

МГУ им. М. В. Ломоносова

Физический факультет

Кафедра квантовой статистики и теории поля

Алгоритмы восстановления фазы для уточнения исследования  
методом рентгеновской голографии

Курсовая работа

Выполнил: Самсонов Владимир Викторович,  
студент 202 группы Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

Научный руководитель: Бычков Максим Евгеньевич,  
к.ф.-м.н., ассистент.

Научный консультант: Николаев Константин Владимирович,  
Ph.D. старший научный сотрудник, Курчатовский институт.

Москва 2022

## Введение

Беспрецедентные инструменты для получения изображений распределения кристаллической структуры стали возможными благодаря недавним достижениям в области источников рентгеновского излучения, рентгеновской оптики и рентгеновских методов. Когерентные нанопучки дают возможность получать изображения наноматериалов в трех измерениях с разрешением, которое намного меньше, чем размер сфокусированного пучка. Это открыло новые горизонты в области дифракции рентгеновских лучей и стало одним из основных факторов совершенствования существующих и строительства новых крупномасштабных научных инфраструктурных проектов по всему миру [1].

Биологические клетки, составляющие живые организмы, представляют собой крошечные ячейки размером всего 1-20 мкм, но являются эволюционно сложными системами. Для визуализации событий, происходящих в биологических клетках, были разработаны методы микроскопической визуализации. Когерентная рентгеновская дифракционная визуализация является одним из методов структурного анализа клеток и органелл [2].

Существует множество разных методик визуализации нанообъектов, однако в этой работе мы сфокусируемся на дифракционном рассеянии.

## Проблема потери фазы

Больше сотни лет назад, в 1912 году, работа Макса фон Лауэ позволила использовать рентгеновские лучи для изучения структуры различных кристаллических веществ. А в 1914 году он получил Нобелевскую премию за свою работу, однако метод был ограничен. Эксперимент позволяет измерить только амплитуду дифрагирующих лучей, но не их фазу.

«Фазовая проблема» - проблема восстановления формы волнового фронта объекта из измеренных распределений интенсивности [3].

## Экспериментальные методы, использующие алгоритмы восстановления фазы

### Когерентная дифракционная визуализация

Когерентная дифракционная визуализация (CDI) - это "безлинзовый" метод 2D или 3D реконструкции изображения наноразмерных структур, таких как нанотрубки, нанокристаллы, пористые нанокристаллические слои, различные дефекты, белки и многое другое.

Высококогерентный пучок рентгеновских лучей падает на объект, после чего луч, рассеянный объектом, формирует дифракционную картину в дальнем поле. Эта картина впоследствии используется для получения информации о структуре объекта.

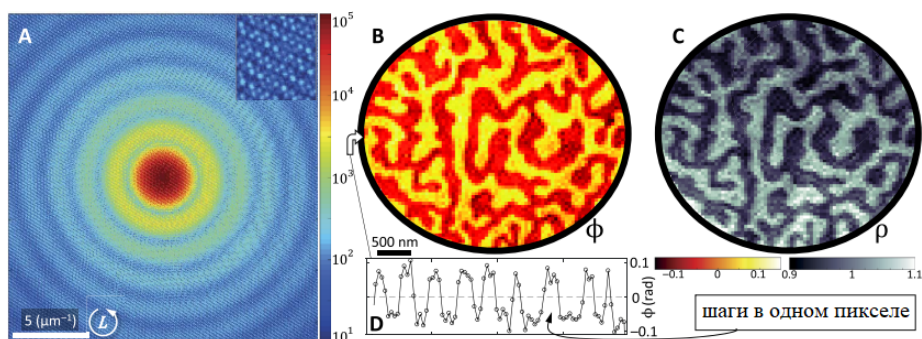


Рис. 1: Изображение магнитных доменов с разрешением 49 нм. (А) Полученная дифракционная картина с высокой видимостью спеклов (увеличенный угол). (В и С) Реконструкции CDI структуры магнитного домена с (В) фазовым и (С) амплитудным магнитооптическим контрастом соответственно [4].

В работе [4] с помощью CDI была восстановлена структура магнитных доменов (Рис. 1).

### Птихографические методы визуализации

Птихография - метод микроскопической визуализации, основанный на обработке многих когерентных интерференционных картин, которые были рассеяны от интересующего объекта.

Он не ограничен ни производственными проблемами, связанными с рентгеновской оптикой, ни требованиями к подготовке изолированных образцов, и в принципе обеспечивает разрешение, ограниченное длиной волны, а также позволяет решить фазовую проблему.

Птихография использует свертку в обратном пространстве Фурье между преобразованием Фурье конечной функции освещения и когерентной ди-

фракционной картиной. В реальном пространстве это соответствует измерению множества дифракционных картин путем сканирования по протяженному образцу.

## Голография

Многие исследования структуры вещества основаны на рентгеновских дифракционных исследованиях периодических структур и решении обратной задачи по восстановлению этой структуры. Но определение непериодических наноразмерных структур с помощью рентгеновских лучей гораздо сложнее. Исследование структуры с помощью анализа измеренных диаграмм интенсивности диффузного рентгеновского излучения сталкивается с проблемой потери информации о фазе, а прямые методы построения изображений ограничены в разрешении доступной рентгеновской оптикой.

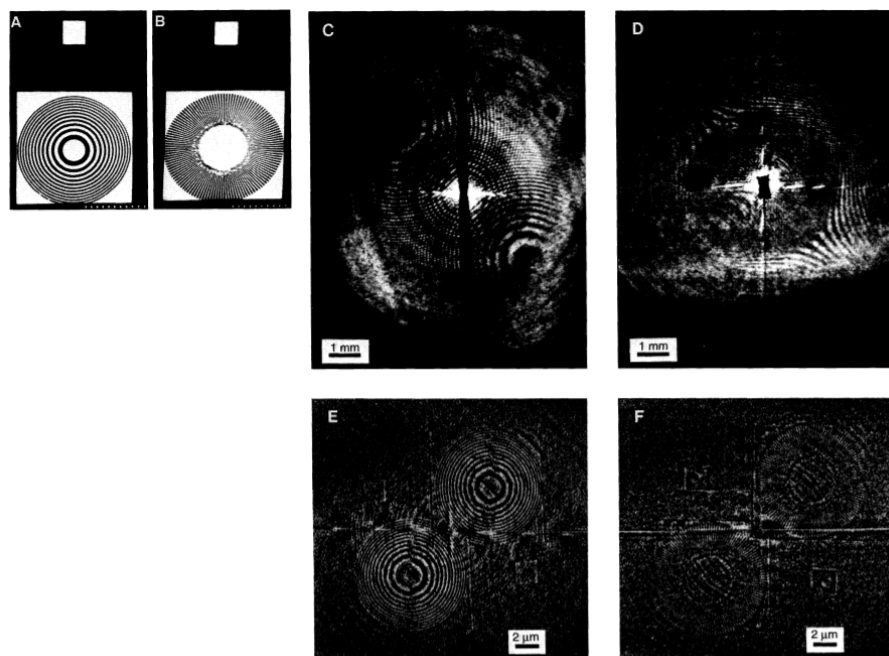


Рис. 2: (A, B) Исследуемые объекты. (C, D) - Голографические интерференционные картины объектов A и B. (E, F) - Результат восстановления структуры обратного Фурье преобразования голографических интерференционных картин C, D [5]

В работе [5] используется рентгеновская голография с фурье преобразованием для визуализации тестовых золотых объектов, размер которых не превышает 60 нанометров.

Устройство для записи голограмм использовало когерентное рентгеновское излучение с длиной волны 3,4 нм. Образец поместили рядом с фокусным пятном первого порядка, создаваемым зонной пластиной Френеля, другие же порядки освещают образец. Волна, рассеянная образцом, интерферировала со сферической опорной волной из фокального пятна, образуя голограмму с полосами низкой пространственной частоты. Она записывалась с помощью ПЗС-детектора, а изображение образца получалось с помощью реконструкции.

Эта работа (Рис. 2) показала отличную применимость метода рентгеновской голографии для визуализации плоских объектов.

### Флуоресцентная голография на тонких пленках

В работе [6] приводится пример того, как голография может быть использована для интерпретации данных XRR(коэффициент отражения жетского рентгеновского излучения) + XSW(рентгеновская стоячая волна). Был смоделирован многослойный профиль (Рис.3) Fe/Si/Ti/Ag/Au, верхний слой Fe которого был одноатомным. Была измерена зависимость интенсивности флуоресценции Fe от угла скольжения. Осцилляции, полученные из интенсивности флуоресценции, были преобразовано Фурье для получения структуры пленки без априорного знания.

То есть измеряя угловую зависимость интенсивности флуоресценции, можно получить немного информации о фазе, после чего можно анализировать структуру тонкопленочных образцов без априорных знаний.

Обычно с помощью эксперимента можно либо полностью измерить фазу, либо не получить её вовсе. Флуоресцентная голография на тонких пленках является новейшим методом микроскопической визуализации. И в данной работе было проведено исследование, как небольшое количество известной фазовой информации будет влиять на результаты восстановления, полученные с помощью итерационных алгоритмов восстановления фазы.

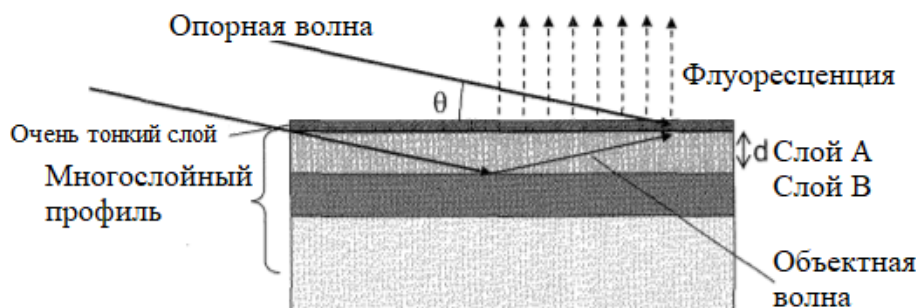


Рис. 3: Схема генерации голографического сигнала из многослойного материала при скользящем падении [6].

## Теоретическая часть

Для расчёта рассеяния когерентного излучения малой интенсивности применимо приближение Борна [7]. В этом приближении влиянием рассеянного излучения на конфигурацию поля вблизи рассеивающего объекта можно пренебречь. Как следствие, эффекты динамического рассеяния, связанные с многократным отражением и преломлением, не учитываются. Тем не менее, приближение Борна позволяет удобно представить процесс рассеяния в виде Фурье пары оригинал-образ:

$$I(q) \sim |\mathcal{F}[f(z)]|^2 = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) \exp[-iqz] dz \right|^2$$

Где  $I(q)$  - интенсивность рассеянного излучения. Функция  $f$  содержит в себе информацию о структуре рассеивающего объекта. В зависимости от эксперимента и объекта это может быть форма, оптическая плотность, кристаллическая структура, корреляционная функция. Реконструировать функцию  $f$  непосредственно из экспериментальных данных обратным преобразованием Фурье невозможно, так как фаза в дальнем поле не измерима.

Но предположим, что у нас есть априорная информация об объекте: его размере, физических свойствах, области пространства, в которой он расположен, - носитель  $\gamma = \{z : f(x) \neq 0\}$

Если носитель достаточно мал, то есть возможность реконструировать фазу рассеивающего объекта при помощи интерационных алгоритмов восстановления фазы.

Наиболее популярным итеративным алгоритмом фазового поиска является алгоритм уменьшения ошибок (ER), который был введен J.R. Fienup [8]. Ниже приведены некоторые необходимые сведения об этом алгоритме. Задача состоит в том, чтобы восстановить комплекснозначное распределение объекта  $f(z)$  из измеренного распределения интенсивности  $I(q)$ . Реконструкция выполняется путем применения итерационной процедуры, как показано на рис. 4.

Шаги алгоритма восстановления на  $k$ -ой итерации:

$$(I) \hat{f}_k(q) = |\hat{f}_k(q)| \exp[i\phi_k(q)] = \mathcal{F}[f_k(z)]$$

$$(II) \hat{f}'_k(q) = \sqrt{I(q)} \exp[i\phi_k(q)]$$

$$(III) f'_k(z) = |f'_k(z)| \exp[i\theta'_k(z)] = \mathcal{F}^{-1}[\hat{f}'_k(q)]$$

$$(IV) f_{k+1}(z) = \begin{cases} f'_k(z), & \text{если } z \in \gamma \\ 0, & \text{если } z \notin \gamma \end{cases}$$

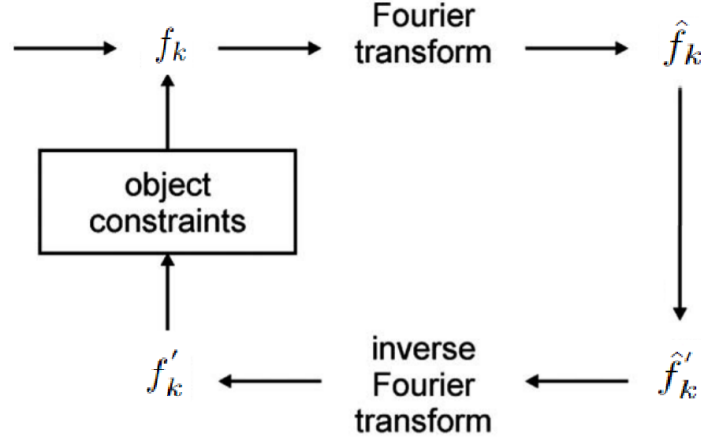


Рис. 4: Схема алгоритма уменьшения ошибки[9].

На первом шаге берется Фурье преобразование от  $f_k$  (приближенная от искомой функции  $f$ ). Во второй операции, используя приближение Борна, амплитуда Фурье образа  $\hat{f}_k$  меняется на корень из амплитуды рассеянной волны  $\sqrt{I}$  (её мы получаем из эксперимента). На третьем шаге берем обратное преобразование Фурье и получаем некоторое приближение  $f'_k$ . На четвертой операции воспользуемся априорной информацией об объекте, что он находится в области  $\gamma$ .

Название "алгоритм уменьшения ошибки" исходит от того, что ошибка, определяемая как  $E_k = \|\hat{f}_k - \hat{f}'_k\|^2 = \|\sqrt{I} - |\hat{f}_k|\|^2$ , уменьшается на каждой итерации алгоритма. Докажем это с помощью четырёх утверждений. Утверждение 1:

$$E_{k+1} = \|\hat{f}_{k+1} - \hat{f}'_{k+1}\|^2 \leq \|\hat{f}_{k+1} - \hat{f}'_k\|^2$$

Чтобы удостовериться в этом, распишем подробнее обе части неравенства:

$$\begin{aligned} |\hat{f}_{k+1} - \hat{f}'_{k+1}|^2 &= |\hat{f}_{k+1}|^2 + I - 2\sqrt{I}|\hat{f}_{k+1}| \\ |\hat{f}_{k+1} - \hat{f}'_k|^2 &= |\hat{f}_{k+1} \exp[i\phi_{k+1}] - \hat{f}'_k \exp[i\phi_k]|^2 = \\ &(|\hat{f}_{k+1} \exp[i\phi_{k+1}] - \hat{f}'_k \exp[i\phi_k]|)(|\hat{f}_{k+1} \exp[-i\phi_{k+1}] - \hat{f}'_k \exp[-i\phi_k]|) = \\ &|\hat{f}_{k+1}|^2 + I - \sqrt{I}|\hat{f}_{k+1}|(\exp[i(\phi_k - \phi_{k+1})] - \exp[-i(\phi_k - \phi_{k+1})]) \end{aligned}$$

Как видно, последняя скобка равна  $2\cos(\delta) \leq 2$ . Что и требовалось доказать.

Утверждение 2(следует из теоремы Парсеваля:  $\|f\|^2 = \|\mathcal{F}[f]\|^2$ ):

$$\|\hat{f}_{k+1} - \hat{f}'_k\|^2 = \|\mathcal{F}^{-1}(\hat{f}_{k+1} - \hat{f}'_k)\|^2 = \|f_{k+1} - f'_k\|^2$$

Утверждение 3:

$$\|f_{k+1} - f'_k\|^2 \leq \|f_k - f'_k\|^2$$

Утверждение 4(аналогично второму):

$$\|f_k - f'_k\|^2 = \|\hat{f}_k - \hat{f}'_k\|^2 = E_k$$

Таким образом,  $E_{k+1} = \|\hat{f}_{k+1} - \hat{f}'_{k+1}\|^2 \leq \|\hat{f}_k - \hat{f}'_k\|^2 = E_k$ . То есть на каждой итерации алгоритма функционал ошибки  $E_k$  уменьшается. Но отметим, что уменьшение  $E_k$  не гарантирует успешность восстановления  $f$ .  $E_k$  может обладать локальными минимумами, и алгоритм гарантирует лишь нахождение одного из этих минимумов.

## Частотный эксперимент

Для генерирования экспериментальных данных была взята функция (Рис. 5):

$$f(t) = \frac{1}{\frac{1}{4}\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(t-4)^2}{0,25}} + \frac{1}{\frac{1}{2}\sqrt{2\pi}} e^{-(t-6)^2}.$$

Потом была найдена амплитуда  $A = \sqrt{I} = \sqrt{|\mathcal{F}[f(t)]^2|}$ , которую мы можем

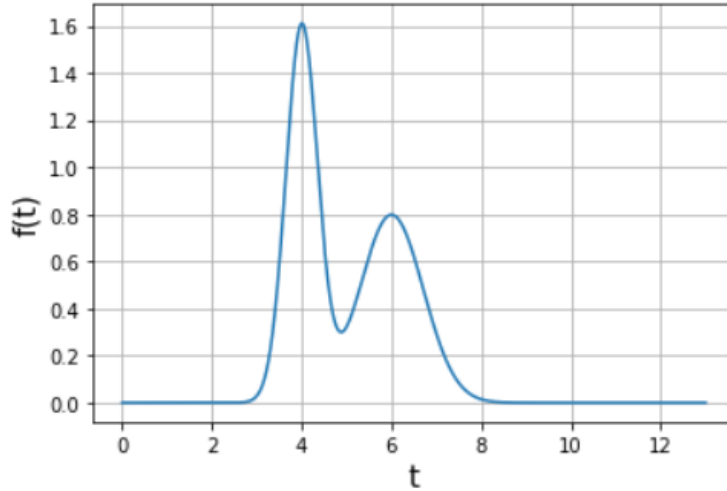


Рис. 5: Функция для генерирования экспериментальных данных.

измерить с помощью эксперимента. Далее была наложена маска, то есть взята случайная фаза от  $-\pi$  до  $\pi$ .

На рис. 6 представлено восстановление функции  $f(t)$  с помощью алгоритма уменьшения ошибки. Как видно, есть отклонения от оригинала, однако общий вид объекта сохранен.

Далее мы проверяли, что будет происходить с функционалом ошибки  $E_k$ , если "дать" алгоритму восстановления немного фазы. Небольшую часть



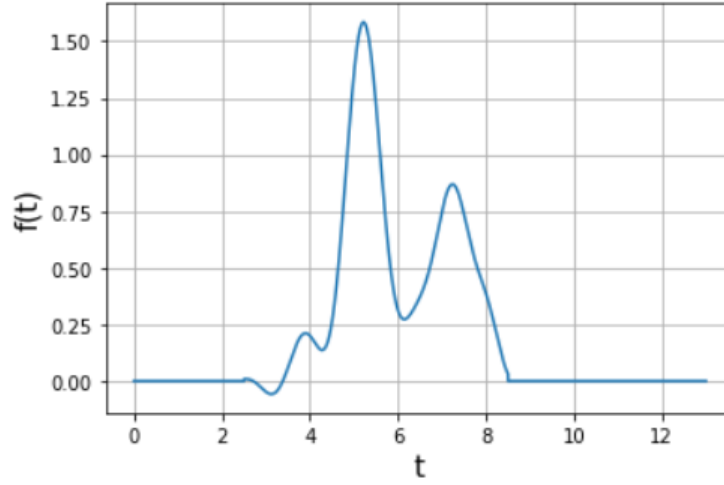


Рис. 6: Восстановление функции  $f(t)$ , выполненное с помощью алгоритма уменьшения ошибки.

фазы можно получить с помощью измерения интенсивности флуоресценции в эксперименте:

$$I_f \sim \int_{-d}^0 |E(z)|^2 \exp[-\mu z] dz \sim 1 + R + \sqrt{R} \cos(\delta\phi),$$

где  $\mu$  - коэффициент поглощения,  $d$  - толщина многослойной структуры,  $R$  - функция отражательной способности.

На рис. 7 показана зависимость функционала ошибки от номера итерации в зависимости от количества известной фазы. Мы видим, что если дать алгоритму слишком много фазы, то он сойдётся за один "оборот". В остальных случаях функционал ошибки сходится примерно к одному и тому же числу.

На рис. 8 продемонстрирована зависимость среднеквадратичного отклонения функционала ошибки от номера итерации. Как видно, в зависимости от количества известной фазы скорость сходимости алгоритма может быть различной. Алгоритм с 7,2% известной фазы сходится быстрее, чем алгоритм без известной фазы, а с 14,4% - медленнее.

## Выводы

В данной работе была продемонстрирована работоспособность алгоритма восстановления фазы, а также проанализировано изменение функционала ошибки алгоритма в зависимости от известной фазы.

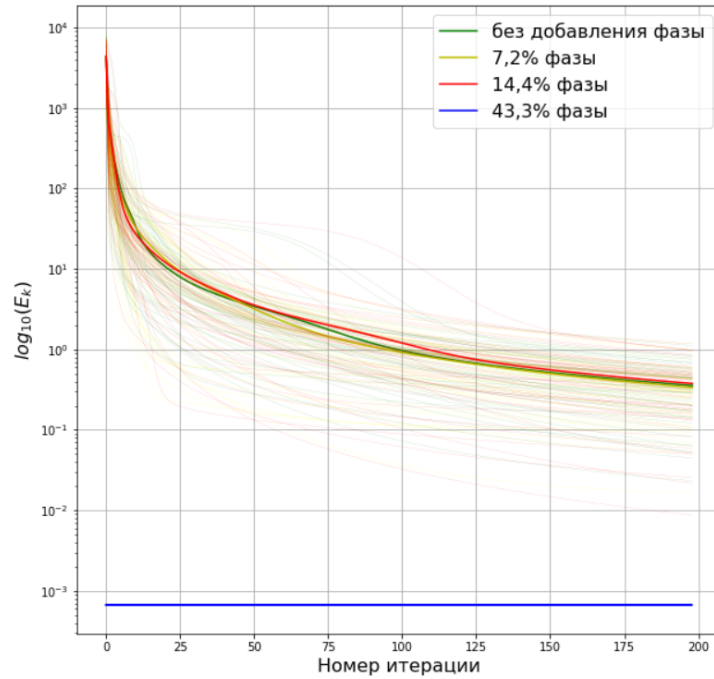


Рис. 7: График зависимости функционала ошибки от номера итерации.

Если дать алгоритму немного известной фазы, то скорость сходимости увеличится, а она является очень важным параметром при проведении реального эксперимента. Однако если дать слишком много фазы, то скорость сходимости алгоритма уменьшится, что негативно отразится на результатах восстановления.

В дальнейшем нужно будет попробовать аналитически вывести, сколько известной фазы необходимо дать алгоритму, чтобы его скорость сходимости максимально увеличилась.

## Список литературы

- [1] X-ray nanobeam diffraction imaging of materials Tobias U. Schüllli, Steven J. Leake ESRF, The European Synchrotron, 71 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble, France
- [2] Methods and application of coherent X-ray diffraction imaging of noncrystalline particles Masayoshi Nakasako, Amane Kobayashi, Yuki Takayama, Kenta Asakura, Mao Oide, Koji Okajima, Tomotaka Oroguchi, Masaki Yamamoto // 16 March 2020

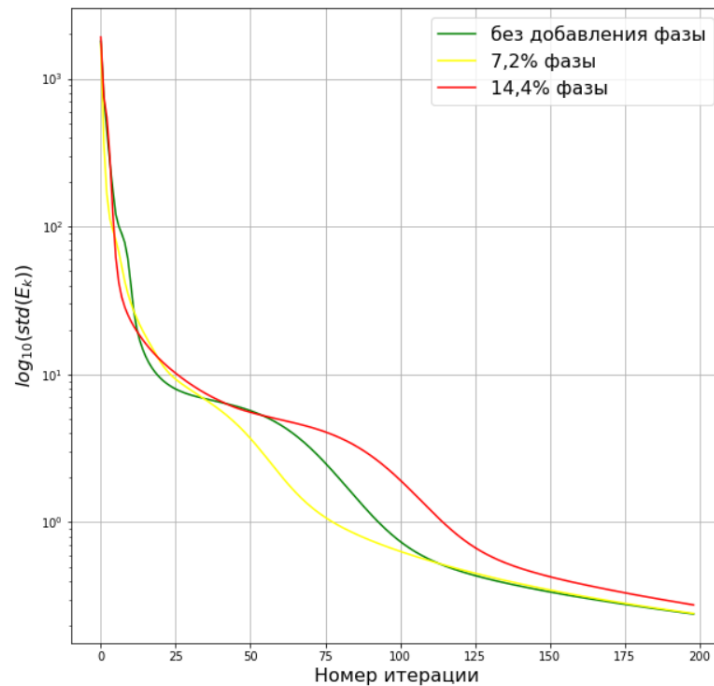


Рис. 8: График зависимости среднеквадратичного отклонения функционала ошибки от номера итерации.

[3] Кузнецова Т.И. О фазовой проблеме в оптике // УФН. – 1988. – 154. – С. 677–690.

[4] Nanoscale magnetic imaging using circularly polarized high-harmonic radiation  
Ofer Kfir Sergey Zayko Christina Nolte Murat Sivils Marcel Möller Birgit Hebler  
Sri Sai Phani Kanth Arekapudi Daniel Steil Sascha Schäfer Manfred Albrecht  
tOren Cohen Stefan Mathias Claus Ropers. // Sci. Adv., 3 (12), eaao4641. •  
DOI: 10.1126/sciadv.aao4641.

[5] High-resolution imaging by fourier transform x-ray holography / Ian McNulty,  
Janos Kirz, Chris Jacobsen et al. // Science. — 1992. — Vol. 256, no. 5059. —  
P. 1009–1012.

[6] Transactions of the Materials Research Society of Japan 32[1] 215-218 (2007)

[7] The born approximation in the theory of the scattering of elastic waves by  
flaws / JE Gubernatis, E Domany, JA Krumhansl, M Huberman // Journal of  
Applied Physics. — 1977. — Vol. 48, no. 7. — P. 2812–2819.

[8] J. R. Fienup, “Phase retrieval algorithms: a comparison,” Appl. Opt. 21, 2758–2769 (1982).

[9] Latychevskaia T. Iterative phase retrieval in coherent diffractive imaging: practical issues // Applied optics. — 2018. — Vol. 57, no. 25. — P. 7187–7197.