

# X 射线衍射增强相衬成像相位信息提取方法研究\*

黄志峰<sup>1,1)</sup> 李政<sup>1</sup> 康克军<sup>1</sup> 朱佩平<sup>2</sup> 袁清习<sup>2</sup> 黄万霞<sup>2</sup>

王骞越<sup>2</sup> 黎刚<sup>2</sup> 章迪<sup>1</sup> 禹爱民<sup>1</sup>

1 (清华大学工程物理系 北京 100084)

2 (中国科学院高能物理研究所 北京 100049)

**摘要** 基于同步辐射的 X 射线衍射增强相衬成像有效地应用于低吸收轻物质(例如软组织)材料的内部结构检查,其关键技术是如何从 DEI 图像中提取出反映物体相位梯度信息的折射角图像.本文在综合研究了光学几何近似方法和多图统计方法等相位信息提取技术之后,提出了“统计-几何光学近似”相位信息提取的新方法,并在北京 BSRF 形貌站上进行了实验验证.实验表明,新方法能够大大提高光学几何近似求解的精确度和折射角图像的信噪比.

**关键词** 衍射增强成像 光学几何近似 摇摆曲线 同步辐射

## 1 引言

当 X 射线穿过物质时, X 射线的振幅和相位都会改变,具体表现为 X 射线除了发生吸收衰减作用外,还发生散射和折射等物理过程.对轻元素来说, X 射线的相移(Phase Shift)变化的程度要比 X 射线吸收衰减的程度要高 1000 倍以上<sup>[1]</sup>.

1995 年澳大利亚的 T.J.Davis<sup>[2]</sup> 等人使 X 光管发出的 X 射线经过单色晶体,然后透射过样品,再经过两个分析晶体,在胶片上得到蚊子等生物样品以及炭纤材料的衍射增强图像.1997 年美国 D.Chapman<sup>[3]</sup> 等人正式提出“衍射增强成像”(Diffraction enhanced imaging, DEI)的概念,并在此之后进行了包括 DEI 图像信息分离、DEI-CT、Multiple-image Radiography(MIR)<sup>[4]</sup> 等一系列研究.类似的 DEI 实验研究分别在包括 ESRF, Spring-8, ELETTRA 等同步辐射中心的相关实验室进行.

近年来,北京同步辐射装置(BSRF)形貌站使用两块晶体实现衍射增强相衬成像,并对其原理进行了理论推导和实验验证,其图像分辨率达到十微米量级<sup>[5, 6]</sup>.在这些工作的基础上,本文在研究和对比了具有代表性的 DEI 图像信息分离和相位梯度信息提取方法之后,提出了“统计-几何光学近似”相位信息提取

方法.

## 2 原理

### 2.1 衍射增强成像原理

X 射线在穿过物体时产生折射,其传播方向由相位梯度所决定<sup>[2]</sup>,折射角度为

$$\Delta\alpha \approx \frac{1}{k} \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x}, \quad (1)$$

其中  $k$  为波数,  $\Phi(x)$  为 X 射线相位函数.

衍射增强成像是 X 射线源和样品之间放置单色器晶体对 X 射线进行单色.另外使用一块放置在样品和探测器之间的分析晶体,利用布拉格衍射(Bragg Diffraction)原理对穿过样品的 X 射线进行选择.因为布拉格衍射角的范围在  $10^{-5}$  和  $10^{-6}$  rad 之间,而 X 射线的折射角度也在这个区域内,因此在分析晶体的摇摆曲线(Rocking Curve)不同位置上,可以得到折射光光强分布的 DEI 图像.

### 2.2 相位信息提取方法

如何从 DEI 图像中提取出反映相位梯度的信息成为 DEI 成像研究中的核心内容.自 1997 年以来信息提

\* 国家自然科学基金(10475044)资助

1) E-mail: huangzhif97@mails.tsinghua.edu.cn

取方法大致分为几何光学近似方法和多图统计方法两大类.

### 1) 几何光学近似方法

美国的 D.Chapman 等提出了基于几何光学一阶近似的信息分离方法. 设分析晶体的反射率函数(即摇摆曲线)为  $R(\theta)$ , 入射 X 射线强度为  $I_0$ , 出射 X 射线强度为  $I$ , 则有

$$I = I_0 R(\theta). \quad (2)$$

假设 X 射线折射角度  $\Delta\theta$  与摇摆曲线的 Darwin 宽度相比要小得多, 因此, 反射率函数在摇摆曲线位置  $\theta_0$  上采用泰勒展开并取一阶近似:

$$R(\theta_0 + \Delta\theta) = R(\theta_0) + R'(\theta_0)\Delta\theta. \quad (3)$$

在摇摆曲线半高宽的两边位置  $\theta_L, \theta_H$  各采集一幅 DEI 图像  $I_L, I_H$ , 分别代入式 (2), (3) 后, 联立方程组求解得到折射角图像:

$$\Delta\theta = \frac{I_H R(\theta_L) - I_L R(\theta_H)}{I_L R'(\theta_H) - I_H R'(\theta_L)}. \quad (4)$$

### 2) 多图统计方法

多图统计方法是对 O.Oltulu 的消光-折射-吸收分析(ERA)方法<sup>[7]</sup>、M.N.Wernick 的 MIR 方法<sup>[4]</sup>和 E.Pagot 的统计分析方法<sup>[8]</sup>等信息分离方法的统称. 这些方法均需要在摇摆曲线的  $N(\geq 20)$  个位置上分别采集 DEI 图像, 通过统计分析的方法分离出折射角信息:

$$\theta_s = \sum_{n=1}^N \theta_n I_s(n), \theta_{bg} = \sum_{n=1}^N \theta_n I_{bg}(n), \quad (5)$$

$$\Delta\theta = \theta_s - \theta_{bg},$$

其中  $I_s(n), I_{bg}(n)$  分别表示在摇摆曲线位置  $\theta_n$  上有无样品时的 DEI 图像.

## 2.3 “统计-几何光学近似”方法

D.Chapman 的几何光学近似方法的最大优点是只需要摇摆曲线上对称位置的两张 DEI 图像就可求解得到折射角的近似解. 但由于实验条件的限制, 特别是在同步辐射光源不太好, 或摇摆曲线不太对称的条件下, 绝对对称的位置不容易寻找, 因此它的折射角图像存在着较大的误差. 而且其它对称位置上得到折射角图像与半高宽对称位置上所得到的相比, 在数值上存在着明显的差异. 因此, 这种仅靠两张 DEI 图像分离出来的折射角图像和实际值之间的误差相当大.

而多图统计方法的优点在于能够减少误差. 只要在摇摆曲线上采集的位置越多, 那么所计算出来的统计结果将和实际值越接近, 而且并不需要关心摇摆曲线的实际形状和函数表达式.

因此, 结合以上两者的优点, 我们提出了“统计-几何光学近似”的相位信息提取方法.

根据统计方法的原理, 同样需要在摇摆曲线上采集  $N(\geq 4)$  对位置对称的 DEI 图像, 然后采用几何光学近似求解出折射角图像.

如果反射率函数采用泰勒展开一阶近似形式, 则把第  $n$  对的 DEI 图像  $I_l(n), I_h(n)$  代入式 (2) 和 (3) 后整理得到

$$(R'_l(n)I_h(n) - R'_h(n)I_l(n))\Delta\theta = (I_l(n)R_h(n) - I_h(n)R_l(n)), \quad (6)$$

式 (6) 两边累积  $N$  对 DEI 图像后求解得到折射角图像为

$$\Delta\theta = \frac{\sum_{n=1}^N [I_l(n)R_h(n) - I_h(n)R_l(n)]}{\sum_{n=1}^N [I_h(n)R'_l(n) - I_l(n)R'_h(n)]}. \quad (7)$$

如果反射率函数采用泰勒展开二阶近似形式:

$$R(\theta_0 + \Delta\theta) = R(\theta_0) + R'(\theta_0)\Delta\theta + 0.5R''(\theta_0)\Delta\theta^2. \quad (8)$$

同理可得到折射角图像的求解公式为

$$\Delta\theta = \min(\Delta\theta_1, \Delta\theta_2),$$

when,  $a_1(n) + a_2(n)\Delta\theta + a_3(n)\Delta\theta^2 > 0$ ,

$$\text{where, } \Delta\theta_{1,2} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A},$$

$$A = \sum_{n=1}^N [I_l(n)b_3(n) - I_h(n)a_3(n)], \quad (9)$$

$$B = \sum_{n=1}^N [I_l(n)b_2(n) - I_h(n)a_2(n)],$$

$$C = \sum_{n=1}^N [I_l(n)b_1(n) - I_h(n)a_1(n)],$$

$$a_1(n) = R_l(n), a_2(n) = R'_l(n), a_3(n) = 0.5R''_l(n),$$

$$b_1(n) = R_l(n), b_2(n) = R'_l(n), b_3(n) = 0.5R''_l(n).$$

分析式 (7) 和 (9) 可知, 使用位置非绝对对称的 DEI 图像所求解得到的折射角图像的误差在统计的意义下得到减小, 从而提高了光学几何近似求解的精确度.

## 3 实验

实验是在 BSRF 的形貌学实验站完成的. BSRF 的光源是电子能量为 2.2GeV 的 BEPC 储存环, 从扭摆器引出的同步光的能谱范围为 4—30keV, 在离光源点约 45m 的地方, 利用高精度的双晶体(最小转角步长

为0.05s)和空间分辨率为 $10.9\mu\text{m}$ 的Photonic Science X-ray FDI CCD相机组成最简单的衍射增强成像实验条件,实验装置如图1所示.样品到探测器的最小距离为300mm,双晶采用两块Si(111)晶体,对8keV的X射线,摇摆曲线的Darwin宽度为7.862s,如图2所示(空心点为实测点,实线为高斯函数拟合结果).通过高斯拟合得到 $R(\theta)$ 后,可求出它的一阶和二阶近似曲线.

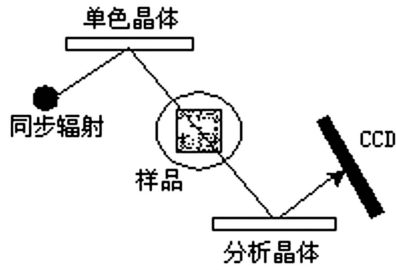


图1 实验装置

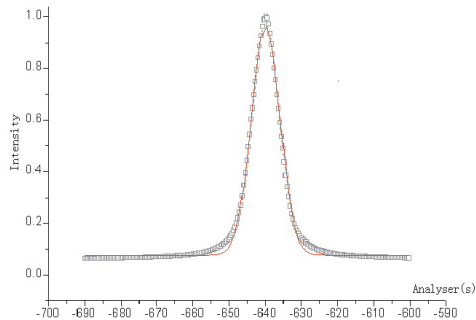


图2 摇摆曲线 $R(\theta)$

实验样品是体积 $2\times 4\times 2\text{mm}$ 大小的黑蚂蚁.在摇摆曲线上对称采集16对DEI图像后进行相位信息提取,分别完成下列计算:

a) 取摇摆曲线的半高宽对称位置两DEI图代入式(4),进行D.Chapman的几何光学近似方法提取折射角信息为 $R1(2)$ .

b) 使用32张DEI图像代入式(5)进行多图统计方法提取折射角信息为 $S(32)$ .

c) 使用32张分别两两对称的DEI图像代入(7)和(9)式进行“统计-几何光学近似”方法提取折射角信息为 $R1(32)$ 和 $R2(32)$ .

这3种方法之间的对比如图3和图4所示.

图3左右两边的两小图分别是中间图中矩形框里面的细节内容的放大图.从整体上看, $R1(2)$ 的图像质量明显比 $S(32)$ , $R1(32)$ , $R2(32)$ 要差许多,而且噪声相当严重,特别是蚂蚁前脚关节右边腿部几乎淹没在噪声里. $S(32)$ , $R1(32)$ , $R2(32)$ 的背景噪声相当均匀,但 $R1(32)$ , $R2(32)$ 在图像细节表现上比 $S(32)$ 要强.在图3中共选取3个地方(虚线圆形框 $P1$ , $P2$ ,

$P3$ )进行比较说明. $P1$ 位置为蚂蚁前脚关节处,此处对应图4中波谷的位置, $R1(32)$ 和 $R2(32)$ 的波谷要比 $S(32)$ 深,在图像上表现为颜色要比 $S(32)$ 黑. $P2$ 位置和 $P3$ 位置上表现的是蚂蚁脚掌上的绒毛.对比各图像可以发现, $R1(32)$ 和 $R2(32)$ 的绒毛细节要比 $S(32)$ 清晰很多,特别是 $P2$ 位置的绒毛在 $S(32)$ 几乎没有被看到.由此可知,“统计-几何光学近似”方法不仅噪声少,而且在细节表现力上比其它方法要强.另外从图4中发现, $R1(32)$ 和 $R2(32)$ 的值几乎重叠在一起,这一现象说明了“统计-几何光学近似”方法的一阶近似和二阶近似的结果差不多,所以在实际应用中采用一阶近似即可.因此,使用“统计-几何光学近似”方法得到的折射角图像具有相当高的图像质量.

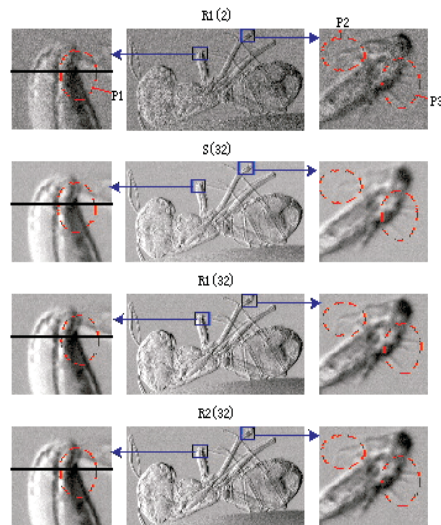


图3 蚂蚁的折射角图

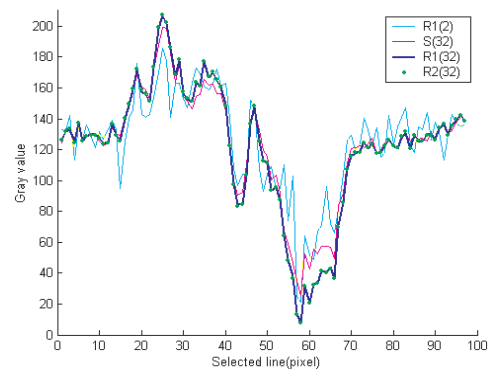


图4 在图3中左边小图的实线上的灰度数值比较

## 4 结论

本文实验验证了所提出的“统计-几何光学近似”相位信息提取方法,论证了它在统计意义下减少了非绝对对称位置的DEI图像所得的解析解的误

差, 从而提高了光学几何近似求解的精确度以及折射角图像的信噪比.

### 参考文献(References)

- 1 Atsushi Momuose et al. Analytical Sciences, 2001, **17**: 527—530
- 2 Davis T J, GAO D et al. Nature, 1995, **373**: 595—598
- 3 Chapman D, Thomlinson W et al. Phys. Med. Biol., 1997, **42**: 2015—2025
- 4 Miles N Wernick et al. Phys. Med. Biol., 2003, **48**: 3875—3895
- 5 ZHU P P, WANG J Y et al. Acta. Phys. Sin., 2005, **54**(1): 58—66 (in Chinese)  
(朱佩平, 王寓越等. 物理学报, 2005, **54**(1): 58—66)
- 6 JIANG X M, LI G at al. HEP&NP, 2004, **28**(12): 1282—1290(in Chinese)  
(姜晓明, 黎刚等. 高能物理与核物理, 2004, **28**(12): 1282—1290)
- 7 Oral Oltulu, Zhong Zhong, Moumen Hasnah et al. J. Phys. D: Appl. Phys., 2003, **36**: 2152—2156
- 8 Pagot E, Cloetens P, Fiedler S et al. Applied Physics Letters, 2003, **82**(20): 3421—3423

## Study on Extraction Method of Phase Information in X-Ray Diffraction Enhanced Imaging<sup>\*</sup>

HUANG Zhi-Feng<sup>1;1)</sup> LI Zheng<sup>1</sup> KANG Ke-Jun<sup>1</sup> ZHU Pei-Ping<sup>2</sup> YUAN Qing-Xi<sup>2</sup>  
HUANG Wan-Xia<sup>2</sup> WANG Jun-Yue<sup>2</sup> LI Gang<sup>2</sup> ZHANG Di<sup>1</sup> YU Ai-Min<sup>1</sup>

1 (Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

2 (Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

**Abstract** X-ray diffraction enhanced imaging (DEI) based on synchrotron radiation is effectively applied to the inspection of internal structures of weakly absorbing low-Z samples, such as soft issue. Its key problem is how to extract refractive angle images, which reflect phase gradients in samples, from DEI images. Geometric-optics approximation methods and statistical methods of multiple images are investigated in this paper. Then a new extraction method, named ‘statistical-geometric-optics approximation’, is brought forward. It is validated by experiments at BSRF and proved that it can improve the exactness of geometric-optics approximation solutions and the Signal to Noise Ratio (SNR) of refractive angle images.

**Key words** diffraction enhanced imaging, geometric-optics approximation, rocking curve, synchrotron radiation

<sup>\*</sup>Supported by National Natural Science Foundation of China(10475044)

1) E-mail: huangzhif97@mails.tsinghua.edu.cn