

DOI:10.22144/ctu.jsi.2020.097

KHẢO SÁT KHẢ NĂNG PHỤC HỒI ẢNH CỦA THUẬT TOÁN TÍCH CHẬP TRONG PHƯƠNG PHÁP CHỤP ẢNH NHIỀU XẠ SỬ DỤNG CHùm TIA X KẾT HỢP KHÔNG HOÀN TOÀN

Trần Nhân Giang^{1*}, Nguyễn Tấn Được¹, Nguyễn Thị Mỹ Lệ² và Bùi Hoàng Minh³

¹Bộ môn Vật lý Hạt nhân – Kỹ thuật Hạt nhân, Khoa Vật lý – Vật lý Kỹ thuật, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh

²Bộ môn Vật lý, Khoa Khoa học Ứng dụng, Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Thành phố Hồ Chí Minh

³Bộ môn Y học Hạt nhân, Khoa Y, Trường Đại học Y Dược Thành phố Hồ Chí Minh

*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Trần Nhân Giang (email: tngiang@hcmus.edu.vn)

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 04/03/2020

Ngày nhận bài sửa: 25/03/2020

Ngày duyệt đăng: 29/06/2020

Title:

Image reconstruction in single-shot coherent diffractive imaging using partially coherent X-ray beams with convolutional approach

Từ khóa:

Phương pháp chụp ảnh nhiễu xạ sử dụng tia X kết hợp, thuật toán phục hồi ảnh, tính chất kết hợp

Keywords:

Coherent X-ray diffractive imaging, phase retrieval algorithm, coherence properties

ABSTRACT

This research is aimed to investigate the ability of the convolutional algorithm to reconstruct the image of sample in coherent diffractive imaging using partially coherent X-ray beams. This work is performed using different degrees of coherence for the illuminating wavefield and different types of sample. The obtained results in this research allow to explore the ability to apply the convolutional algorithm in single-shot coherent diffractive imaging using partially coherent X-ray beams.

TÓM TẮT

Nghiên cứu này được thực hiện nhằm khảo sát khả năng phục hồi ảnh của thuật toán tích chập trong phương pháp chụp ảnh nhiễu xạ sử dụng chùm tia X kết hợp không hoàn toàn. Nghiên cứu được thực hiện bằng việc sử dụng chùm tia X tới với các mức độ kết hợp khác nhau và các loại mẫu khác nhau nhằm khảo sát khả năng phục hồi ảnh của thuật toán tích chập ở những điều kiện khác nhau. Kết quả đạt được trong nghiên cứu này cho phép đánh giá khả năng áp dụng của thuật toán tích chập trong phương pháp chụp ảnh nhiễu xạ sử dụng tia X kết hợp không hoàn toàn.

Trích dẫn: Trần Nhân Giang, Nguyễn Tấn Được, Nguyễn Thị Mỹ Lệ và Bùi Hoàng Minh, 2020. Khảo sát khả năng phục hồi ảnh của thuật toán tích chập trong phương pháp chụp ảnh nhiễu xạ sử dụng chùm tia X kết hợp không hoàn toàn. Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 56(Số chuyên đề: Khoa học tự nhiên)(1): 90-97.

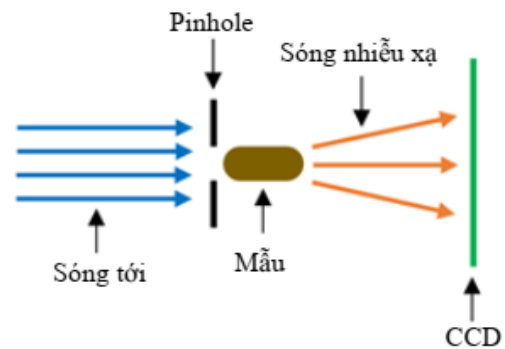
1 GIỚI THIỆU

Chụp ảnh nhiễu xạ sử dụng tia X kết hợp (coherent X-ray diffractive imaging – CDI) là một trong những phương pháp đầy triển vọng được sử

dụng trong việc phục hồi ảnh của các mẫu cô lập, có cấu trúc không tuần hoàn (Miao *et al.*, 1999). Phương pháp CDI được thực hiện bằng cách sử dụng một chùm tia X tới chiếu vào mẫu cần được chụp, chùm tia X sẽ tương tác với mẫu, bị nhiễu xạ và

mang thông tin về cấu trúc của mẫu. Chùm tia nhiều xạ này sau khi đi ra khỏi mẫu sẽ được ghi nhận bởi một máy dò (detector) được đặt ở một khoảng cách phía sau mẫu. Máy dò được sử dụng trong phương pháp này là máy dò CCD – charged coupled device (Boyle and Smith, 1970). Hình 1 minh họa một bố trí thí nghiệm trong phương pháp CDI. Cường độ nhiều xạ ghi nhận bằng máy dò được sử dụng để phục hồi lại ảnh của mẫu bằng các phương pháp lặp (Gerchberg and Saxton, 1971; Fienup, 1978; Fienup, 1982). Vì CDI không sử dụng các thấu kính tạo ảnh giống như các phương pháp chụp ảnh truyền thống nên độ phân giải của ảnh được phục hồi không phụ thuộc vào độ phân giải của các thấu kính tạo ảnh đồng thời loại bỏ được ảnh hưởng của các hiệu ứng quang sai của thấu kính đối với độ phân giải của ảnh. Tuy nhiên chất lượng của ảnh thu được lại phụ thuộc vào tính chất kết hợp của chùm tia tới (Spence *et al.*, 2004; Williams *et al.*, 2007). Cụ thể ảnh thu được có chất lượng tốt nhất khi chùm tia tới kết hợp hoàn toàn. Điều này khó có thể đạt được khi các nguồn tia X trong thực tế không kết hợp hoàn toàn cho dù đó là nguồn synchrotron hay nguồn laser electron tự do tia X (Paterson *et al.*, 2001; Vartanyants and Singer, 2010). Vì vậy yêu cầu đặt ra là phải phát triển một phương pháp có thể tính đến khả năng kết hợp của chùm tia tới vào quá trình phục hồi ảnh để có thể đạt được ảnh có chất lượng tốt nhất khi sử dụng các nguồn kết hợp không hoàn toàn này. Đến nay đã có nhiều công trình được thực hiện nhằm giải quyết vấn đề trên. Một trong những phương pháp được phát triển đầu tiên là công trình của Whitehead *et al.* (2009) nhằm tận dụng tính chất kết hợp đo được từ các phương pháp khác (Paterson *et al.*, 2001) vào quá trình phục hồi ảnh. Trong phương pháp này, chùm tia X tới được phân tích thành nhiều trạng thái khác nhau (modes) và đóng góp của từng trạng thái được quyết định bởi trị riêng của chúng (eigenvalues). Từng trạng thái riêng lẻ của chùm tia được xem như kết hợp hoàn toàn và các trạng thái này không kết hợp lẫn nhau. Cường độ nhiều xạ trong phương pháp này được tính toán bằng việc tính tổng các cường độ nhiều xạ riêng lẻ từ các trạng thái khác nhau nhân với trị riêng của chúng. Kết quả đạt được từ nghiên cứu này đã mở ra một hướng tiếp cận mới cho phương pháp CDI trong việc sử dụng chùm tia X kết hợp không hoàn toàn. Bên cạnh đó, Tran *et al.* (2017) đã thành công trong việc phát triển phương pháp CDI sử dụng chùm tia X kết hợp không hoàn toàn bằng phương pháp phân tích chùm tia X tới thành các trạng thái khác nhau. Trong phương pháp này, tính chất kết hợp của chùm tia tới không cần phải xác định trước bằng những phương pháp khác. Thay vào đó, các trạng thái tự do và các

trọng số của chúng được xây dựng từ một tập hợp các hệ số và các hệ số này sẽ được phục hồi đồng thời với quá trình phục hồi ảnh. Nghiên cứu này mở ra cơ hội ứng dụng các chùm tia không biết trước đặc tính hoặc có đặc tính phức tạp vào phương pháp CDI. Ngoài ra, Clark and Peele (2011) đã sử dụng một mô hình Gauss – Schell đơn giản cho chùm tia X tới và sử dụng phương pháp tích chập để phục hồi đồng thời ảnh của mẫu và độ dài kết hợp của chùm tia tới từ cường độ nhiều xạ được ghi nhận ở các lần chiếu riêng lẻ. Nghiên cứu này thành công khi áp dụng phương pháp tích chập vào việc phục hồi ảnh của mẫu trong phương pháp CDI sử dụng chùm tia kết hợp không hoàn toàn. Mặc dù mỗi phương pháp đã đạt được những thành công riêng nhưng chưa có phương pháp nào tiến hành khảo sát khả năng phục hồi ảnh ở những mức độ kết hợp khác nhau của chùm tia tới. Do vậy, nghiên cứu này được tiến hành nhằm khảo sát khả năng phục hồi ảnh khi chùm tia tới có các mức độ kết hợp khác nhau bằng phương pháp tích chập. Bên cạnh đó mẫu được sử dụng trong nghiên cứu này cũng được thay đổi để đánh giá phương pháp tích chập ở các trường hợp khác nhau. Kết quả đạt được trong nghiên cứu này làm cơ sở để thiết kế các thí nghiệm CDI và tạo tiền đề cho những nghiên cứu ứng dụng CDI sử dụng các chùm tia kết hợp không hoàn toàn bằng phương pháp tích chập với cường độ nhiều xạ được ghi nhận ở các lần chiếu riêng lẻ.



Hình 1: Sơ đồ minh họa một thí nghiệm CDI

2 CƠ SỞ LÝ THUYẾT

Nghiên cứu được thực hiện nhằm đánh giá khả năng phục hồi ảnh của thuật toán tích chập trong phương pháp CDI sử dụng chùm tia kết hợp không hoàn toàn. Kết quả đạt được dựa vào quá trình mô phỏng đối với các loại mẫu khác nhau, sử dụng chùm tia tới kết hợp không hoàn toàn. Trong phần này, các khái niệm và cơ sở lý thuyết của nghiên cứu sẽ được trình bày.

2.1 Tính chất kết hợp của chùm tia X

Tính chất kết hợp của chùm tia tới thể hiện sự tương quan theo không gian và thời gian giữa các điểm trong chùm tia, lần lượt được gọi là kết hợp không gian và kết hợp thời gian. Trong phạm vi của nghiên cứu này, tính chất kết hợp không gian sẽ được khảo sát, do vậy, tính chất kết hợp không gian sẽ được đề cập đến mỗi khi nhắc đến tính chất kết hợp trong nghiên cứu này.

Tia X phát ra từ nguồn synchrotron được giả sử tuân theo mô hình Gauss – Schell (Coisson and Marchesini, 1997; Vartanyants and Singer, 2010) và chùm tia X được phát ra từ nguồn đi tới mẫu được miêu tả bằng mật độ phổ tổng như sau:

$$W_S(s_1, s_2) = \sqrt{S_S(s_1)} \sqrt{S_S(s_2)} \mu_S(s_2 - s_1) \quad (1)$$

trong đó $S_S(s_1)$, $S_S(s_2)$ và $\mu_S(s_2 - s_1)$ lần lượt là cường độ chùm tia và hàm kết hợp tại nguồn và được miêu tả lần lượt như sau:

$$S_S(s) = S_{0x} S_{0y} \exp\left(-\frac{s_x^2}{2\sigma_{Sx}^2} - \frac{s_y^2}{2\sigma_{Sy}^2}\right) \quad (2)$$

và

$$\mu_S(s_2 - s_1) = \exp\left[-\frac{(s_{2x} - s_{1x})^2}{2\xi_{Sx}^2} - \frac{(s_{2y} - s_{1y})^2}{2\xi_{Sy}^2}\right] \quad (3)$$

ở đây $\sigma_{Sx,y}$ lần lượt là giá trị căn quân phương (rms) của độ lớn chùm tia tại nguồn theo 2 phương x và y; $\xi_{Sx,y}$ lần lượt là độ dài kết hợp theo hai phương x và y; $s_1 = (s_{1x}, s_{1y})$ và $s_2 = (s_{2x}, s_{2y})$ lần lượt là tọa độ tại điểm 1 và 2.

Trong thực tế, tia X phát ra từ hầu hết các nguồn synchrotron đạt được mức độ kết hợp hoàn toàn theo phương y. Vì vậy, nghiên cứu này chỉ khảo sát sự ảnh hưởng của mức độ kết hợp theo phương x đối với khả năng phục hồi ảnh trong phương pháp CDI bằng cách thay đổi giá trị của độ dài kết hợp, ξ_{Sx} .

2.2 Cường độ nhiễu xạ kết hợp không hoàn toàn

Cường độ nhiễu xạ kết hợp không hoàn toàn ghi nhận bởi máy dò được tính toán trên lý thuyết bằng việc lấy tích chập cường độ nhiễu xạ kết hợp hoàn toàn với biến đổi Fourier của hàm kết hợp và được miêu tả như sau (Clark and Peele, 2011):

$$I_p(k_x, k_y) = I_f(k_x, k_y) \otimes \hat{\mu}(k_x, k_y) \quad (4)$$

trong đó $I_p(k_x, k_y)$ và $I_f(k_x, k_y)$ lần lượt là cường độ nhiễu xạ kết hợp không hoàn toàn và cường độ

nhiều xạ kết hợp hoàn toàn; $\hat{\mu}(k_x, k_y)$ là biến đổi Fourier của hàm kết hợp.

Phương trình (4) cho thấy rằng cường độ nhiễu xạ kết hợp không hoàn toàn là kết quả sau khi làm mờ cường độ nhiễu xạ kết hợp hoàn toàn bằng một hàm Gauss. Vì vậy, chất lượng của ảnh được phục hồi từ cường độ nhiễu xạ kết hợp không hoàn toàn kém hơn so với ảnh được phục hồi từ cường độ nhiễu xạ kết hợp hoàn toàn, cụ thể chất lượng ảnh sẽ bị ảnh hưởng bởi hàm $\hat{\mu}(k_x, k_y)$. Mức độ mờ của cường độ nhiễu xạ kết hợp không hoàn toàn phụ thuộc vào độ dài kết hợp hay mức độ kết hợp. Trong nghiên cứu này, các mức độ mờ tương ứng với các mức độ kết hợp khác nhau sẽ được khảo sát nhằm đánh giá khả năng phục hồi ảnh của phương pháp tích chập trong phương pháp CDI.

2.3 Các thuật toán phục hồi ảnh

Có nhiều thuật toán phục hồi ảnh được áp dụng thành công trong phương pháp CDI, nhưng trong phạm vi của nghiên cứu này, hai phương pháp phổ biến nhất, Error Reduction (ER) (Gerchberg and Saxton, 1971; Fienup, 1978) và Hybrid Input-Output (HIO) (Fienup, 1982), được sử dụng và sẽ được giải thích cho quá trình phục hồi ảnh.

2.3.1 Thuật toán error reduction

Thuật toán error reduction (ER) được phát triển đầu tiên bởi Gerchberg and Saxton (Gerchberg and Saxton, 1971), sau đó được cải tiến bởi Fienup (Fienup, 1978). Dữ liệu đầu vào cho thuật toán này là support constraint, cường độ nhiễu xạ và ảnh của mẫu được dự đoán ban đầu. Support constraint là vùng không gian định nghĩa ảnh của mẫu. Vùng không gian này sẽ được điều chỉnh trong quá trình phục hồi ảnh cho phù hợp với ảnh của mẫu sử dụng thuật toán shrinkwrap (Marchesini *et al.*, 2003).

Thuật toán ER bắt đầu bằng việc dự đoán giá trị ban đầu cho ảnh của mẫu. Giá trị dự đoán này là một mảng hai chiều ngẫu nhiên, $T(x, y)$. Sau khi chùm tia tới, $\psi(x, y)$, tương tác với mẫu và đi ra khỏi mẫu, các tia nhiễu xạ phía sau mẫu mang thông tin về cấu trúc của mẫu được gọi là exit surface wave (esw), $\Psi_{esw}(x, y)$ và được viết như sau:

$$\Psi_{esw}(x, y) = \psi(x, y) \times T(x, y) \quad (5)$$

trong đó x và y lần lượt là các tọa độ tại mặt phẳng mẫu.

$\Psi_{esw}(x, y)$ sau đó được lan truyền đến máy dò thông qua phép biến đổi Fourier và hàm sóng tại mặt phẳng máy dò được biểu diễn như sau:

$$\widehat{\Psi}_{esw}(k_x, k_y) = \mathfrak{F}^+[\psi_{esw}(x, y)] \quad (6)$$

với \mathfrak{F}^+ là ký hiệu phép biến đổi Fourier và k_x và k_y lần lượt là các tọa độ trong không gian Fourier hay không gian tần số.

Bước tiếp theo trong thuật toán này là tính toán cường độ nhiễu xạ toàn phần, $I_{cal.}(k_x, k_y)$:

$$I_{cal.}(k_x, k_y) = |\widehat{\Psi}_{esw}(k_x, k_y)|^2 \quad (7)$$

Giá trị của hàm sóng esw tại máy dò sau đó được thay đổi bằng việc so sánh cường độ nhiễu xạ tính toán được trên lý thuyết và cường độ nhiễu xạ đo được bằng máy dò. Quá trình này gọi là áp dụng modulus constraint, nghĩa là chỉnh sửa hàm sóng được dự đoán trên lý thuyết cho phù hợp với giá trị thực tế, quá trình này được biểu diễn bởi phương trình sau:

$$\widehat{\Psi}'_{esw}(k_x, k_y) = \widehat{\Psi}_{esw}(k_x, k_y) \times \frac{\sqrt{I_{meas.}}}{\sqrt{I_{cal.}}} \quad (8)$$

với $\widehat{\Psi}'_{esw}(k_x, k_y)$ là hàm sóng đạt được sau khi chỉnh sửa và $I_{meas.}$ là cường độ nhiễu xạ thực tế ghi nhận được bằng máy dò.

Để đánh giá sự phù hợp giữa cường độ nhiễu xạ tính toán trên lý thuyết và cường độ nhiễu xạ thực tế, đại lượng χ^2 được tính như sau:

$$\chi^2 = \frac{\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{M-1} \left(\sqrt{I_{meas.}^{ij}} - \sqrt{I_{cal.}^{ij}} \right)^2}{\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{M-1} I_{meas.}^{ij}} \quad (9)$$

ở đây M, N lần lượt là số pixel theo hai phương x và y .

Sau khi áp dụng modulus constraint, hàm sóng được lan truyền ngược lại mặt phẳng mẫu bằng phương pháp biến đổi Fourier ngược để đạt được hàm sóng tại mặt phẳng mẫu:

$$\psi'(x, y) = \mathfrak{F}^{-1}[\widehat{\Psi}'_{esw}(k_x, k_y)] \quad (10)$$

trong đó \mathfrak{F}^{-1} ký hiệu phép biến đổi Fourier ngược.

Sau khi đạt được hàm sóng tại mẫu, support constraint sẽ được áp dụng đối với hàm sóng này nhằm giới hạn vùng không gian chứa mẫu:

$$S[\psi'(x, y)] = \begin{cases} \psi'(x, y) & \text{với } \psi'(x, y) \in S \\ 0 & \text{với } \psi'(x, y) \notin S \end{cases} \quad (11)$$

với S là vùng được chọn lựa ban đầu chứa mẫu. Bằng việc áp dụng support constraint, thuật toán

hàm ý rằng giá trị vùng không gian bên trong vùng support sẽ được giữ nguyên không đổi trong khi giá trị bên ngoài vùng support này được gán về 0.

Sau cùng giá trị của hàm mẫu đạt được như sau:

$$T'(x, y) = \psi'(x, y) / \psi(x, y) \quad (12)$$

Quá trình phục hồi ảnh sẽ được tiếp tục bằng việc thế $T'(x, y)$ vào phương trình (5) và lặp lại các bước tiếp theo cho đến khi thuật toán hội tụ với giá trị χ^2 không đổi (Gerchberg and Saxton, 1971; Fienup, 1978).

2.3.2 Thuật toán hybrid input-output

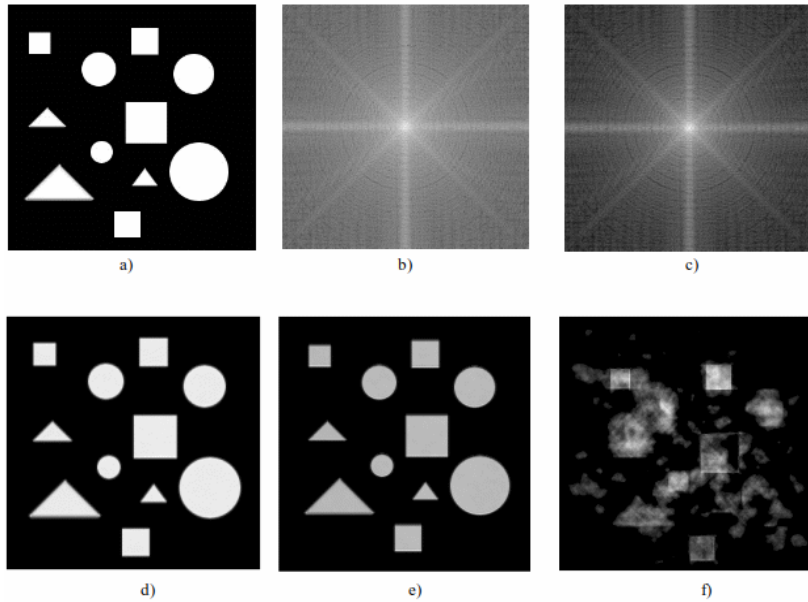
Thuật toán hybrid input – output (HIO) (Fienup, 1982) được thực hiện tương tự với thuật toán ER được trình bày trong phần 2.3.1. Tuy nhiên, support constraint trong thuật toán HIO được thực hiện theo phương trình sau:

$$\psi^{i+1}(x, y) = \psi^i(x, y) + (1 + \beta) \times \psi'(x, y) - \psi'_{esw}(x, y) - \beta \times \psi''(x, y) \quad (13)$$

với $\psi^{i+1}(x, y)$ là esw tại lần lặp $i+1$ sau khi áp dụng HIO support constraint, $\psi^i(x, y)$ là esw tại lần lặp thứ i , $\psi'(x, y)$ là esw tại mặt phẳng mẫu sau khi áp dụng modulus constraint và ER support constraint, $\psi'_{esw}(x, y)$ là esw tại mặt phẳng mẫu sau khi áp dụng ER support constraint và $\psi''(x, y)$ là esw tại mặt phẳng mẫu sau khi áp dụng modulus constraint. β được gọi là hệ số phản hồi. Trong thuật toán này, vùng không gian bên ngoài vùng support được hiệu chỉnh dựa vào hệ số β và theo phương trình (13) thay vì gán bằng 0 như trong thuật toán ER.

3 MÔ PHỎNG

Nghiên cứu này tập trung vào việc khảo sát khả năng phục hồi ảnh trong phương pháp chụp ảnh CDI sử dụng thuật toán tích chập khi chùm tia tới kết hợp không hoàn toàn và cường độ nhiễu xạ được ghi nhận ở các lần chiếu riêng lẻ. Phương pháp này được đánh giá bằng việc mô phỏng một thí nghiệm CDI sử dụng chùm tia ở các mức độ kết hợp khác nhau. Bên cạnh đó, các mức độ nhiễu khác nhau cũng được thêm vào cường độ nhiễu xạ nhằm làm cho quá trình mô phỏng có sự tương đồng với các thí nghiệm CDI trong thực tế. Bố trí hình học của mô phỏng được trình bày trên Hình 1. Để thực hiện quá trình mô phỏng và phục hồi ảnh, nghiên cứu sử dụng ngôn ngữ lập trình Python, phiên bản 3.7.1.



Hình 2: Kết quả thu được đối với mẫu nhị phân trong trường hợp không có nhiễu

a) mẫu nhị phân được sử dụng trong mô phỏng, b) và c) cường độ nhiễu xạ tại $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$ và $\xi_{Sx}=5,9 \mu\text{m}$, d), e) và f) ảnh được phục hồi đối với $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$, $\xi_{Sx}=6,1 \mu\text{m}$ và $\xi_{Sx}=5,9 \mu\text{m}$

Năng lượng được sử dụng trong mô phỏng này là 1,0 keV, nằm trong vùng tia X mềm. Khoảng cách giữa mẫu và máy dò là 1,0 m. Trong nghiên cứu này, cả mẫu nhị phân và mẫu phức được sử dụng để đánh giá thuật toán đối với các loại mẫu khác nhau. Mẫu nhị phân là mẫu được biểu diễn bởi hai giá trị, 0 và 1; trong khi đó, mẫu phức là mẫu được biểu diễn bởi các giá trị liên tục. Đối với mẫu nhị phân, được minh họa trên Hình 2a, chỉ chứa hai giá trị, 0 và 1, lần lượt biểu diễn cho hai màu đen và trắng. Mặt khác, mẫu phức được trình bày trên Hình 3a chứa đựng các giá trị liên tục biểu diễn sự thay đổi màu sắc của ảnh. Mức độ kết hợp của sóng tới được thay đổi bằng cách thay đổi giá trị của độ dài kết hợp, ξ_{Sx} . Giá trị của ξ_{Sx} được thay đổi từ cao đến thấp tương ứng với mức độ kết hợp cao và thấp để kiểm tra khả năng phục hồi ảnh của thuật toán ở các mức độ kết hợp khác nhau. Chùm tia tới được giả sử kết hợp hoàn toàn theo phương y. Dựa vào những kết quả đạt được, nghiên cứu này sẽ đưa ra một vài tiêu chuẩn làm cơ sở cho việc thiết kế các thí nghiệm CDI.

Cường độ nhiễu xạ đạt được bằng phương trình (4). Hình 2b và 2c lần lượt trình bày cường độ nhiễu xạ của mẫu nhị phân tương ứng với các độ dài kết hợp $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$ and $\xi_{Sx}=5,9 \mu\text{m}$. Trong khi đó, các hình 3b và 3c lần lượt là cường độ nhiễu xạ của mẫu phức tương ứng với độ dài kết hợp tại $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$ và $\xi_{Sx}=18,3 \mu\text{m}$.

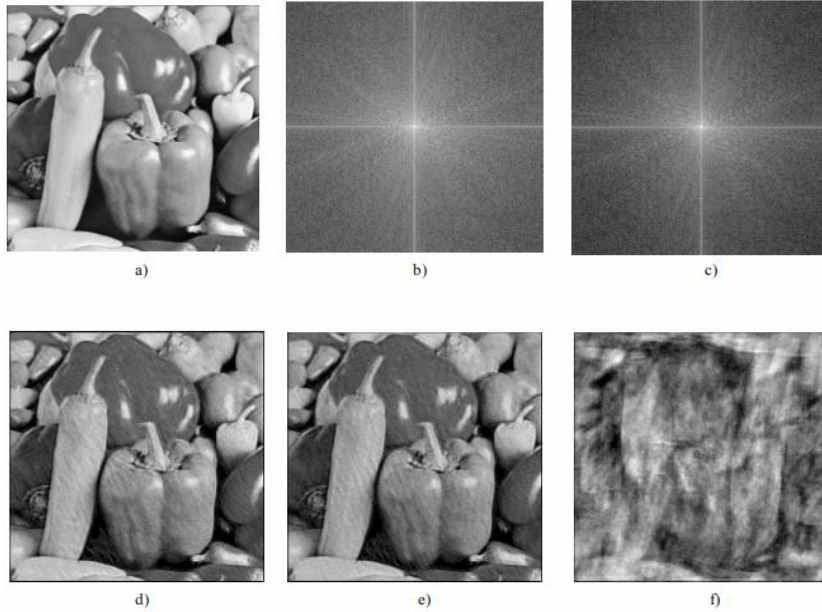
4 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Quá trình phục hồi ảnh được thực hiện để đạt được ảnh của mẫu bằng việc kết hợp các thuật toán ER, HIO và phương pháp tích chập khi chùm tia tới kết hợp không hoàn toàn. Trong nghiên cứu này, quá trình phục hồi ảnh được bắt đầu bằng thuật toán ER sau đó đến thuật toán HIO. Bên cạnh đó, thuật toán shrinkwrap cũng được áp dụng sau một vài lần lặp để hiệu chỉnh support. Quá trình này được lặp lại cho đến khi giá trị χ^2 dưới giá trị ngưỡng được thiết lập trước. Cuối cùng, khi quá trình lặp hội tụ chỉ thuật toán ER được sử dụng để làm sạch vùng bên ngoài ảnh của mẫu.

Đối với mẫu nhị phân, ảnh được phục hồi ứng với các mức độ kết hợp khác nhau được trình bày lần lượt trên các hình 2d, 2e, 2f. Trường hợp $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$, Hình 2d cho thấy quá trình phục hồi ảnh đạt được ảnh có chất lượng cao. Các đặc điểm của mẫu được phục hồi lại hoàn toàn, không có sự khác nhau giữa ảnh được phục hồi và ảnh gốc ban đầu. Khi mức độ kết hợp giảm, thuật toán vẫn cho kết quả tốt khi độ dài kết hợp khoảng 6,1 μm . Mặc dù có sự thay đổi về chất lượng ảnh so với ảnh gốc nhưng tất cả các chi tiết của ảnh đều được phục hồi hoàn toàn và thuật toán vẫn cho kết quả tin cậy. Tuy nhiên, khi độ dài kết hợp giảm đến giá trị $\xi_{Sx}=5,9 \mu\text{m}$, xáo ảnh bắt đầu xuất hiện, các chi tiết ảnh không được phục hồi đầy đủ. Vì vậy, kết quả

thu được cho thấy rằng đối với mẫu nhị phân có cấu trúc đơn giản thuật toán tích chập có khả năng phục

hồi ảnh có chất lượng tốt khi độ dài kết hợp lớn hơn $\xi_{Sx}=5,9 \mu\text{m}$.



Hình 3: Kết quả thu được đối với mẫu phức khi không bị ảnh hưởng bởi nhiễu

a) mẫu được sử dụng trong mô phỏng, b) và c) cường độ nhiễu xạ tại $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$ và $\xi_{Sx}=18,3 \mu\text{m}$, d), e) và f) ảnh được phục hồi đối với $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$, $\xi_{Sx}=20,9 \mu\text{m}$ và $\xi_{Sx}=18,3 \mu\text{m}$

Kết quả thu được đối với mẫu phức được trình bày trong Hình 3. Chất lượng ảnh được phục hồi trong Hình 3d với $\xi_{Sx}=146,2 \mu\text{m}$ phù hợp tốt với ảnh gốc trong Hình 3a. Khi độ dài kết hợp giảm đến $20,9 \mu\text{m}$, Hình 3e cho thấy thuật toán được sử dụng vẫn phục hồi được ảnh với chất lượng tốt, không sai khác nhiều so với ảnh gốc ban đầu. Vì vậy có thể thấy rằng thuật toán tích chập được sử dụng đáng tin cậy trong phương pháp CDI đối với mẫu phức khi chùm tia tới có độ dài kết hợp lớn hơn hoặc bằng $20,9 \mu\text{m}$. Khi độ dài kết hợp nhỏ hơn giá trị này, chất lượng ảnh kém và hình 3f là kết quả đạt được khi độ dài kết hợp $\xi_{Sx}=18,3 \mu\text{m}$. Do vậy đối với mẫu phức thuật toán tích chập không cho kết quả đáng tin cậy nếu độ dài kết hợp bằng hoặc nhỏ hơn giá trị này.

Khi chùm tia tới có mức độ kết hợp thấp, các kết quả đạt được cho thấy rằng ảnh được phục hồi chứa đựng các nhiễu ảnh và chất lượng ảnh bị suy giảm khiến ảnh trở nên khác biệt rất nhiều so với ảnh gốc ban đầu. Phụ thuộc vào tính chất của mẫu, khả năng phục hồi ảnh của thuật toán tích chập sẽ khác nhau đối với các mức độ kết hợp khác nhau. Trong trường hợp của mẫu nhị phân, thuật toán tích chập có khả năng phục hồi ảnh ở mức độ kết hợp thấp hơn so với trường hợp của mẫu phức. Điều này có thể được giải

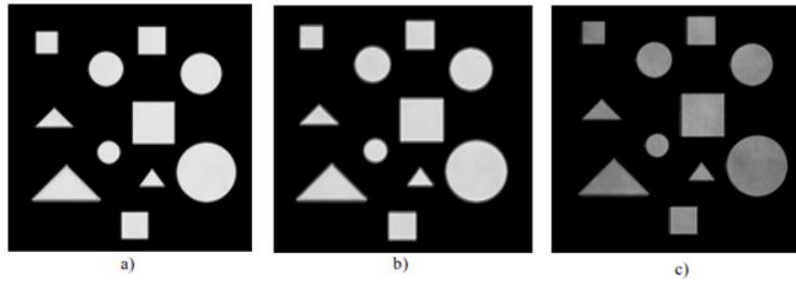
thích là do mẫu nhị phân chỉ chứa hai giá trị 0 và 1, ngược lại, mẫu phức chứa các giá trị liên tục, vì vậy thuật toán tích chập sẽ gặp khó khăn hơn trong việc phục hồi lại các chi tiết của ảnh. Vì vậy, có thể kết luận rằng trong trường hợp không bị ảnh hưởng bởi nhiễu thuật toán tích chập cho kết quả tin cậy và ảnh thu được đạt chất lượng tốt đối với mẫu nhị phân khi độ dài kết hợp lớn hơn $6,1 \mu\text{m}$ và đối với mẫu phức là lớn hơn $20,9 \mu\text{m}$.

Mặt khác, để quá trình mô phỏng tương đồng hơn với các điều kiện thực nghiệm, nhiễu được thêm vào cường độ nhiễu xạ. Nhiễu sử dụng trong mô phỏng này được tạo ra bằng mô hình phân bố Gauss, có trung bình được chọn bằng 0, và độ lệch chuẩn $\sigma = P \times I^{ij}$, với P là một số thực, có giá trị từ 0 đến 1, đại diện cho mức độ nhiễu được thêm vào cường độ nhiễu xạ và I^{ij} là giá trị của cường độ nhiễu xạ tại pixel (i,j).

Cường độ nhiễu xạ khi có nhiễu đạt được bằng phương trình sau,

$$I_{\text{nhiều}}^{ij} = I_{\text{không nhiễu}}^{ij} + \text{Nhiều} \quad (14)$$

trong đó $I_{\text{không nhiễu}}^{ij}$ và $I_{\text{nhiều}}^{ij}$ lần lượt là cường độ nhiễu xạ khi không có nhiễu và có nhiễu.



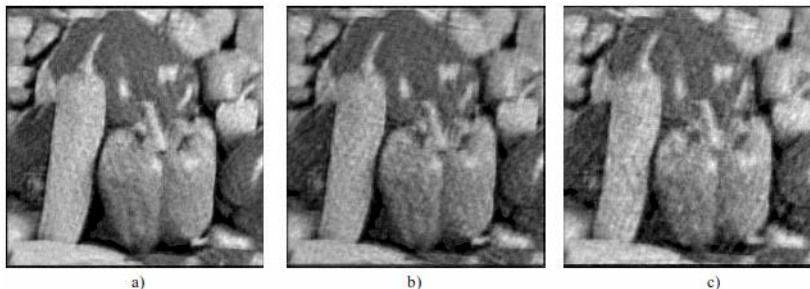
Hình 4: Ảnh được phục hồi đối với mẫu nhị phân khi có ảnh hưởng của nhiễu

a) $P = 0,05$, b) $P = 0,1$, c) $P = 0,15$

Dựa vào kết quả đạt được khi không có ảnh hưởng của nhiễu, mô phỏng trong trường hợp có nhiễu sẽ được thực hiện với độ dài kết hợp $6,1 \mu\text{m}$ đối với mẫu nhị phân và $20,9 \mu\text{m}$ đối với mẫu phức. Mức độ nhiễu cũng được thay đổi để kiểm tra khả năng phục hồi ảnh của thuật toán. Ảnh được phục hồi từ cường độ nhiễu xạ khi có ảnh hưởng của nhiễu được trình bày lần lượt trên Hình 4 đối với mẫu nhị phân và Hình 5 đối với mẫu phức. Chất lượng của ảnh được phục hồi thay đổi và suy giảm khi mức độ nhiễu tăng dần. Đối với mẫu nhị phân, khi mức độ nhiễu thấp, $P = 0,05$, ảnh phục hồi phù hợp tốt với kết quả đạt được khi không có nhiễu và với ảnh gốc. Các đặc điểm của ảnh được phục hồi hoàn toàn. Tuy nhiên, khi mức độ nhiễu tăng lên, chất lượng ảnh suy giảm rõ ràng hơn. Kết quả thu được cho thấy rằng khi $P = 0,15$, chất lượng ảnh bắt đầu suy giảm rõ ràng so với những giá trị khác đối với mẫu nhị phân. Vì vậy, có thể kết luận rằng đối với mẫu nhị phân thuật toán tích chập cho kết quả tin cậy trong phương pháp CDI sử dụng chùm tia kết hợp không hoàn toàn với các lần chiếu riêng lẻ khi mức độ nhiễu nhỏ hơn hoặc bằng $0,15$ giá trị của cường độ nhiễu xạ và độ dài kết hợp là $6,1 \mu\text{m}$.

Đối với mẫu phức, Hình 5 trình bày ảnh được phục hồi từ các mức độ nhiễu khác nhau. Kết quả đạt được cũng cho thấy rằng khi mức độ nhiễu tăng dần, chất lượng ảnh được phục hồi giảm dần. Kết quả đạt được đáng tin cậy khi giá trị của mức độ nhiễu nhỏ hơn hoặc bằng $0,5$. Khi mức độ nhiễu tăng lên $0,1$, chất lượng ảnh thu được bị suy giảm đáng kể. Kết quả đạt được cho thấy rằng mẫu phức dễ bị ảnh hưởng bởi nhiễu hơn so với mẫu nhị phân. Tuy nhiên, trong trường hợp mẫu phức và nhiễu ở một mức độ không cao, thuật toán tích chập cho kết quả đáng tin cậy khi áp dụng vào phương pháp CDI sử dụng chùm tia kết hợp không hoàn toàn và các lần chiếu riêng lẻ.

Mặc dù chất lượng ảnh được phục hồi là khác nhau đối với các mẫu khác nhau ở những mức độ kết hợp và mức độ nhiễu khác nhau nhưng phương pháp tích chập đáng tin cậy để ứng dụng vào việc phục hồi ảnh trong phương pháp CDI khi chùm tia tới kết hợp không hoàn toàn và cường độ nhiễu xạ được ghi nhận ở các lần chiếu riêng lẻ. Kết quả đạt được từ nghiên cứu này có thể phục vụ cho việc thiết kế các thí nghiệm CDI trong thực tế và mở ra cơ hội áp dụng chùm tia kết hợp không hoàn toàn trong phương pháp CDI.



Hình 5: Ảnh được phục hồi đối với mẫu phức khi cường độ nhiễu xạ bị ảnh hưởng bởi nhiễu

a) $P = 0,03$; b) $P = 0,05$; c) $P = 0,1$

5 KẾT LUẬN

Kết quả đạt được trong nghiên cứu này chứng minh khả năng phục hồi ảnh của phương pháp tích

chập trong phương pháp CDI sử dụng chùm tia kết hợp không hoàn toàn đối với các loại mẫu khác nhau trong trường hợp chùm tia tới có các mức độ kết hợp

khác nhau, cường độ nhiễu xạ ở các mức độ nhiễu khác nhau và được ghi nhận ở các lần chiếu riêng lẻ. Kết quả đạt được có thể ứng dụng vào trong các thí nghiệm thực tế nhằm mở ra hướng nghiên cứu ứng dụng chùm tia kết hợp không hoàn toàn vào phương pháp CDI. Trong tương lai, các nghiên cứu tiếp theo có thể được thực hiện nhằm mở rộng phạm vi ứng dụng của thuật toán ở các mức độ kết hợp thấp hơn và mức độ nhiễu cao hơn. Bên cạnh đó, cũng cần mở rộng nghiên cứu đối với mẫu có pha thay đổi liên tục nhằm làm tăng khả năng ứng dụng thực tế của phương pháp tích chập đối với các mẫu có cấu trúc phức tạp.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu được tài trợ bởi Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM trong khuôn khổ Đề tài mã số T2018-05.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Miao, J., Charalambous, P., Kirz, J. and Sayre, D., 1999. Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometer-sized non-crystalline specimens. *Nature*. 400: 342-344.

Boyle, W.S. and Smith, G.E., 1970. Charge coupled semiconductor devices. *Bell System Technical Journal*. 49(4): 587-593.

Gerchberg, R.W. and Saxton, W.O., 1971. A practical algorithm for the determination of phase from image and diffraction plane pictures. *Optik*. 35(2): 237-246.

Fienup, J.R., 1978. Reconstruction of an object from modulus of its fourier transform. *Optics Letters*. 3(1): 27-29.

Fienup, J.R., 1982. Phase retrieval algorithms: a comparison. *Applied Optics*. 21(15): 2758-2769.

Spence, J.C.H., Weierstall, U. and Howells, M., 2004. Coherence and sampling requirements for diffractive imaging. *Ultramicroscopy*. 101(2-4): 149-152.

Williams, G.J., Quiney, H.M., Peele, A.G. and Keith Nugent, K.A., 2007. Coherent diffractive imaging and partial coherence. *Physical Review B*. 75(10): 104102/1-7.

Paterson, D., Allman, B.E., McMahon, P.J., *et al.*, 2001. Spatial coherence measurement of x-ray undulator radiation. *Optics Communications*. 195(1-4): 79-84.

Vartanyants, I.A. and Singer, A., 2010. Coherence properties of hard X-ray synchrotron sources and X-ray free electron lasers. *New Journal of Physics*. 12: 035004/1-23.

Whitehead, L.W., Williams, G.J., Quiney, H.M., *et al.*, 2009. Diffractive imaging using partially coherent X rays. *Physical Review Letters*. 103(24): 243902/1-4.

Tran, G. N, van Riessen, G.A. and Peele, A.G., 2017. Modal approach for partially coherent diffractive imaging with simultaneous sample and coherence recovery. *Optics Express*. 25(10): 10757-10764.

Clark, J.N. and Andrew Peele, A.G., 2011. Simultaneous sample and spatial coherence characterization using diffractive imaging. *Applied Physics Letters*. 99(15): 154103/1-3.

Coisson, R. and Marchesini, S., 1997. Gaussian-Schell sources as models for synchrotron radiation. *Journal of Synchrotron Radiation*. 4(5): 263-266.

Marchesini, S., He, H., Chapman, H.N., *et al.*, 2003. X-ray image reconstruction from a diffraction pattern alone. *Physical Review B*. 68(14): 140101/1-4.