, 如图 2 所示值. 这意味着中高频的 FZP 的 OTF 的透射率低于光学透镜的 OTF. FZP 的特性会导致 X 射线成像系统中图像对比度的降低^[9]. OTF 的中高频率中的低透射特性与 FZP 成像中对比度降低特性相符合. 在图像去卷积恢复过程中, 准确的 OTF 可以提取更多投影傅里叶频谱的中高频信息, 提高图像衬度.

FZP 的 OTF 的特性与利用 FZP 软 X 射线成像的特性相符合, 随着距离的增加, 非零频 OTF 的数值减小, 使用 OTF 恢复对应距离的图像, 可以去除模糊, 使图像变得清晰. 由于波带片的特性, 波带片成像中会使图像的对比度下降, 本文中的 OTF 具有低中高频透过率, 在恢复过程中可以使图像对比度提高. 通过对各个投影角度下的离焦图像进行恢复, 得到清晰的在焦图像, 然后基于投影图像的三维重构结果也完全在焦清晰, 这就表明 OTF 的图

像恢复算法真正克服了软 X 射线焦深受限问题。

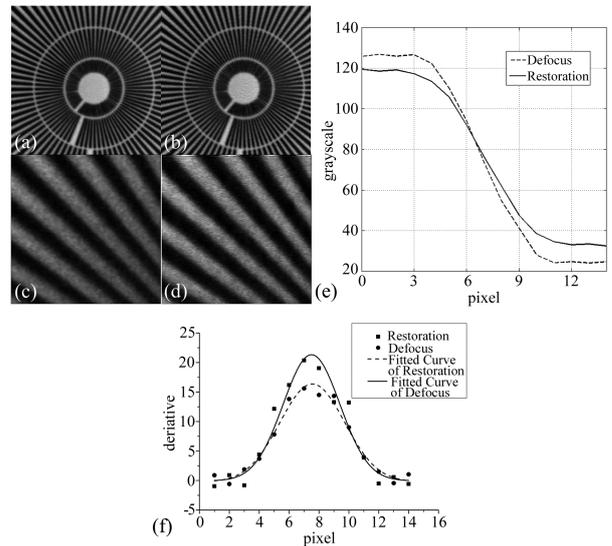
2 实验和模拟

为了验证基于 OTF 的图像恢复算法的有效性,本文中给出了实验分析和仿真模拟.实验中使用 Siemens star 测试板作为测试样品.实验数据是在国家同步辐射实验室的光束线软 X 射线成像站采集的.X 射线通过椭圆毛细管聚焦镜聚焦在样品上.然后经过最外环宽度为 40nm 的振幅菲涅耳波带片物镜在 CCD 上得到样品的放大图像.本文在光子能量为 520eV (DOF 为 2.684 μm) 下采集 Siemens star 的在焦图像.然后移动波带片,得到不同离焦距离的 2D 投影图,并利用本文提出的恢复方法进行了离焦图像恢复.此外,我们模拟了有一定厚度样品离焦图像的恢复,结果表明恢复方法可以真正地用于解决实际三维成像中的焦深受限问题。

2.1 离焦恢复

图 3 是具有 5 μm 离焦距离的图像的恢复结果.可以看出,具有 5 μm 离焦距离的辐条靶的边界模糊,如图 3(a)所示.通过图像恢复方法恢复的图像有清楚的边界,如图 3(b)所示.从它们的局部放大图中可以明显可以看出其边界的模糊程度,恢复后的图像的边界比原始图像的边界更加清晰,如图 3(c)和(d)所示.两幅图像直边响应函数的曲线图 3(e)所示.为了进一步评估图像恢复的效果,我们采用了离焦图像和离焦恢复后图像直边响应函数的导数曲线表现形式,如图 3(e)所示.导数的半高全宽 (FWHM) 为图像恢复的性能提供了更直接的证据。

离焦图像的拟合曲线的计算 FWHM 为 86.8nm.恢复图像的拟合曲线的 FWHM 为 76.2nm,并且非常接近于在焦图像的 FWHM.表 1 中展现了离焦图像和其恢复图像的拟合曲线的 FWHM,可以看出当距离小于 5 μm 时,离焦图片可以恢复到接近于在焦图片,而当离焦距离为 6 μm 时,恢复图像的 FWHM 较大,没有很好地恢复离焦图像.因此,我们的方法可以完全恢复不大于 5 μm 离焦距离的图像,并且恢复结果非常理想。



(a) 辐条靶的离焦距离为 5 μm 的 X 射线图像; (b) 通过 OTF 的去卷积的恢复图像; (c) 辐条靶的离焦 X 射线图像局部放大图; (d) 辐条靶的恢复后 X 射线图像局部放大图; (e) 两个图像的直边响应函数; (f) 两个直边响应函数的导数及其导数的拟合曲线

图 3 5 μm 离焦距离图像恢复

Fig.3 The restoration of image with 5 μm defocus distance

表 1 离焦图像和其恢复图像的 FWHM

	在焦	defocus			restoration		
		3 μm	5 μm	6 μm	3 μm	5 μm	6 μm
FWHM	75.6nm	83.3nm	86.8nm	92.0nm	75.9nm	76.2nm	81.3nm

2.2 模拟

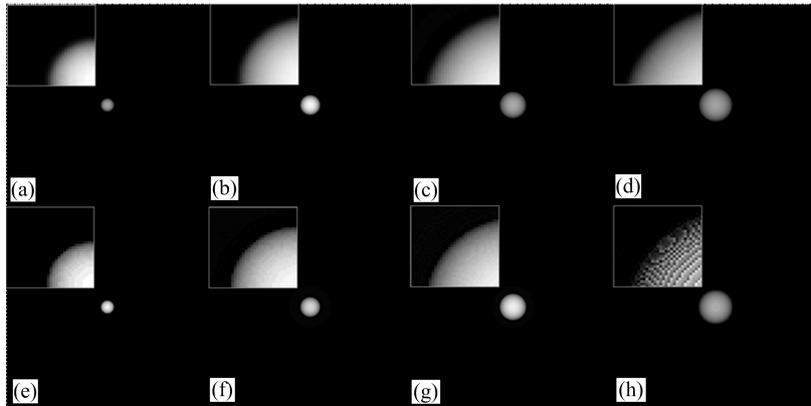
此外,恢复方法可以真正地用于克服对三维成像的限制.为了证明这一点,给出了相关的模拟.我们使用一些不同厚度的球体来模拟.这些球体的离焦位置 3.5 μm 的投影图像及其恢复图像如图 4 所示.我们可以看到,具有一定厚度的球体的离焦图像可以很好地恢复.然而,当球体的厚度大于 2 μm 时,恢复图像开始出现一些噪声点,如图 4(h)所示.这是因为样本的每个片层根据其 OTF 卷积叠加成投影图像,对应于不同片层的光学传递函数(OTF)不

同,样品的厚度的增加可以导致用于不同片层的 OTF 的差异逐渐变大.因此,使用 OTF 对样品的离焦投影图像进行离焦恢复时,样品的尺寸不能超过一定的厚度.本文提出的基于 OTF 的方法可以恢复厚度小于 2 μm 的物体。

此外,我们模拟了不同距离的多个物体的样品的恢复,以验证提出的方法.图 5 显示了恢复的过程.按照样品的不同离焦距离将多个物体的投影图像分割为不同的区域.然后,使用对应的离焦距离 OTF 来恢复对应的不同区域用于获得该

区域的在焦投影图像.最后,将对焦的不同区域组合以获得全聚焦投影图像.当每个角度的投影

图像在焦时,基于这些投影的 3D 重建将是在焦清晰的.



(a)1μm 厚度球体的离焦投影图像;(b)1.5μm 厚度球体的离焦投影图像;(c)2μm 厚度球体的离焦投影图像;(d)2.5μm 厚度球体的离焦投影图像;(e)1μm 厚度球体的恢复图像;(f)1.5μm 厚度球体的恢复图像;(g)2μm 厚度球体的恢复图像;(h)2.5μm 厚度球体的恢复图像

图 4 不同厚度球体的离焦 3.5μm 投影图像及其恢复图像

Fig.4 The defocus 3.5μm projection images of different thickness spheres and their restoration images

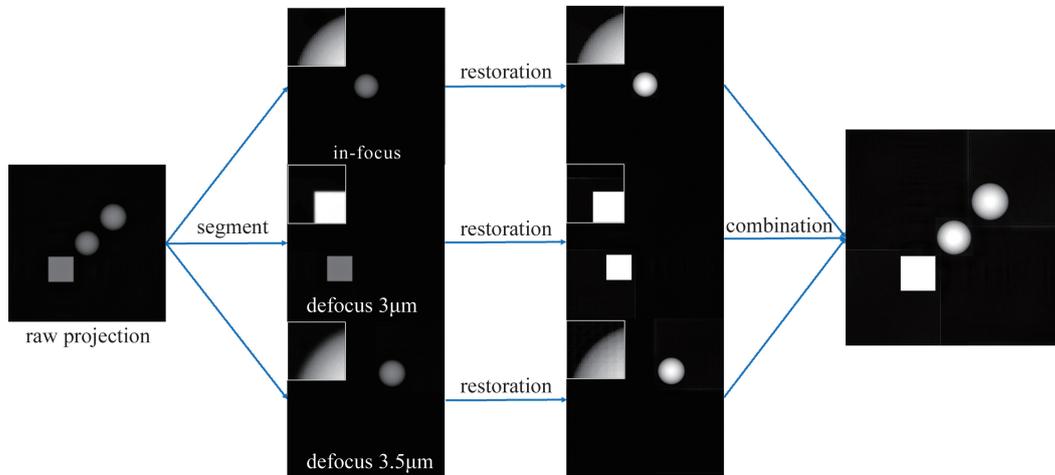
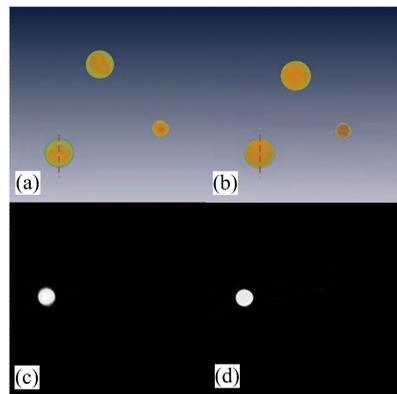


图 5 多个样品的恢复流程图

Fig.5 The flow chart of restoration for the multiple objects

对于 CT 成像的情况,我们使用具有不同离焦距离的 3 个球体进行模拟.投影数据是在光子能量为 520eV,在 0°~179°上以 1°的步长的情况下采集的.图 6(a)所示为基于离焦投影图像的 3D 重建.可以看出,基于离焦投影图像 3D 重建是离焦的.根据图 6 所示的区域分割方法,在每个角度下离焦图像中应用恢复方法以获得在焦投影.当 180 个离焦投影图像被恢复时,可以获得新的 3D CT 重建数据,如图 6(b)所示.与球体的离焦 CT 重建数据的一个切片(图 6(c))相比,恢复的切片(图 6(d))更清晰和在焦.因此,我们提出的方法可以克服三维成像焦深的限制,可以应用于 X 射线显微镜的三维 CT 重建.



(a)离焦投影的三维重建数据;(b)恢复投影的 3D 重建数据;(c)3D 重建数据(a)的一个片层;(d)3D 重建数据(b)的一个片层

图 6 投影数据的三维重建

Fig.6 3D reconstruction of projection data

3 结论

本文提出了一种基于 FZP 的精确 OTF 的图像恢复方法,以恢复离焦图像并提高 X 射线图像的对比度. FZP 的 OTF 在中高频下具有低透射特性,并且不同于常规光学透镜的 OTF. 基于 FZP 参数计算 FZP 的 OTF,而不是简单地由常规光学透镜的 OTF 代替. 这可以确保 X 射线图像恢复的准确性. 实验结果表明,该恢复方法可以完全恢复小于 $5\mu\text{m}$ 离焦距离的图像,并且可以用于提高 X 射线图像的对比度. 此外,提出根据离焦距离划分区域的算法,模拟结果说明,恢复方法可以用于克服软 X 射线成像中焦深受限问题. 基于波带片的 OTF 恢复算法可以对大尺寸样品进行清晰 3D 成像,解决焦深受限的问题,拓展了软 X 射线成像应用范围,同时对于计算大样品的精确的线性吸收系数具有重要意义. 本工作局限是只是适合于离散型的样品的离焦恢复,在以后的工作中可以开展对非离散型样品的离焦恢复的研究.

参考文献(References)

- [1] ANDREWS J C, ALMEIDA E, VAN DER MEULEN M C, et al. Nanoscale X-ray microscopic imaging of mammalian mineralized tissue [J]. *Microsc Microanal*, 2010, 16(3): 327-336.
- [2] ZHANG K, LI D E, HONG Y L, et al. Penetrating view of nano-structures in *Aleochara verna* spermatheca and flagellum by hard X-ray microscopy [J]. *Chinese Physics B*, 2013, 22(7): 076801.
- [3] MEIRER F, CABANA J, LIU Y, et al. Three-dimensional imaging of chemical phase transformations at the nanoscale with full-field transmission X-ray microscopy [J]. *J Synchrotron Radiat*, 2011, 18(5): 773-781.
- [4] GUO P F, GUAN Y, LIU G, et al. Modeling of gas transport with electrochemical reaction in nickel-yttria-stabilized zirconia anode during thermal cycling by Lattice Boltzmann method [J]. *Journal of Power Sources*, 2016, 327: 127-134.
- [5] NELSON G J, HARRIS W M, IZZO J R, et al. Three-dimensional mapping of nickel oxidation states using full field X-ray absorption near edge structure nanotomography [J]. *Applied Physics Letter*, 2011, 98(17): 173109.
- [6] LIU Y J, WANG J Y, HONG Y L, et al. Extended depth of focus for transmission X-ray microscope [J]. *Optics Letter*, 2012, 37(17): 3708-3710.
- [7] SELIN M, FOGELQVIST E, WERNER S, et al. Tomographic reconstruction in soft X-ray microscopy using focus-stack back-projection [J]. *Optics Letter*, 2015, 40(10): 2201-2204.
- [8] SAKDINAWAT A, ATTWOOD D. Nanoscale X-ray imaging [J]. *Nature Photonics*, 2010, 4(12): 840-848.
- [9] SIMPSON M J, MICHETTE A G. The effects of manufacturing inaccuracies on the imaging properties of Fresnel zone plates [J]. *Optics Acta*, 1983, 30(10): 1455-1462.
- [10] XIE Z L, QI B, MA H T, et al. Optical transfer function reconstruction in incoherent Fourier ptychography [J]. *Chinese Physics Letter*, 2016, 33(4): 044206.
- [11] PENG Y, GAN X T, JU P, et al. Measuring topological charges of optical vortices with multi-singularity using a cylindrical lens [J]. *Chinese Physics Letter*, 2015, 32(2): 024201.
- [12] LEHR J, SIBARITA J B, CHASSERY J M. Image restoration in X-ray microscopy: PSF determination and biological applications [J]. *IEEE Trans Image Process*, 1998, 7(2): 258-263.
- [13] JACOBSEN C, WILLIAMS S, ANDERSON E, et al. Diffraction-limited imaging in a scanning transmission X-ray microscope [J]. *Optics Communications*, 1991, 86(3-4): 351-364.
- [14] KOCH A, RAVEN C, SPANNE P, et al. X-ray imaging with submicrometer resolution employing transparent luminescent screens [J]. *Journal of Optics Society America A*, 1998, 15(7): 1940-1951.
- [15] BURGE R E, YUAN X C, MORRISON G R, et al. Incoherent imaging with the soft X-ray microscope [J]. *Ultramicroscopy*, 2000, 83(1-2): 75-92.
- [16] STAMPANONI M, BORCHERT G, WYSS P, et al. High resolution X-ray detector for synchrotron-based microtomography [J]. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A*, 2002, 491(1-2): 291-301.
- [17] OTON J, SORZANO C O, MARABINI R, et al. Measurement of the modulation transfer function of an X-ray microscope based on multiple Fourier orders analysis of a Siemens star [J]. *Optics Express*, 2015, 23(8): 9567-9572.
- [18] SIBARITA J B, CHASSERY J M, ROBERTNICOU M. Image restoration applied to X-ray microscopy: Application to images with low signal to noise ratio [J]. *Optical and Imaging Techniques in Biomedicine*, 1995, 2329: 337-347.
- [19] GOODMAN J W. *Introduction to Fourier Optics* [M]. 3rd ed. Texas: Roberts and Company Publishers, 1996: 19-22.
- [20] STOKSETH P A. Properties of a defocused optical system [J]. *Journal of the Optical Society of America*, 1969, 59(10): 1314-1321.