

Об оптимизации алгоритмов когерентной дифракционной визуализации (CDI)

© А.В. Мурзина,^{1,2} И.А. Артюков,² Ю.Я. Маслова,² Н.Л. Попов,² Ю.В. Хомяков^{3,4}

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991 Москва, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
119991 Москва, Россия

³Центр коллективного пользования „Сибирский кольцевой источник фотонов“,
630559 Кольцово, Новосибирская обл., Россия

⁴Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия
e-mail: murzina.anastasiia@yandex.ru

Поступило в Редакцию 23 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 23 апреля 2026 г.

Принято к публикации 23 апреля 2026 г.

В рамках реализации безлинзовых методов микроскопии представлены модификации итеративных алгоритмов восстановления фазы, направленные на повышение пространственного разрешения реконструируемых изображений при сохранении вычислительной эффективности. Разработанные подходы апробированы на экспериментальных данных с лазерным источником излучения видимого диапазона, а также в ходе численного эксперимента с использованием частично-когерентного ондуляторного излучения в мягком рентгеновском диапазоне.

Ключевые слова: когерентная дифракционная визуализация, птихография, ондуляторное излучение, пространственное разрешение, восстановление фазы, реконструкция изображений, безлинзовая микроскопия, алгоритм адаптивной маски, пропагатор, синхротрон ЦКП СКИФ.

DOI: 10.61011/JTF.2026.09.63508.103-26

Введение

Любой существующий оптический детектор не определяет фазу падающего излучения напрямую, и в ходе эксперимента регистрирует интенсивность излучения. Возникающая в связи с этим задача восстановления фазы поля излучения, рассеянного исследуемым объектом (так называемая „фазовая проблема“) является одной из фундаментальных в когерентной оптике и встречается во многих ее областях, в частности, в оптической и рентгеновской микроскопии.

В „традиционных“ методах микроскопии изображение объекта формируется с помощью преломляющей, отражающей или дифракционной фокусирующей оптики, неизбежно вносящей те или иные аберрации. При этом достижимое разрешение изображения ограничено числовой апертурой используемых оптических элементов. Особенно остро проблема встает в рентгеновском диапазоне, в котором создание высокоапертурной короткофокусной оптики сопряжено с колоссальными технологическими трудностями [1]. По этой причине крайне актуальными являются альтернативные „безлинзовые“ методы микроскопии, в особенности „когерентная дифракционная визуализация“ (Coherent Diffraction Imaging, CDI) и птихография, позволяющие достигать сверхвысокого разрешения до единиц нанометров [2].

В CDI исследуемый (в общем случае некристаллический) объект освещают когерентным монохроматическим излучением и регистрируют дифракционную картину интенсивности на детекторе. Основная идея метода заключается в итеративном восстановлении комплексной функции пропускания объекта по этой дифракционной картине с применением априорной информации об объекте, которая может быть получена заранее другими методами. Примером применения априорной информации является ограничение области, внутри которой находится объект.

Классический подход к восстановлению фазы, предложенный Гершбергом и Сакстоном в 1972 г. [3], заложил основу для целого семейства итерационных алгоритмов [4]. 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.

В настоящее время был разработан набор методов на основе CDI, нашедших применение в различных задачах. Среди этих методов можно выделить объединение CDI с голографией [5], Брэгг-CDI [6], CDI с геометрией на отражение [7] и др. Помимо классической схемы, был разработан также метод, позволяющий увеличить разрешение восстановленных изображений протяженных объектов за счет их пошагового сканирования с

перекрытием экспонируемых областей — метод птихографии [8]. Перекрытие сканов обеспечивает избыточность данных, необходимую для устойчивого восстановления как самого объекта, так и зондирующего пучка. Птихография тоже имеет ряд модификаций, таких как фурье-птихография, электронная птихография, и др. [9]. Наряду с итеративными подходами к реконструкции фазы, развиваются также и аналитические методы [10].

Следует отметить, что применение алгоритмов когерентной дифракционной визуализации не ограничивается двумерными объектами. Помимо традиционной схемы CDI [11] и птихографической компьютерной томографии [12], применяемыми для восстановления проекций трехмерных образов, разработан ряд специализированных подходов. В частности, Брэгг-CDI позволяет реконструировать тензор механических напряжений в монокристаллах при регистрации дифракционной картины под углом Брэгга [6]. Большой интерес в контексте реконструкции объемных структур представляют также методы, базирующиеся на решении уравнений переноса интенсивности [13] и методах стохастической реконструкции [14].

Бурное развитие методов CDI и птихографии в последние два десятилетия связано не только с прогрессом вычислительной техники, но и с появлением новых источников когерентного излучения. Помимо синхротронных источников и лазеров на свободных электронах [15,16], на сегодняшний день современные методы когерентной визуализации могут использоваться в экспериментах с использованием лабораторных источников, включающих в себя лазеры [17], генерацию высших гармоник в экстремальном ультрафиолетовом диапазоне [18], а также компактные рентгеновские источники [19]. Особый интерес также представляет создание компактных источников, обеспечивающих высокую яркость в рентгеновском диапазоне, делая безлинзовую микроскопию доступной для широкого круга исследовательских групп.

Настоящая работа посвящена исследованию и преодолению ряда ограничений алгоритмов CDI, связанных с недостатком априорной информации об объекте, с неоднозначностью решения вследствие симметрии преобразования Фурье, а также с зашумленностью регистрируемых дифракционных картин. Возможность восстановления структуры объекта с применением подхода адаптивной маски демонстрируется на примере эксперимента на стенде с гелий-неоновым лазером, а также численного эксперимента на станции „Наноскопия“ второй очереди ЦКП „СКИФ“.

1. Распространение когерентного излучения

Описание распространения когерентного излучения начинается с рассмотрения волнового пакета $\psi(\mathbf{r})$ ($\mathbf{r} \equiv (x, y, z) \equiv (\boldsymbol{\rho}, z)$), удовлетворяющего уравнению

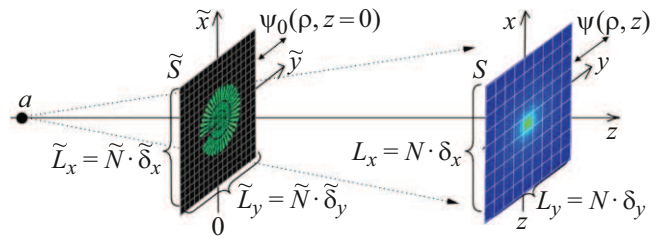


Рис. 1. Постановка эксперимента методом когерентной дифракционной визуализации. Символами обозначены: a — источник когерентного монохроматического излучения; $\tilde{S}$ — плоскость объекта размером $\tilde{L}_x \times \tilde{L}_y$ с двумерным распределением комплексного поля $\psi_0(\boldsymbol{\rho}, 0)$ на ней; S — плоскость детектора размером $L_x \times L_y$ на расстоянии z от объекта с двумерным распределением поля излучения $\psi(\boldsymbol{\rho}, z)$ в плоскости детектора.

Гельмгольца. Пусть плоскость объекта S совпадает с плоскостью $z = 0$, а плоскость детектора S' расположена на расстоянии z от объекта (рис. 1). При расположении детектора в дальней зоне

$$z \gg \frac{L^2}{\lambda}, \quad (1)$$

где L — размер объекта, λ — длина волны. Поле на детекторе $\psi(\mathbf{r})$ определяется через фурье-образ $\varphi_0(\mathbf{p})$ распределения поля в плоскости объекта [20]:

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

$k = 2\pi/\lambda$ — волновое число, а

$$\varphi_0(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-2} \iint_{-\infty}^{\infty} \psi_0(\boldsymbol{\rho}', 0) \exp(-i\mathbf{p}\boldsymbol{\rho}') d^2\boldsymbol{\rho}'.$$

При этом из характера связи координаты на детекторе и пространственной частоты следует тот факт, что информация о пространственных гармониках объекта с частотами $p > k$ в принципе не может быть зарегистрирована в дальней зоне, и этим определяется дифракционный предел разрешения.

На практике нередко используется парааксиальное приближение, описываемое интегралом Френеля:

$$\psi(\boldsymbol{\rho}, z) = \frac{k \exp(ikz)}{2\pi iz} \times \iint_{-\infty}^{\infty} \psi_0(\boldsymbol{\rho}', 0) \exp\left(ik \frac{|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|^2}{2z}\right) d^2\boldsymbol{\rho}', \quad (3)$$

который является решением параболического волнового уравнения. Данное приближение справедливо при малых апертурных углах, т. е. при

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

Тогда в зоне Фраунгофера (1) выражение (3) переходит в

$$\psi(\rho, z) = \frac{2\pi k}{iz} \exp \left[ikz \left(1 + \frac{\rho^2}{2z^2} \right) \right] \times \varphi_0 \left(\mathbf{p} = k \frac{\rho}{z} \right). \quad (5)$$

Более детальный анализ аргументов фурье-образов в (2) и (5) приводит к более жесткому ограничению [21]:

$$\frac{L^2}{\lambda} \ll z \ll \frac{4}{\pi} \frac{\lambda}{\tan^4 \theta}. \quad (6)$$

Для расчета распространения поля на произвольное расстояние z без ограничения на апертуру следует использовать точное решение волнового уравнения:

$$\psi(\rho, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(\mathbf{p}) \exp \left(iz \sqrt{k^2 - p^2} \right) \exp(i\mathbf{p}\rho) d^2\mathbf{p}. \quad (7)$$

Моделирование распространения излучения на практике сводится к двумерному быстрому преобразованию Фурье (БПФ):

$$F_{pq} \equiv FT\{f\} = (NM)^{-1} \times \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M f_{nm} \exp(-i2\pi pn/N) \exp(-i2\pi qm/M), \quad (8)$$

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

Вычисление (7) требует расчета двух БПФ: прямого — для получения $\varphi_0(p)$ и обратного — для получения поля $\psi(\rho, z)$ (рис. 2, а). В ряде случаев, однако, распространение поля можно вычислить применением одного БПФ. Так, в дальней зоне (1) точное выражение (7) сводится к выражению (2), где фурье-образ вычисляется единожды (рис. 2, б). Помимо этого, если расстояние z удовлетворяет условию

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

где $\tilde{\delta}$ — размер пиксела в плоскости объекта, то можно использовать метод „виртуальной линзы“, идея которого заключается в следующем (рис. 2, в). Поместим в плоскость объекта виртуальную рассеивающую линзу с фокусным расстоянием $f = -z$. Ее действие сводится к умножению поля на заранее вычисляемый фазовый множитель:

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

после чего поле $\psi'(\rho, 0)$ распространяется до детектора. Применение к ψ' выражения для поля в зоне Фраунгофера в параксиальном приближении (5) эквивалентно прямому вычислению интеграла Френеля (3) [20]. Обратное распространение (от детектора к объекту) выполняется

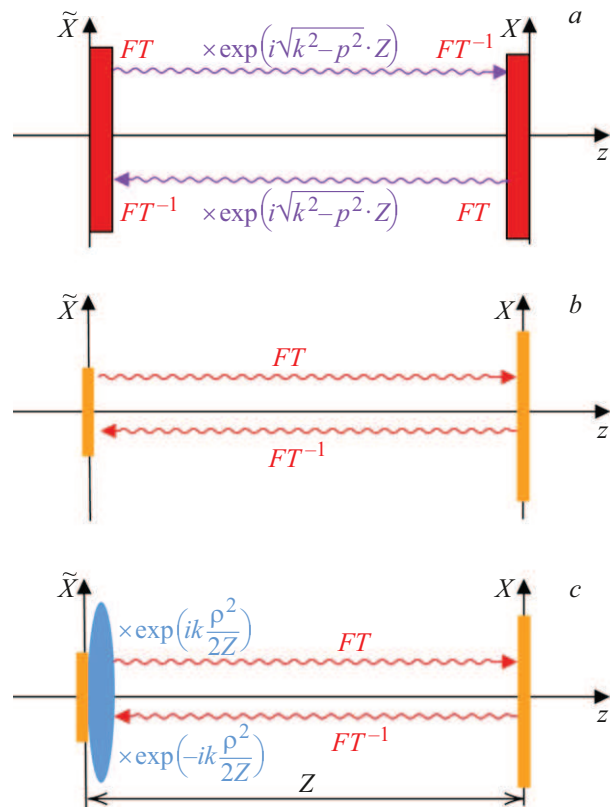


Рис. 2. Операторы распространения излучения на расстояние Z от плоскости объекта $\tilde{X}$ к плоскости детектора X в свободном пространстве; *a* — волновой пропагатор, *b* — преобразование Фурье, *c* — виртуальная линза.

аналогично с заменой ($z \rightarrow -z$) и комплексным сопряжением.

Для моделирования процесса прохождения излучения через неоднородную среду может быть применен метод „сплит-степ“, заключающийся в пошаговом распространении поля излучения с учетом поглощения и преломления с использованием приближенного пропагатора. При этом необходимо задать геометрию и комплексный показатель преломления среды $n(x, y, z)$. Пусть в некоторой плоскости z напряженность поля монохроматического излучения равна $\tilde{\mathbf{E}}(\rho, z)$, тогда после прохождения излучением расстояния δz напряженность $\tilde{\mathbf{E}}$ станет [1]:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{E}}(\rho, z + \delta z) &= \exp[(\hat{\mathcal{D}} + \hat{\mathcal{S}})\delta z] \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\rho, z) \\ &\approx \exp(\hat{\mathcal{S}}\delta z) \exp(\hat{\mathcal{D}}\delta z) \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\rho, z) \\ &= \exp(-ikn(\rho, z)\delta z) \cdot FT^{-1} \\ &\times \left\{ \exp \left[-i(p_x^2 + p_y^2)\delta z / (2k) \right] \tilde{\mathbf{E}}(\rho, z) \right\}, \end{aligned} \quad (11)$$

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

2. Алгоритмы реконструкции фазы и их реализация

Задача восстановления фазы относится к классу обратных задач, суть которых заключается в реконструкции пространственного распределения комплексной амплитуды поля, рассеянного объектом, по зарегистрированным результатам его взаимодействия с измерительной системой. Процесс регистрации данных D в плоскости детектора описывается сверткой функции объекта O с аппаратной функцией системы (point spread function, PSF) P при неизбежном присутствии шума N [22]:

$$D = P * O + N. \quad (12)$$

Функция объекта несет искомую информацию о структурных и материальных свойствах исследуемого образца. Для ее определения необходимо знание точной модели взаимодействия излучения с системой, что в контексте когерентной безлинзовой визуализации сводится к корректному выбору оператора распространения излучения, связывающего поле в плоскости объекта с полем в плоскости детектора. Не менее важным аспектом является корректное описание статистических свойств шума, неизбежно имеющего место в реальном эксперименте ввиду наличия систематических ошибок и отклонений от идеальной модели системы.

Таким образом, наиболее общая постановка задачи когерентной визуализации как обратной проблемы подразумевает разработку устойчивого алгоритма, позволяющего вычислить функцию объекта по зарегистрированному распределению интенсивности рассеянного поля с учетом известной модели распространения излучения при наличии шума.

В задаче, сформулированной Гершбергом и Сакстоном, требовалось восстановить фазу волнового поля, создаваемого когерентным пучком излучения, в двух параллельных плоскостях: объекта и детектора [3]. Искомое решение должно было одновременно удовлетворять известным распределениям интенсивности, зарегистрированным в этих плоскостях, и точно описывать процесс распространения излучения между ними. Предложенный ими итерационный алгоритм попеременно накладывает ограничения в прямом и обратном пространстве в виде замены модуля поля на измеренный.

Значительный прогресс был достигнут в работе Финапа [23], где задача была переформулирована следующим образом: восстановить фазу поля в плоскости объекта, располагая лишь измерением интенсивности в плоскости детектора и априорной информацией об объекте. Эта информация, называемая также „ограничениями объекта“, может иметь вид заданных размеров объекта (носитель $\text{supp } \psi$), неотрицательность амплитуды или вещественность. Было показано, что в одномерном случае задача не имеет единственного решения даже при наличии ограничений [24], однако для двумерных объектов однозначное восстановление становится возможным.

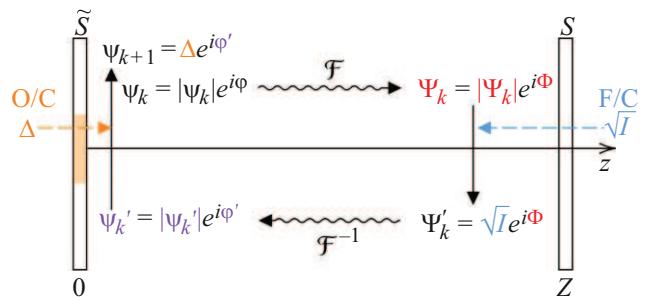


Рис. 3. Итерация алгоритма восстановления фазы; $\tilde{S}$ — плоскость объекта, S — плоскость детектора, O/C — ограничение объекта, F/C — фурье-ограничение.

Предложенный Финапом итерационный алгоритм называется алгоритмом снижения ошибки (Error Reduction, ER) и фактически является модификацией алгоритма Гершберга–Сакстона. Структурно алгоритм ER состоит из следующих шагов (рис. 3):

1) начальное приближение поля в плоскости объекта $\psi_0(\mathbf{p})$ задается случайным образом с учетом априорных ограничений;

2) выполняется процедура распространения $\mathcal{F}$ поля на плоскость детектора (вычисляется фурье-образ): $\psi_k(\mathbf{p}) = \mathcal{F}[\psi_k]$;

3) модуль поля в плоскости детектора заменяется на корень квадратный из измеренной интенсивности: $\psi'_k(\mathbf{p}) = \sqrt{I(\mathbf{p}) \cdot \psi_k(\mathbf{p}) / |\psi_k(\mathbf{p})|}$;

4) выполняется обратное распространение на плоскость объекта (обратное преобразование Фурье): $\psi'_k(\mathbf{p}) = \mathcal{F}^{-1}[\psi_k]$;

5) к вычисленному полю применяются ограничения объекта. Например, ограничение носителя: $\psi_{k+1}(\mathbf{p}) = \psi'_k(\mathbf{p})$ для $\mathbf{p} \in \text{supp } \psi$ и $\psi_{k+1}(\mathbf{p}) = 0$ в противном случае;

6) процесс повторяется с шага 2 до выполнения критерия останова.

Алгоритм ER представляет собой метод сопряженных градиентов для поиска локального минимума функционалом ошибки. В данном случае этот функционал выражен в виде энергии поля в области, не удовлетворяющей ограничениям объекта.

Зачастую, однако, алгоритм снижения ошибки „застревает“ в минимумах, не соответствующих точному решению. Для преодоления этой проблемы Финапом был предложен гибридный алгоритм ввода–вывода (Hybrid Input-Output, HIO). В этой схеме ограничения объекта модифицируются с добавлением отрицательной обратной связи:

$$\psi_{k+1}(\mathbf{p}) = \begin{cases} \psi'_k, & \mathbf{p} \in \text{supp } \psi, \\ \psi_k - \beta \psi'_k, & \mathbf{p} \notin \text{supp } \psi. \end{cases} \quad (13)$$

В ограничении в виде (13) $0 < \beta < 1$ — эмпирический параметр. Идея заключается в том, что вне носителя по-

ле не равно нулю строго, а лишь частично подавляется, что позволяет избежать „застревания“.

Хотя алгоритм НЮ не гарантирует монотонного убывания ошибки и может осциллировать, на практике он значительно эффективнее ER при поиске глобального решения. Типичная реализуемая в CDI стратегия заключается в комбинировании двух алгоритмов: выполняется несколько десятков итераций НЮ для быстрого поиска минимума, а затем несколько итераций ER для стабилизации [25].

Практическая реализация алгоритмов CDI сопряжена с рядом ограничений, значительно снижающих достижимое разрешение восстановленных изображений. Понимание природы этих ограничений необходимо для корректной постановки эксперимента и оптимизации стратегии применения алгоритмов реконструкции. Как уже было отмечено [24], задача восстановления фазы в одномерном случае не имеет единственного решения, однако в пространстве большей размерности решение может быть найдено при наличии априорной информации об объекте, а также при достаточном уровне переопределенности („оверсэмплинга“) [4]. Переопределенность выражается соотношением числа точек в дифракционной картине к числу неизвестных точек на объекте. В постановке задачи Финапа число неизвестных в два раза больше, поскольку распределение модуля поля в плоскости объекта не задано, и его требуется отыскать наряду с фазовой информацией. Оверсэмплинг достигается в частотной области на детекторе. Для успешной реконструкции требуется, чтобы размер объекта был как минимум вдвое меньше расчетной области. При этом в присутствии шумов требуемый уровень оверсэмплинга может быть выше [26].

Нередко экспериментально тяжело установить точный размер объекта и определить носитель. Неверное его задание является одной из главных причин неудачного восстановления. Слишком большой носитель снижает эффективную переопределенность и увеличивает вероятность ложных решений. Слишком маленький носитель или носитель искаженной формы может отсечь реальные части объекта, сделав обратную задачу неразрешимой.

Для устранения неопределенности, связанной с отсутствием априорной информации о точных границах объекта, в настоящей работе применяется алгоритм адаптивной маски, являющийся одной из реализаций подхода термоусадочной оболочки („shrinkwrap“) [27]. Процедура динамического уточнения бинарной маски-носителя схематически представлена на рис. 4 и включает следующие этапы:

1) задается начальное распределение комплексного поля в плоскости объекта. Оно может быть определено случайным образом либо сформировано на основе имеющейся априорной информации об источнике излучения. На распределение накладывается прямоугольная бинарная маска-носитель, размер которой выбирается таким образом, чтобы удовлетворять условию оверсэмплинга;

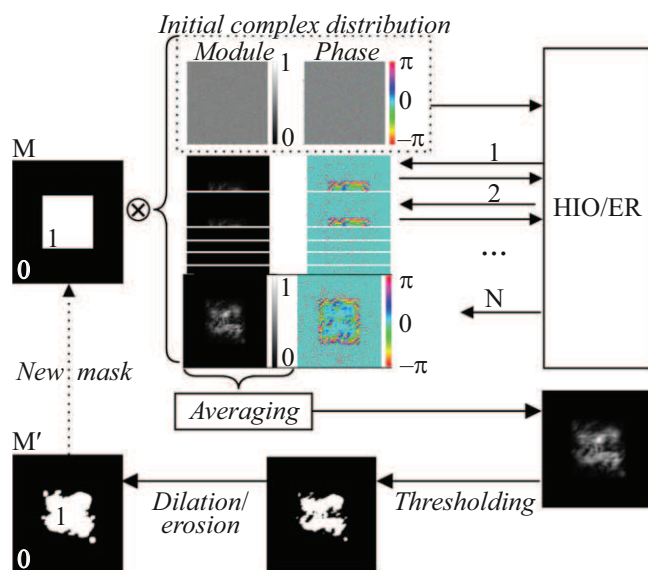


Рис. 4. Схема реализации автоматической коррекции носителя методом адаптивной маски.

2) сформированное поле с наложенным ограничением рассчитывается через итерации комбинации алгоритмов ввода-вывода (НЮ) и снижения ошибки (ER), что позволяет последовательно уточнять распределение поля при неизменной маске носителя;

3) результат выполнения предыдущего этапа вновь подается на вход той же последовательности алгоритмов с сохранением текущего ограничения. Эта процедура повторяется заданное количество раз, обеспечивая уточнение информации о структуре поля;

4) полученные после завершения блока итераций амплитуды комплексного поля объекта подвергаются усреднению. По усредненному распределению модуля поля после его пороговой фильтрации и после применения морфологических операций эрозии и дилатации (по необходимости) формируется новое, скорректированное ограничение носителя, применяемое в следующем цикле итераций.

Вследствие симметрии преобразований Фурье, даже с учетом оверсэмплинга решение может быть неоднозначным. Так, если $\psi(\rho)$ является решением обратной задачи, то решением этой задачи будут являться также $\psi(\rho) \exp(i\varphi)$, $\psi^*(-\rho)$, а также смещение $\psi(\rho - \rho_0)$ на произвольный вектор ρ_0 [4]. Умножение на фазовый множитель обычно считается незначительной проблемой при восстановлении, а вторая неопределенность исчезает при использовании нецентросимметричных объектов. Третья неопределенность представляет собой большую проблему при попытке использовать метод CDI для восстановления движущихся объектов без знания их точного положения.

Помимо ограничений, рассмотренных выше, реальные эксперименты неизбежно сопровождаются шумами, источниками которых могут выступать аппаратный шум,

неоднородность отклика пикселей детектора и дискретизация сигнала. Присутствие шума нарушает точное соответствие фурье-образа поля и интенсивности, измеренной детектором, что приводит к значительному снижению скорости сходимости метода и появлению артефактов, и, как следствие, к снижению пространственного разрешения.

В простейшей модели (12) допускается, что шумы имеют аддитивный характер, тогда как в действительности они могут иметь мультипликативный характер, а также более сложную природу возникновения [28]. В связи с этим для борьбы с шумами на уровне эксперимента стандартно производится регистрация дополнительных калибровочных изображений: „белого“ пучка (для устранения аддитивной составляющей) и „темного“ полей (для оценки мультипликативной составляющей). Когда это допустимо, сигнал также собирается с длительной экспозицией, что позволяет увеличить соотношение сигнал-шум. В тех случаях, когда получение калибровочных снимков не представляется возможным, на этапе предобработки дифракционных картин применяются вычислительные методы определения уровня фона.

В настоящей работе для экспериментальных данных был использован алгоритм сигма-клиппинга („ σ -clipping“), широко применяемый при обработке астрономических изображений [29]. Процедура оценки уровня фона основана на итеративной обработке изображения, преобразованного в одномерный массив данных. На каждой итерации вычисляются медиана и стандартное отклонение на основе медианного абсолютного отклонения. Пиксели со значениями, отклоняющимися от стандартного отклонения более чем втрое, определяют уровень шума. Выбор метода обусловлен его устойчивостью к выбросам и отсутствием предположений о гауссовом распределении.

Важной методологической проблемой является также определение однозначной метрики качества восстановленных изображений. Такая численная оценка позволила бы сформировать оптимальную стратегию восстановления, под которой понимается последовательность итераций алгоритмов, обеспечивающая минимальную ошибку реконструкции модуля и фазы поля в плоскости объекта за наименьшее вычислительное время. Ошибка, определяемая методом ER, в общем случае не может служить однозначной оценкой качества реконструкции, поскольку при применении адаптивной маски носитель динамически подстраивается под форму объекта, и доля области, содержащей только объект, возрастает. Помимо этого, она также не соответствует наблюдаемому качеству восстановления [30]. Для количественного сравнения восстановленных и эталонных изображений в настоящей работе использовался индекс структурного сходства (SSIM), определяющий сходство локальных структурных изменений:

$$\text{SSIM}(x, y) = \frac{(2\mu_x\mu_y + C_1)(2\sigma_{xy} + C_2)}{(\mu_x^2 + \mu_y^2 + C_1)(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + C_2)}, \quad (14)$$

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 [31]. Индекс структурного сходства принимает значения от -1 до 1 , при этом SSIM для идентичных изображений равен единице.

3. Апробация метода на экспериментальном стенде с гелий-неоновым лазером

Для верификации алгоритма и апробации метода CDI с адаптивной маской была создана оптическая схема и проведен эксперимент, реализующий безлинзовую регистрацию дифракционных картин от тестовых объектов, описанный также в [20]. Схема установки представлена на рис. 5 и включает в себя гелий-неоновый лазер в качестве источника когерентного излучения, тестовый образец и детектор.

В данной схеме источником когерентного монохроматического излучения являлся лазер с выходной мощностью 5 mW , на основной TEM00 моде генерирующий излучение с длиной волны $\lambda = (632.8 \pm 0.16) \text{ nm}$. Исследуемые объекты размещались на расстоянии 295 cm от источника и представляли собой диафрагмы из нержавеющей стали толщиной 1.1 mm в форме букв „Ф“, „И“, „А“, „Н“ (каждая размером не более $3 \times 2 \text{ mm}$), изготовленные методом лазерной резки с точностью позиционирования $100 \mu\text{m}$. Регистрация излучения, прошедшего через исследуемые образцы, осуществлялась КМОП-камерой модели CMOS1300, Deltatech, расположенной на расстоянии $z = 60 \text{ cm}$ от объекта. Детектор содержит 1032×1288 пикселей размером $\delta_{x|y} = 6 \mu\text{m}$ (размер светочувствительной области $L_{x|y} = 6.192 \times 7.728 \text{ mm}$) и позволяет регистрировать 10-битные изображения. Характерное время экспозиции составило 7 ms .

Предварительная обработка зарегистрированных дифракционных картин включала в себя определение уровня фонового сигнала методом сигма-клиппинга. Для

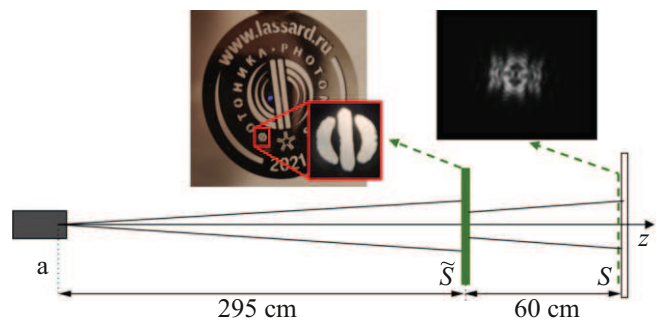


Рис. 5. Схема эксперимента для апробации метода CDI с гелий-неоновым лазером (обозначен буквой a) в качестве источника когерентного монохроматического излучения и диафрагмой $\tilde{S}$ в виде букв в качестве тестового объекта. Интенсивность рассеянного излучения регистрируется детектором в плоскости S .

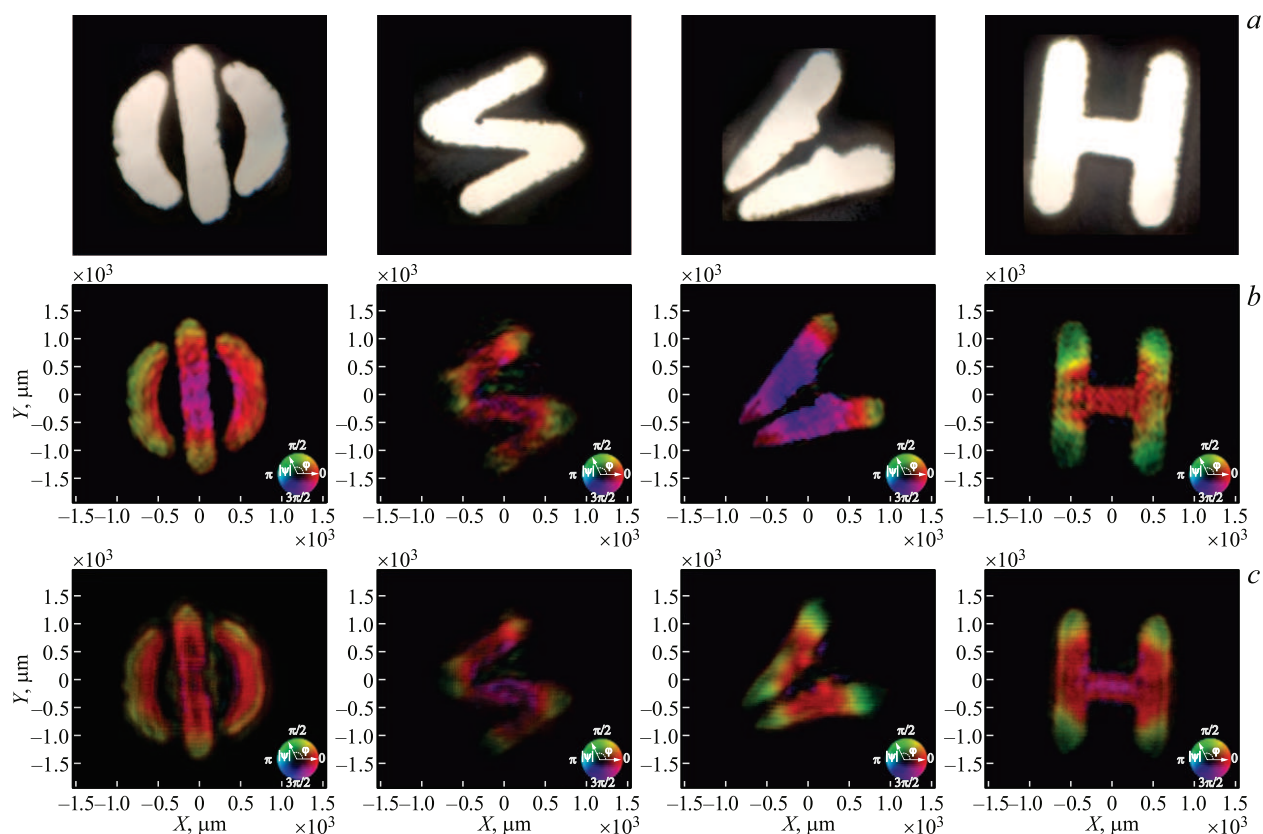


Рис. 6. Сравнение результатов реконструкции комплексного поля лазерного излучения, прошедшего через диафрагмы в виде букв „Ф“, „И“, „А“, „Н“, с использованием различных моделей распространения. Верхний ряд (а) — эталонные изображения диафрагм, полученные с помощью оптического микроскопа. Средний ряд (б) — реконструкция с применением модели виртуальной линзы (10). Нижний ряд (с) — реконструкция с использованием волнового пропагатора (7).

пикселей, превышающих найденный уровень фона, производилось его вычитание, в противном случае сигнал принимался равным нулю. На следующем этапе для извлечения модуля фурье-образа из полученных значений извлекался квадратный корень.

Поскольку $z = 60 \text{ см} > z_{\text{fre}} = 2.844 \text{ см}$, в данном случае обосновано применение метода виртуальной линзы (9) для распространения излучения от плоскости объекта до плоскости детектора и обратно. Расчетный домен объекта был выбран в соответствии с доменом детектора — соответствующим матрице КМОП.

Стратегия восстановления распределения комплексного поля в плоскости объекта имела блочную структуру. Каждый блок включал в себя комбинации из 30 итераций гибридного алгоритма ввода-вывода с заданным параметром релаксации β и 10 итераций алгоритма снижения ошибки, при этом параметр релаксации постепенно снижался, принимая значения $\beta = \{1, 0.7, 0.4, 0.1\}$. Таким образом, суммарно каждый блок содержит 160 итераций, по завершении блока распределение фазы обращалось в нуль, в то время как амплитуда поля сохранялась и использовалась в качестве начального приближения для следующего блока. Всего выполнялось 9 блоков, причем в заключительном блоке чис-

ло итераций алгоритма ER было увеличено до 200. При невыполнении критерия останова комплексное поле инициализировалось заново и последовательность из 9 блоков выполнялась снова. При применении алгоритма адаптивной маски для формирования новой маски-носителя использовались распределения модуля на выходе каждого из девяти блоков, и последующий набор блоков выполнялся с обновленным ограничением объекта.

Результаты восстановления амплитудных и фазовых распределений для тестовых объектов представлены на рис. 6. В данном эксперименте отсутствовало эталонное изображения для определения структурного сходства. Визуально наилучшее качество восстановления достигнуто для буквы „Ф“, что согласуется с наибольшей интенсивностью регистрируемого сигнала. Худшее качество продемонстрировала буква „И“, для которой зарегистрирован минимальный уровень сигнала. Среднее время выполнения 30 итераций алгоритма НЮ и 10 итераций ER (графический процессор NVIDIA Tesla T4, 15 GiB оперативной памяти) с восстановлением изображения размером 1032×1288 пикселей составило 6.57 s для пропагатора с виртуальной линзой и 35.13 s для точного решения (7).

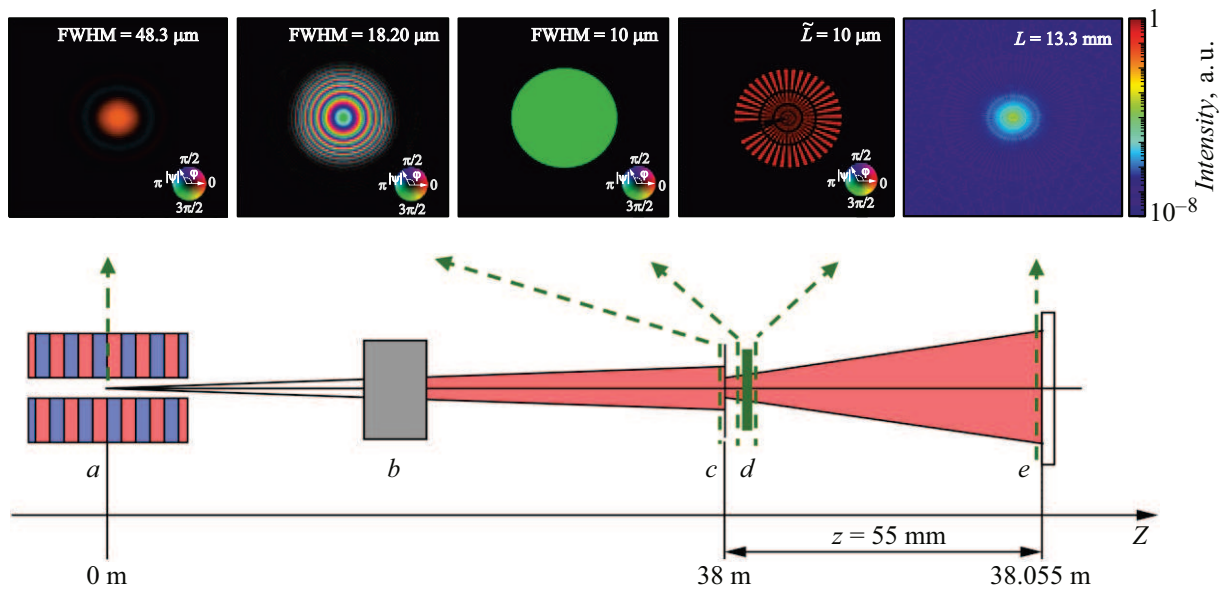


Рис. 7. Схема распространения пучка ондуляторного излучения станции „Наноскопия“ от источника к детектору. Верхний ряд — распределения комплексного поля в плоскостях, отмеченных стрелками (в плоскости детектора изображено распределение интенсивности). Здесь FWHM — полная ширина на половине максимума распределения интенсивности, $\tilde{L}$ — размер тестового объекта, L — размер детектора. Обозначения элементов станции: a — ондулятор, b — монохроматор, c — пинхол, d — образец, e — детектор.

4. Цифровой эксперимент на станции „Наноскопия“ ЦКП „СКИФ“

Применение специализированных устройств генерации излучения (ондуляторов) на вводимом в эксплуатацию синхротроне ЦКП „СКИФ“ со сверхмалым электронным эмиттансом ~ 100 pm-rad сделает возможным формирование ярких источников когерентного мягкого рентгеновского излучения. В рамках второй очереди ЦКП „СКИФ“ планируется создание ондуляторной станции „Наноскопия“ [32], один из блоков которой предназначен для дозозэффективной когерентной дифракционной визуализации биологических клеток и вирусов на энергии фотонов 530 eV (внутри „окна прозрачности воды“).

С учетом параметров накопительного кольца ЦКП „СКИФ“ [33] и ондулятора станции „Наноскопия“ [34] проведен численный эксперимент, включающий в себя распространение излучения сквозь тестовый образец и свободное пространство до детектора, а также восстановление комплексного поля излучения в плоскости образца методом CDI. Для решения прямой задачи (рис. 7) был разработан скрипт на языке программирования „Python“ с применением библиотеки „Oscelot“ [35].

В качестве эталонного образца задавалась золотая диафрагма (плотность $\rho(\text{Au}) = 19.32 \text{ g/cm}^3$) в форме асимметричной звезды Сименса диаметром $10 \mu\text{m}$ и толщиной $1.5 \mu\text{m}$, нанесенная на мембрану нитрида кремния (плотность $\rho(\text{Si}_3\text{N}_4) = 3.44 \text{ g/cm}^3$) такой же толщины (рис. 8, a). Прохождение излучения через образец моделировалось методом „сплит-степ“ (11). Полагалось,

что детектор регистрирует квадрат модуля комплексного поля, полученного при решении прямой задачи (рис. 8, b). Для учета влияния шумов в интенсивность был добавлен пуассоновский шум, математическое ожидание которого в каждой точке полагалось равным значению сигнала. Уровень шума варьировался путем изменения динамического диапазона входных данных. Были рассмотрены два набора данных с разным уровнем шума. В первом случае пиковое отношение сигнал/шум (PSNR) составило 80 dB, во втором случае — 60 dB.

При расстоянии $z = 55 \text{ mm} > z_{\text{far}} = 42.7 \text{ mm}$ применимы критерии дальней зоны (1), в связи с чем в качестве пропагатора в вычислениях использовалось двумерное БПФ (8). Детектор обладает характеристиками, аналогичными Dhyana XF400BSI, и имеет рабочую область размером 2048×2048 пикселей размером $\delta_x|_y = 6.5 \mu\text{m}$ (размер светочувствительной области $L_x|_y = 13.3 \times 13.3 \text{ mm}$). Требования к динамическому диапазону детектора в реальном эксперименте могут быть снижены вводом поглотителя прямого пучка непосредственно перед детектором. При этом, однако, будет потеряна часть дифракционной картины, а представленный алгоритм восстановления изображения в таких случаях требует модификации. Для решения обратной задачи применялась стратегия комбинации алгоритмов ER и НЮ, аналогичная используемой в эксперименте с гелий-неоновым лазером в комбинации с методом адаптивной маски. С учетом применения графического ускорения для вычислений, среднее время выполнения 30 итераций алгоритма НЮ и 10 итераций ER примени-

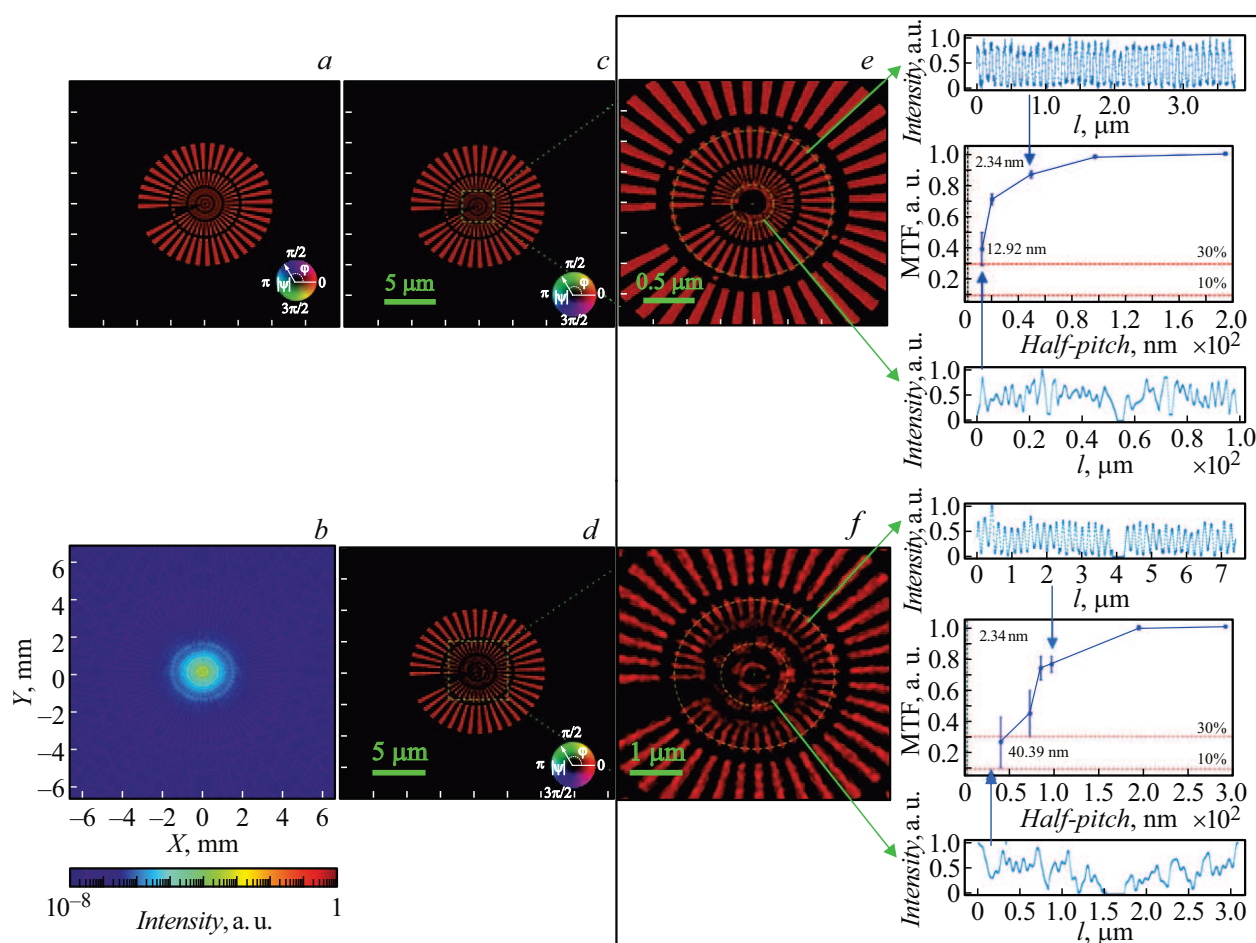


Рис. 8. Реконструкция тестового объекта в виде звезды Сименса: *a* — исходный объект; *b* — излучение, регистрируемое детектором в отсутствие шума (решение прямой задачи); распределение интенсивности показано в логарифмической шкале; *c, d* — восстановленное комплексное поле при PSNR = 80 и 60 dB соответственно; *e, f* — оценка разрешения восстановленных изображений: профили интенсивности по угловой координате (соответствующие окружности отмечены на увеличенных фрагментах); модуляционные передаточные функции (MTF) с указанием уровней 30 % и 10 % и минимальным размером разрешаемой полосы.

тельно к изображению размером 2048×2048 пикселей оказалось равным 6.89 s.

В результате восстановления комплексного поля для исходных данных с PSNR = 80 dB (рис. 8, *c*) индекс структурного сходства SSIM (14) составил 0.88, для данных с пиковым отношением сигнал/шум 60 dB (рис. 8, *d*) индекс SSIM равен 0.85.

Для физической интерпретации значений индекса SSIM было проведено определение пространственного разрешения с использованием звезды в качестве миры. На основе анализа профилей интенсивности по углу с набором фиксированных радиусов (рис. 8, *e, f*) была построена модуляционная передаточная функция (Modulation transfer function, MTF). Размер минимально разрешаемой полосы равен 12.92 nm (80 dB) и 40.39 nm (60 dB), что служит указанием на то, что полученные значения SSIM соответствуют реконструкции, обеспечивающей близкое к дифракционному пределу установки пространственное разрешение.

Кроме того, был рассмотрен модельный органический образец размером $10 \mu\text{m}$ и толщиной $0.5 \mu\text{m}$, состоящий из липидных кластеров (плотность $\rho(\text{H}_{62.5}\text{C}_{31.5}\text{O}_{6.3}) = 1 \text{ g/cm}^3$) в водной среде (рис. 9, *a*). Геометрия этого эксперимента и стратегия решения обратной задачи были идентичны ранее описанным. Результатом восстановления стало комплексное поле, имеющее индекс структурного сходства SSIM с эталонным, равный 0.81 (рис. 9, *c*).

Заключение

В работе были рассмотрены факторы, ограничивающие эффективность метода CDI, и предложены подходы к модификации итеративных алгоритмов восстановления фазы, направленные на повышение качества реконструируемых изображений при сохранении вычислительной эффективности. Среди этих модификаций выделяется алгоритм адаптивной маски на основе подхода термо-

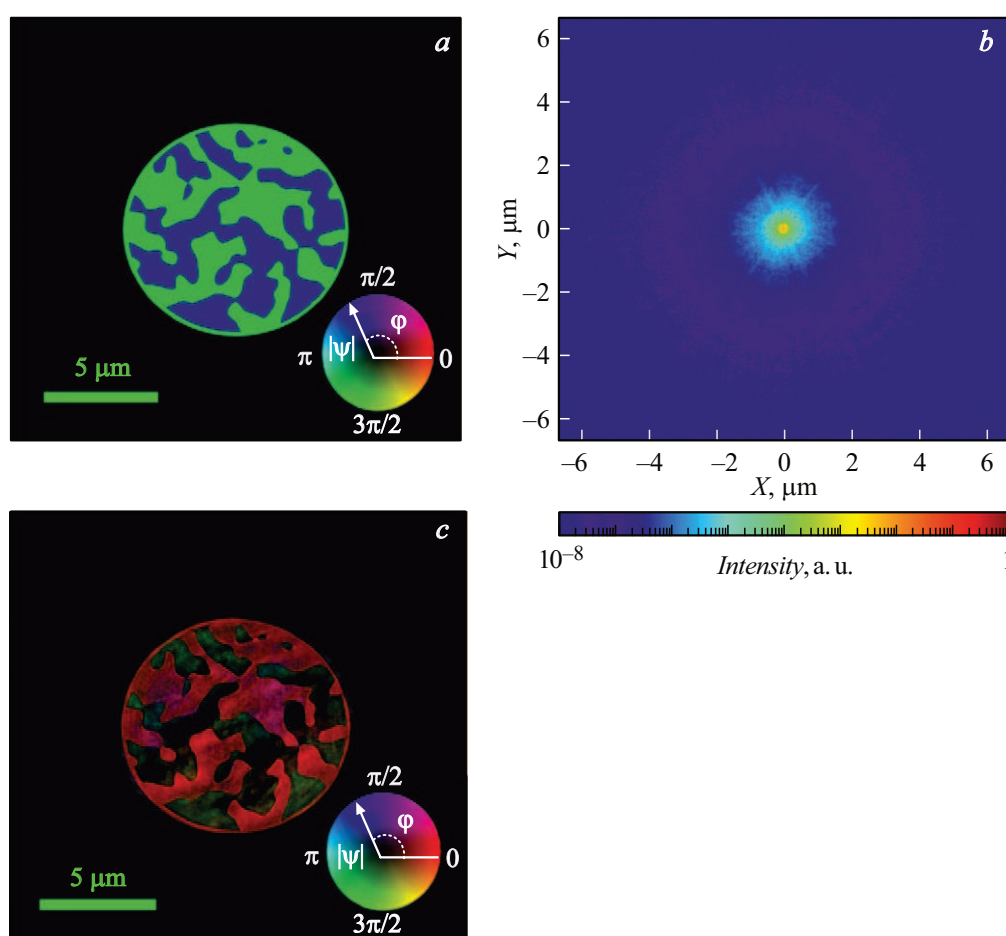


Рис. 9. Реконструкция органического тестового объекта в виде липидной взвеси в воде: *a* — исходный объект, *b* — излучение, регистрируемое детектором (решение прямой задачи), *c* — восстановленное комплексное поле в идеальных условиях. Распределение интенсивности на детекторе представлено в логарифмической шкале.

усадочной оболочки, позволяющий гибко, в полуавтоматическом режиме, корректировать ограничение объекта во время процесса восстановления.

Разработанные алгоритмические усовершенствования были протестированы в рамках двух типов экспериментов. В ходе апробации на экспериментальном стенде с гелий-неоновым лазером в качестве источника когерентного монохроматического излучения показано, что модификация в виде адаптивной маски в совокупности с применением пропагатора в параболическом приближении позволяет устойчиво восстанавливать структуру тестовых объектов-диафрагм даже при наличии шумов неуставленной природы, частично подавить которые позволил метод сигма-клиппинга. Численный эксперимент с ондуляторным излучением в спектральном диапазоне „окна прозрачности воды“ на станции „Наноскопия“ второй очереди ЦКП СКИФ демонстрирует потенциал когерентной дифракционной визуализации биологических микрообъектов с нанометровым разрешением без использования контрастных меток.

Последующие шаги в борьбе с ограничениями метода CDI будут связаны с поиском численной метрики

качества восстановления, наименее чувствительной к глобальной фазе, сдвигу и сопряженному отражению. Помимо этого, планируется уделить внимание проблеме восстановления поглощающих элементов на прозрачном для излучения фоне.

Благодарности

Авторы выражают признательность А.В. Виноградову за плодотворное обсуждение.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] C. Jacobsen. *X-ray Microscopy* (Cambridge University Press, 2019)
- [2] T. Aidukas, N.W. Phillips, A. Diaz, E. Poghosyan, E. Müller, A.F.J. Levi, G. Aepli, M. Guizar-Sicairos, M. Holler. *Nature*, **632** (8023), 81 (2024). DOI: 10.1038/s41586-024-07615-6

- [3] R.W. Gerchberg, W.O. Saxton. *Optik*, **35** (2), 237 (1972).
- [4] Y. Shechtman, Y.C. Eldar, O. Cohen, H.N. Chapman, J. Miao, M. Segev. *IEEE Signal Processing Magazine*, **32** (3), 87 (2015). DOI: 10.1109/MSP.2014.2352673
- [5] T. Latychevskaia, J.-N. Longchamp, H.-W. Fink. *Opt. Express*, **20** (27), 28871 (2012). DOI: 10.1364/OE.20.028871
- [6] I. Robinson, R. Harder. *Nature Materials*, **8** (4), 291 (2009). DOI: 10.1038/nmat2400
- [7] I.K. Robinson, J.L. Libbert, I.A. Vartanyants, J.A. Pitney, D.M. Smilgies, D.L. Abernathy, G. Grübel. *Phys. Rev. B*, **60** (14), 9965 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevB.60.9965
- [8] F. Pfeiffer. *Nature Photonics*, **12** (1), 9 (2018). DOI: 10.1038/s41566-017-0072-5
- [9] J. Miao. *Nature*, **637** (8045), 281 (2025). DOI: 10.1038/s41586-024-08278-z
- [10] T.E. Gureyev, K.A. Nugent. *J. Opt. Society of America A*, **13** (8), 1670 (1996). DOI: 10.1364/JOSAA.13.001670
- [11] M. Guizar-Sicairos, A. Diaz, M. Holler, M.S. Lucas, A. Menzel, R.A. Wepf, O. Bunk. *Opt. Express*, **19** (22), 21345 (2011). DOI: 10.1364/OE.19.021345
- [12] M. Dierolf, A. Menzel, P. Thibault, P. Schneider, C.M. Kewish, R. Wepf, O. Bunk, F. Pfeiffer. *Nature*, **467** (7314), 436 (2010). DOI: 10.1038/nature09419
- [13] B. Yu, L. Weber, A. Pacureanu, M. Langer, C. Olivier, P. Cloetens, F. Peyrin. В сб.: *2017 IEEE 14th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI 2017)* (IEEE, Melbourne, Australia, 2017), p. 56–59.
- [14] A. Cherkasov, A. Ananov, M. Karsanina, A. Khlyupin, K. Gerke. *Phys. Rev. E*, **104** (3), 035304 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevE.104.035304
- [15] J. Miao, P. Charalambous, J. Kirz, D. Sayre. *Nature*, **400** (6742), 342 (1999). DOI: 10.1038/22498
- [16] H.N. Chapman, A. Barty, M.J. Bogan, S. Boutet, M. Frank, S.P. Hau-Riege, S. Marchesini, B.W. Woods, S. Bajt, W.H. Benner, R.A. London, E. Plönjes, M. Kuhlmann, R. Treusch, S. Düsterer, T. Tschechschner, J.R. Schneider, E. Spiller, T. Müller, C. Bostedt, M. Hoener, D.A. Shapiro, K.O. Hodgson, D. Van Der Spoel, F. Burmeister, M. Bergh, C. Caleman, G. Hultdt, M.M. Seibert, F.R.N.C. Maia, R.W. Lee, A. Szöke, N. Timneanu, J. Hajdu. *Nature Phys.*, **2** (12), 839 (2006). DOI: 10.1038/nphys461
- [17] S. Marathe, S.S. Kim, S.N. Kim, C. Kim, H.C. Kang, P.V. Nickles, D.Y. Noh. *Opt. Express*, **18** (7), 7253 (2010). DOI: 10.1364/OE.18.007253
- [18] M. Zürch, J. Rothhardt, S. Hädrich, S. Demmler, M. Krebs, J. Limpert, A. Tünnermann, A. Guggenmos, U. Kleineberg, C. Spielmann. *Scientific Reports*, **4** (1), 7356 (2014). DOI: 10.1038/srep07356
- [19] D.J. Batey, F. Van Assche, S. Vanheule, M.N. Boone, A.J. Parnell, O.O. Mykhaylyk, C. Rau, S. Cipiccia. *Phys. Rev. Lett.*, **126** (19), 193902 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.193902
- [20] И.А. Артюков, А.В. Виноградов, М.В. Горбунков, Ю.Я. Маслова, Н.Л. Попов. Краткие сообщения по физике ФИАН, **50** (10), 11 (2023).
- [21] Н.Л. Попов, И.А. Артюков, А.В. Виноградов, В.В. Протопопов. *УФН*, **190** (08), 820 (2020). DOI: 10.3367/UFN.2020.05.038775
- [22] J.M. Blackledge. *Quantitative coherent imaging* (Academic Press, 1989)
- [23] J.R. Fienup. *Appl. Optics*, **21** (15), 2758 (1982). DOI: 10.1364/AO.21.002758
- [24] Yu.M. Bruck, L.G. Sodin. *Opt. Commun.*, **30** (3), 304 (1979). DOI: 10.1016/0030-4018(79)90358-4
- [25] А.С. Бусаров, П.Ю. Глаголев, Н.Л. Попов. Вестн. Московского ун-та, серия 3: Физика, Астрономия, **79** (2), 2420206-1 (2024). DOI: 10.55959/MSU0579-9392.79.2420206
- [26] J. Miao, D. Sayre, H.N. Chapman. *J. Opt. Society of America A*, **15** (6), 1662 (1998). DOI: 10.1364/JOSAA.15.001662
- [27] S. Marchesini, H. He, H.N. Chapman, S.P. Hau-Riege, A. Noy, M.R. Howells, U. Weierstall, J.C.H. Spence. *Phys. Rev. B*, **68** (14), 140101 (2003). DOI: 10.1103/PhysRevB.68.140101
- [28] R.H.T. Bates, M.J. Mc. Donnell. *Image Restoration and Reconstruction* (Oxford University Press, Inc., 1986)
- [29] T.C. Beers, K. Flynn, K. Gebhardt. *Astronom. J.*, **100**, 32 (1990). DOI: 10.1086/115487
- [30] D.R. Luke. *Inverse Problems*, **21** (1), 37 (2005). DOI: 10.1088/0266-5611/21/1/004
- [31] Zh. Wang, A.C. Bovik, H.R. Sheikh, E.P. Simoncelli. *IEEE Transactions on Image Processing*, **13** (4), 600 (2004). DOI: 10.1109/TIP.2003.819861
- [32] Я.В. Ракшун, Ю.В. Хомяков, В.А. Чернов, И.А. Щелоков, И.В. Малышев, А.Е. Пестов, В.Н. Полковников, Д.Г. Руннов, М.Н. Торопов, Н.И. Чхало. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **5**, 3 (2023). DOI: 10.31857/S1028096023050126
- [33] G. Baranov, A. Bogomyagkov, I. Morozov, S. Sinyatkin, E. Levichev. *Phys. Rev. Accelerators and Beams*, **24** (12), 120704 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.24.120704
- [34] А.А. Седов, Н.А. Мезенцев, Я.В. Ракшун, А.Н. Савронов, Ю.В. Хомяков, В.А. Чернов, В.А. Шкаруба. ЖТФ (готовится к публикации)
- [35] I. Agapov, G. Geloni, S. Tomin, I. Zagorodnov. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, **768**, 151 (2014). DOI: 10.1016/j.nima.2014.09.057