

Исследование устойчивости алгоритма восстановления фазы к отсутствующей информации в центре детектора в случае когерентного рассеяния на упорядоченной структуре

В.А.Уклеев¹

¹ Лаборатория нейтронного рассеяния и визуализации (LNS), Институт Пола Шеррера (PSI), CH-5232 Виллиген, Швейцария

Аннотация

Гибридный алгоритм ввода-вывода – численный метод восстановления фазы, позволяющий решать задачи когерентной рентгеновской дифракционной микроскопии для получения изображения микро- и нанообъектов в реальном пространстве из картины дифракции рентгеновских лучей без использования фокусирующей оптики. В данной работе исследована применимость данного алгоритма для случая отсутствующей информации в центре дифракционной картины, что является частой проблемой в задачах малоуглового рассеяния. Мы рассмотрели частный случай рассеяния от упорядоченной структуры и провели качественное и количественное описание восстановления изображения при расширении области затенения детектора. Было показано, что с увеличением числа затенённых пикселей разрешение восстановленной картины уменьшается, точные позиции дефектов в упорядоченной структуре и форма частиц могут быть искажены или потеряны.

Ключевые слова: когерентная дифракционная микроскопия, алгоритм восстановления фазы, малоугловое рассеяние.

Цитирование: Уклеев, В.А. Исследование устойчивости алгоритма восстановления фазы к отсутствующей информации в центре детектора в случае когерентного рассеяния на упорядоченной структуре / В.А. Уклеев // Компьютерная оптика. – 2019. – Т. 43, № 6. – С. 1088-1092. – DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-6-1088-1092.

Введение

Когерентная рентгеновская дифракционная микроскопия (КРДМ) – универсальный и мощный метод рентгеновской микроскопии низкого разрешения, разработанный для визуализации некристаллических и упорядоченных образцов на нано- и микро-масштабах [1–4]. Для восстановления комплексной волновой функции рассеянного излучения и дальнейшего получения изображения в реальном пространстве из интенсивности дифракции часто используется один из самых простых и эффективных алгоритмов – гибридный алгоритм ввода-вывода (*hybrid input-output*, НЮ), разработанный Финапом [5]. При восстановлении фазы при помощи НЮ используется только измеренное двумерное распределение интенсивности дифракционной картины и приближительная оценка формы и размеров образца [6]. Если форма и размеры образца неизвестны, но область когерентности рентгеновского пучка превышает размер образца как минимум в два раза, решение фазовой проблемы возможно при помощи алгоритма компактной свёртки, который позволяет последовательно восстановить форму образца из двумерной автокорреляционной функции (также известной как функция Паттерсона) [6].

Частой проблемой в экспериментах по КРДМ в трансмиссионной геометрии является отсутствие нескольких начальных гармоник дифракции в центре позиционно-чувствительного детектора (ПЧД). Это происходит из-за необходимости защиты центральных пикселей матрицы ПЧД от прямого пучка рентгеновского излучения. Отсутствующие Фурье-гармоники, закрытые бимстопом, значительно искажают восстановленное изображение в реальном про-

странстве при итерационном восстановлении фазы в экспериментах по КРДМ, Брэгговской КРДМ и птихографии [7–10].

Несмотря на то, что проблема отсутствия информации из центральных пикселей была детально проанализирована в работах [7–9, 11], влияние тени от бимстопа в задаче КРДМ для упорядоченной структуры может заметно отличаться от примеров, рассмотренных в предыдущих исследованиях, благодаря изолированности значительной части интенсивности рассеяния в области дифракционных пиков. Эта частная задача актуальна, например, для исследования ансамблей самоорганизующихся объектов, наноструктур, топологических магнитных решёток и других упорядоченных систем.

Основная часть

Мы провели численное моделирование для оценки устойчивости НЮ для восстановления фазы в эксперименте малоугловой КРДМ в трансмиссионной геометрии. Алгоритм НЮ включает в себя параметр β для обратной связи между исходным изображением $\rho(r)$ на основе желаемого изменения выходного изображения $\rho'(r)$:

$$\rho^{(i+1)}(r) = \begin{cases} \rho^{(i+1)}(r), & r \in S, \\ \rho^{(i)}(r) - \beta \rho^{(i)}(r), & r \notin S, \end{cases}$$

где S обозначает множество точек, где $\rho(r)$ выходит за пределы, ограниченные краем образца и, следовательно, требует изменений.

В качестве оригинального изображения была выбрана микрофотография массива самоорганизованного монослоя магнитных наночастиц, снятая при помощи

сканирующего электронного микроскопа (рис. 1а). Размер исходного изображения и его Фурье-образа составляет 650×650 пикселей. Изображению была придана несимметричная форма, состоящая из трёх пересекающихся кругов, для исключения эквивалентных решений и лучшей стабилизации алгоритма. В качестве входных данных НЮ были использованы матрицы с абсолютным значением Фурье-образа исходного изображения с добавленным к нему шумом, по амплитуде сравнимым со структурными пиками второго порядка ($\sim 1/3$ интенсивности пиков первого порядка, отношение сигнал/шум $\text{SNR} = 3,54$), а также изображение

формы объекта и параметр обратной связи $\beta = 0,9$. Мы не использовали критерии неотрицательности и вещественности возможных решений.

Алгоритм сходится к локальным минимумам после 200 итераций. После 100 индивидуальных попыток результирующие восстановленные изображения усреднялись. В первую очередь, исходное изображение было восстановлено из картины дифракции, не содержащей затенённых пикселей. Далее мы последовательно удаляли информацию из центра детектора в радиусах $R = 10; 20; 30; 40; 50$ пикселей (рис. 1е).

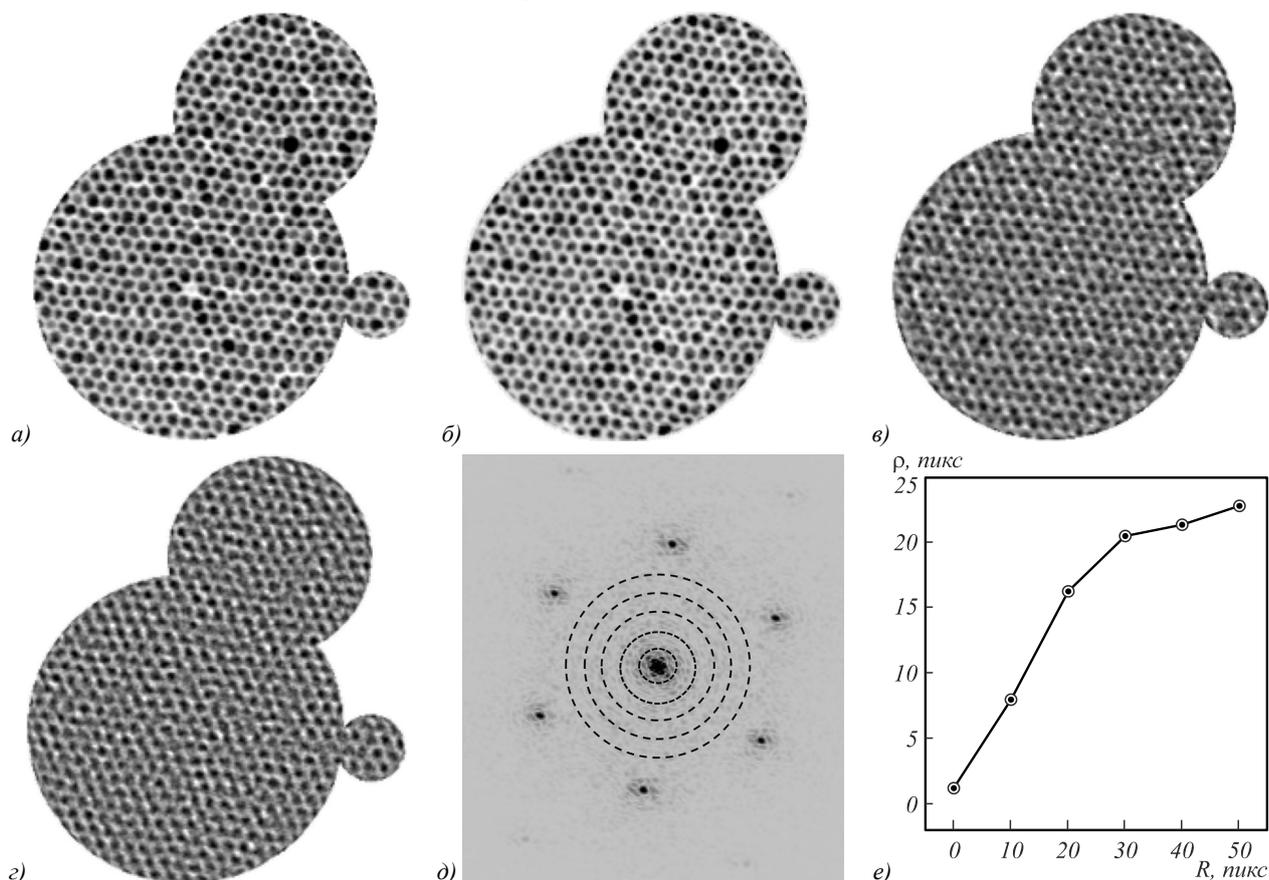


Рис. 1. Численное исследование эффективности алгоритма восстановления фазы НЮ: исходное изображение 650×650 пикселей (а); изображения, восстановленные с помощью НЮ из абсолютного значения Фурье-образа с отсутствующими начальными гармониками в центральном круге с радиусом $R=0$ (б); $R=20$ (в); $R=50$ пикселей (г); Фурье-образ исходного изображения (а) (пунктирными линиями обозначены границы круга с удаляемой информацией) (д); функция разрешения в реальном пространстве в зависимости от радиуса круга R (е)

Ансамбль наночастиц на исходном изображении упакован в двумерную гексагональную решётку. Соответственно, Фурье-образ изображения содержит в себе следующую информацию: структурный фактор (набор из шести дифракционных пиков, симметрично расположенных вокруг центра детектора), форм-фактор каждой наночастицы и форм-фактор образца в целом. Форма пиков также является результатом интерференции структурного фактора рассеяния и форм-фактора образца, для восстановления которого из двумерной автокорреляционной функции достаточно одного такого пика [3, 6].

В случае, когда все пиксели в центре Фурье-образа не затенены, исходное изображение восста-

навливается полностью (рис. 1б). Кроме того, полное восстановление изображения возможно при удалении из центра картины круга с радиусом до 4 пикселей. При увеличении радиуса R информация о форме и размерах индивидуальных наночастиц и точном расположении дефектов теряется. В экстремальном случае, при удалении пикселей в окружности $R=50$ пикселей, то есть всей информации в пределах пиков первого порядка, частичное восстановление информации об объекте всё ещё возможно. Тип решётки и координаты частиц, за исключением дефектов упаковки, определяются с высокой точностью (рис. 1в, г). Качественно данный результат можно объяснить следующим образом. В кинематическом

приближении амплитуда интенсивности когерентного рассеяния от упорядоченной структуры является свёрткой структурного фактора решётки, форм-фактора частиц (Фурье-образ единичного пятна) и форм-фактора апертуры (Фурье-образ формы объекта, в данном случае – асимметричной маски). В плоскости образца функция распределения электронной плотности для идеальной периодической структуры дана в виде $v(\mathbf{r}) = \sum_n \delta_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$, где \mathbf{R}_n – координаты частиц в решётке. Фурье-образ этой функции $\rho(\mathbf{q}) = \sum_n \delta_n(\mathbf{q} - \mathbf{q}_n)$ определяет вектора обратной решётки \mathbf{q}_n и положения дифракционных пиков соответственно. Тогда амплитуда функции рассеяния A_m выражается в следующем виде: $A(\mathbf{q}) = \sum_n \Phi(\mathbf{q}_n) S(\mathbf{q}) v(\mathbf{q}) = \sum_n \Phi(\mathbf{q}_n) S(\mathbf{q} - \mathbf{q}_n)$, где $\Phi(\mathbf{q}_n)$ – форм-фактор одной частицы, $S(\mathbf{q})$ – Фурье-образ формы образца. Таким образом, форм-фактор $\Phi(\mathbf{q}_n)$ только модулирует структурные пики и представлен только в некоторых точках Фурье пространства, определённых структурным фактором. Обратное Фурье-преобразование даже затенённой картины рассеяния возвращает координаты частиц в решётке, если она содержит дифракционные пики $\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_n)$. Пики модулируются высокочастотной функцией формы объекта в Фурье-пространстве $S(\mathbf{q})$ и медленно меняющимся форм-фактором частиц – в нашем численном эксперименте средний размер частиц на изображении составляет 13 пикселей с разбросом ± 6 пикселей, тогда как диаметр апертуры – 330 пикселей. В симуляции использовалась область обратного пространства, включающая в себя только структурные пики первого порядка. Таким образом, для восстановления изображения формы частиц необходимо измерение структурных пиков высших порядков, модулированных форм-фактором. Можно заключить, что форма частиц, полученная на изображениях (рис. 1в, з), является не следствием формы реальных объектов, а пределом разрешения эксперимента. Данный эффект ранее наблюдался в эксперименте по КРДМ магнитных вихрей в тонкой пластине кирального магнетика [10] и наночастиц в фотонном кристалле [11–13].

Для подведения количественного анализа мы провели круговой корреляционный Фурье-анализ (*Fourier ring correlation, FRC*) [14]. В данном случае FRC вычислялась как кросскорреляционная функция между исходным и восстановленными изображениями.

В качестве критерия отсечки FRC, определяющего разрешение для восстановленного изображения, было выбрано консервативное пороговое значение 1/2. Разрешение определяется точкой, в которой кросс-корреляционная функция необратимо пересекается с пороговым значением. В результате анализа функций FRC мы получили, что при увеличении радиуса тени бимстопа разрешения с 10 до 50 пикселей в обратном пространстве разрешение восстановленного изображения падает с $\rho = 8$ до $\rho = 23$ пикселей в реальном пространстве (рис. 1е). В данном случае значение $\rho = 13$ пикселей соответствует диаметру одной наночастицы на исходной картинке, то есть информация о свойствах индивидуальных объектов теряется уже при $R = 10$ пикселей. Тем не менее положение наночастиц в решётке определяется с высокой точностью даже в случае удаления всех пикселей между пиками первого порядка.

Для качественного сравнения подобный анализ был проведён для другого метода восстановления фазы – Фурье-голографии (*Fourier transform holography, FTH*). В данном методе дифракционный волновой фронт модулируется известным опорным когерентным фоном, и картина в реальном пространстве восстанавливается единственным преобразованием Фурье [15]. В настоящем случае в качестве опорного фронта была использована окружность диаметром 5 пикселей, расположенная в 500 пикселях от центра изображения. Изображения, полученные в результате восстановления реального пространства в случаях затемнения 0, 20, 50 центральных пикселей дифракционной картины, представлены на рис. 2. При использовании данного метода разрешение восстановленного изображения не зависит от числа затемнённых пикселей, однако происходит неоднородная деформация контраста.

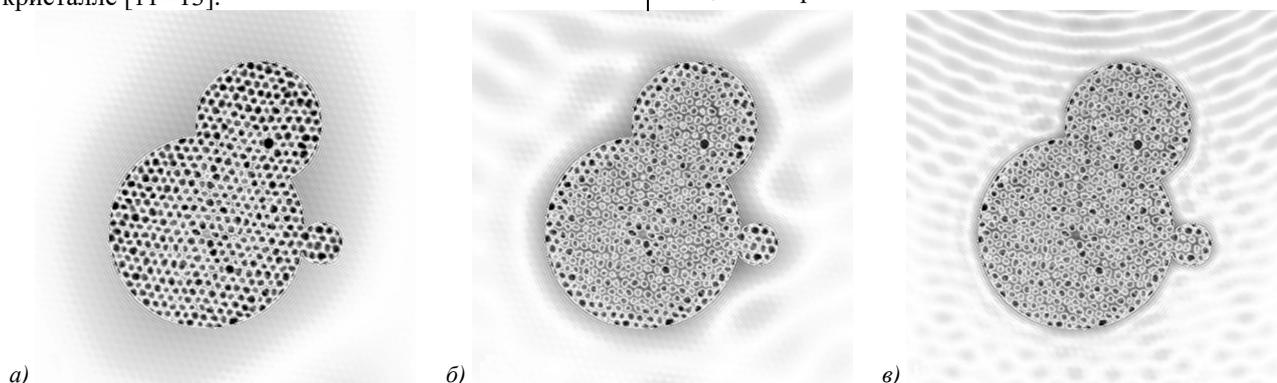


Рис. 2. Численное исследование чувствительности Фурье-голографии к затемненным пикселям в случаях $R=0$ (а); $R=20$ (б); $R=50$ пикселей (в)

Заключение

Данный результат показывает область применимости метода восстановления изображений в реаль-

ном пространстве при помощи гибридного алгоритма ввода-вывода для экспериментов по когерентному малоугловому рассеянию и дифракции рентгеновско-

го излучения. В случае использования бимстопа невозможно точное определение наличия дефектов упаковки и формы индивидуальных объектов, но возможно восстановление местоположений узлов упорядоченной решётки. Напротив, Фурье-голография устойчива к затемнённым пикселям в центре дифрактограммы. Как было показано в недавних работах по рентгеновской птохографии на оплододобных наноструктурах [16, 17], данный метод тоже достаточно устойчив к наличию бимстопа.

Таким образом, для успешного восстановления фазы в задаче когерентной дифракции мы рекомендуем проводить несколько измерений с различными временами экспозиции для включения центральной области детектора в массив входных данных. Альтернативным решением может быть искусственная замена центральной области дифракционной картины на Фурье-образ известной формы объекта или использование опорной волны для восстановления фазы.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Швейцарского национального фонда научных исследований SNF Sinergia CRSII5-171003 NanoSkyrmionics.

Литература

1. **Кузнецова, Т.И.** О фазовой проблеме в оптике / Т.И. Кузнецова // Успехи физических наук. – 1988. – Т. 154(4). – С. 677-690.
2. **Miao, J.** Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens / J. Miao, P. Charalambous, J. Kirz, D. Sayre // Nature. – 1999. – Vol. 400(6742). – P. 342-344.
3. **Robinson, I.** On possible extensions of X-ray crystallography through diffraction-pattern oversampling / I. Robinson, R. Harder // Nature Materials. – 2009. – Vol. 8, Issue 4. – P. 291-298.
4. **Miao, J.** Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens / J. Miao, D. Sayre // Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography. – 2000. – Vol. 56, Issue 6. – P. 596-605.
5. **Fienup, J.R.** Phase retrieval algorithms: a comparison / J.R. Fienup // Applied Optics. – 1982. – Vol. 21, Issue 15. – P. 2758-2769.
6. **Marchesini, S.** Invited article: A unified evaluation of iterative projection algorithms for phase retrieval / S. Marchesini // Review of Scientific Instruments. – 2007. – Vol. 78, Issue 1. – 011301.
7. **Huang, X.** Incorrect support and missing center tolerances of phasing algorithms / X. Huang, J. Nelson, J. Steinbrener, J. Kirz, J.J. Turner, C. Jacobsen // Optics Express. – 2010. – Vol. 18, Issue 25. – P. 26441-26449.
8. **Tripathi, A.** Influence of noise and missing data on reconstruction quality in coherent X-ray diffractive imaging / A. Tripathi, O. Shpyrko, I. McNulty, C. Eyberger, B. Lai // AIP Conference Proceedings. – 2011. – Vol. 1365, Issue 1. – P. 305-308.
9. **He, K.** High dynamic range coherent imaging using compressed sensing / K. He, M.K. Sharma, O. Cossairt // Optics Express. – 2015. – Vol. 23, Issue 24. – P. 30904-30916.
10. **Ukleev, V.** Coherent resonant soft X-ray scattering study of magnetic textures in FeGe / V. Ukleev, Y. Yamasaki, D. Morikawa, N. Kanazawa, Y. Okamura, H. Nakao, Y. Tokura, T.-H. Arima // Quantum Beam Science. – 2018 – Vol. 2, Issue 1. – 3.
11. **Gulden, J.** Coherent x-ray imaging of defects in colloidal crystals / J. Gulden, O.M. Yefanov, A.P. Mancuso, V.V. Abramova, J. Hilhorst, D. Byelov, I. Snigireva, A. Snigirev, A.V. Petukhov, I.A. Vartanyants // Physical Review B. – 2010 – Vol. 81, Issue 22. – 224105.
12. **Ulvestad, A.** Identifying defects with guided algorithms in Bragg coherent diffractive imaging / A. Ulvestad, Y. Nashed, G. Beutier, M. Verdier, S.O. Hruszkewycz, M. Dupraz // Scientific Reports. – 2017. – Vol. 7, Issue 1. – 9920.
13. **Shabalin, A.G.** Revealing three-dimensional structure of an individual colloidal crystal grain by coherent X-Ray diffractive imaging / A.G. Shabalin, J.-M. Meijer, R. Dronyak, O.M. Yefanov, A. Singer, R.P. Kurta, U. Lorenz, O.Y. Gorobtsov, D. Dzhigaev, S. Kalbfleisch, J. Gulden, A.V. Zozulya, M. Sprung, A.V. Petukhov, I.A. Vartanyants // Physical Review Letters. – 2016. – Vol. 117, Issue 13. – 138002.
14. **Van Heel, M.** Fourier shell correlation threshold criteria / M. Van Heel, M. Schatz // Journal of Structural Biology. – 2005. – Vol. 151, Issue 3. – P. 250-262.
15. **Строук, Дж.** Введение в когерентную оптику и голографию / Дж. Строук; пер. с англ. – Рипол Классик, 1967.
16. **Mancini, G.F.** Colloidal crystal order and structure revealed by tabletop extreme ultraviolet scattering and coherent diffractive imaging / G.F. Mancini, R.M. Karl, E.R. Shanblatt, C.S. Bevis, D.F. Gardner, M.D. Tanksalvala, J.L. Russell, D.E. Adams, H.C. Kapteyn, J.V. Badding, T.E. Mallouk, M.M. Murnane // Optics Express. – 2018. – Vol. 26, Issue 9. – P. 11393-11406.
17. **Lazarev, S.** Ptychographic X-Ray imaging of colloidal crystals / S. Lazarev, I. Besedin, A.V. Zozulya, J.-M. Meijer, D. Dzhigaev, O.Yu. Gorobtsov, R.P. Kurta, M. Rose, A.G. Shabalin, E.A. Sulyanova, I.A. Zaluzhnyy, A.P. Menushenkov, M. Sprung, A.V. Petukhov, I.A. Vartanyants // Small. – 2018. – Vol. 14, Issue 3. – 1702575.

Сведения об авторе

Уклеев Виктор Алексеевич, 1989 года рождения, в 2015 году защитил кандидатскую диссертацию по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния» в Санкт-Петербургском академическом университете, в настоящее время работает постдоком в лаборатории нейтронного рассеяния отделения нейтронных и мюонных исследований Института Пола Шеррера (Швейцария). Область научных интересов: когерентное рассеяние синхротронного излучения, магнитные структуры с нетривиальной топологией.
E-mail: victor.ukleev@psi.ch.

ГРНТИ: 29.03.31

Поступила в редакцию 17 июля 2018 г. Окончательный вариант – 17 сентября 2019 г.

Investigation of the tolerance of the phase retrieval algorithm to missing information at the center of a detector in the case of coherent scattering from an ordered structure

V. Ukleev¹

¹Laboratory for Neutron Scattering and Imaging (LNS), Paul Scherrer Institute (PSI), CH-5232 Villigen, Switzerland

Abstract

The hybrid input-output algorithm is a phase retrieval method that provides solution for the phase problem of coherent X-ray diffraction imaging of micro- and nano-objects from the diffraction pattern alone without using any focusing optics. In this paper, we have studied a tolerance of this algorithm to missing information at the center of the diffraction pattern, which is a frequent problem in problems of small-angle scattering. We considered the particular problem of the stability of the algorithm in the case of scattering from an ordered structure and provided a qualitative and quantitative description of the degradation of image reconstruction with an increase in the amount of missing information.

Keywords: coherent diffraction imaging, phase retrieval, small-angle scattering.

Citation: Ukleev VA. Investigation of the tolerance of the phase retrieval algorithm to missing information at the center of a detector in the case of coherent scattering from an ordered structure. *Computer Optics* 2019; 43(6): 1088-1092. DOI: 10.18287/2412-6179-2019-43-6-1088-1092.

Acknowledgements: This work was supported by the project SNF Sinergia CRSII5-171003 NanoSkymionics.

References

- [1] Kuznetsova TI. On the phase retrieval problem in optics. *Soviet Physics Uspekhi* 1988; 31(4): 364.
- [2] Miao J, Charalambous P, Kirz J, Sayre D. Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens. *Nature* 1999; 400(6742): 342-344.
- [3] Robinson I, Harder R. Coherent x-ray diffraction imaging of strain at the nanoscale. *Nature Materials* 2009; 8(4): 291-298.
- [4] Miao J, Sayre D. On possible extensions of X-ray crystallography through diffraction-pattern oversampling. *Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography* 2000; 56(6): 596-605.
- [5] Fienup JR. Phase retrieval algorithms: a comparison. *Appl Opt* 1982; 21(15): 2758-2769.
- [6] Marchesini S. Invited article: A unified evaluation of iterative projection algorithms for phase retrieval. *Rev Sci Instrum* 2007; 78(1): 011301.
- [7] Huang X, Nelson J, Steinbrener J, Kirz J, Turner JJ, Jacobsen C. Incorrect support and missing center tolerances of phasing algorithms. *Opt Express* 2010; 18(25): 26441-26449.
- [8] Tripathi A, Shpyrko O, McNulty I, Eyberger C, Lai B. Influence of noise and missing data on reconstruction quality in coherent X-ray diffractive imaging. *AIP Conf Proc* 2011; 1365(1): 305-308.
- [9] He K, Sharma MK, Cossairt O. High dynamic range coherent imaging using compressed sensing. *Opt Express* 2015; 23(24): 30904-30916.
- [10] Ukleev V, Yamasaki Y, Morikawa D, Kanazawa N, Okamura Y, Nakao H, Tokura Y, Arima T-H. Coherent resonant soft X-ray scattering study of magnetic textures in FeGe. *Quant Beam Sci* 2018; 2(1): 3.
- [11] Gulden J, Yefanov OM, Mancuso AP, Abramova VV, Hilhorst J, Byelov D, Snigireva I, Snigirev A, Petukhov AV, Vartanyants IA. Coherent x-ray imaging of defects in colloidal crystals. *Phys Rev B* 2010; 81(22): 22, 224105.
- [12] Ulvestad A, Nashed Y, Beutier G, Verdier M, Hruszkewycz SO, Dupraz M. Identifying defects with guided algorithms in Bragg coherent diffractive imaging. *Sci Rep* 2017; 7(1): 9920.
- [13] Shabalin AG, Meijer JM, Dronyak R, Yefanov OM, Singer A, Kurta RP, Lorenz U, Gorobtsov OY, Dzhigaev D, Kalbfleisch S, Gulden J, Zozulya AV, Sprung M, Petukhov AV, Vartanyants IA. Revealing three-dimensional structure of an individual colloidal crystal grain by coherent X-Ray diffractive imaging. *Phys Rev Lett* 2016; 117(13): 138002.
- [14] Van Heel M, Schatz M. Fourier shell correlation threshold criteria. *J Struct Biology* 2005; 151(3): 250-262.
- [15] Stroke GW. Introduction to coherent optics and holography. New York: Academic Press, 1966.
- [16] Mancini GF, Karl RM, Shanblatt ER, Bevis CS, Gardner DF, Tanksalvala MD, Russell JL, Adams DE, Kapteyn HC, Badding JV, Mallouk TE, Murnane MM. Colloidal crystal order and structure revealed by tabletop extreme ultraviolet scattering and coherent diffractive imaging. *Opt Express* 2018; 26(9): 11393-11406.
- [17] Lazarev S, Besedin I, Zozulya AV, Meijer JM, Dzhigaev D, Gorobtsov OY, Kurta RP, Rose M, Shabalin AG, Sulyanova EA, Zaluzhnyy I, Menushenkov AP, Sprung M, Petukhov AV, Vartanyants IA. Ptychographic X-Ray imaging of colloidal crystals. *Small* 2018; 14(3): 1702575.

Author's information

Victor Ukleev obtained his PhD degree from the Saint-Petersburg Academic University in 2015, majoring in Condensed Matter Physics. Currently he works as the postdoctoral researcher at the Laboratory for Neutron Scattering and Imaging (LNS), Paul Scherrer Institute (PSI), CH-5232 Villigen, Switzerland. Research interests are coherent X-ray scattering, topological magnetic materials. E-mail: victor.ukleev@psi.ch.

Received July 17, 2018. The final version – September 17, 2019.