

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов
Российской академии наук

На правах рукописи

Чукалина Марина Валерьевна

**Измерительно-вычислительные методы рентгеновской
диагностики для определения атомной и
морфологической (пространственной) структуры
материалов и изделий микро- и нанoeлектроники.**

Специальность 2.2.2 —
«Электронная компонентная база микро- и нанoeлектроники, квантовых
устройств»

Диссертация на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Черноголовка — 2025

Оглавление

Стр.

Введение	5
Глава 1. Модели формирования сигналов как основа решения обратных задач в измерительно-вычислительных методах рентгеновской диагностики (литературный обзор)	15
1.1 Современные методы рентгеновской диагностики, применимые для определения атомной структуры материалов и морфологической структуры изделий микро- и нанoeлектроники	15
1.2 Модель формирования протяженной тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения	20
1.3 Модели сигналов в сканирующих методах PIXE и рентгенофлуоресцентной микроскопии	27
1.4 От сканирующей микроскопии к томографии	35
1.5 Модель формирования томографической проекции с использованием микропучка	36
1.6 Модель формирования рентгено-флуоресцентной проекции	40
1.7 Модель формирования проекции при зондировании монохроматическим параллельным пучком	43
1.8 Модель формирования проекции при зондировании конусным пучком	46
1.9 Модель формирования проекции при наличии оптического элемента между объектом и детектором	52
1.10 Заключение	58
Глава 2. Вейвлет-анализ EXAFS-спектров для уточнения атомной структуры новых материалов	60
2.1 Сравнение двух Фурье- и вейвлет-методов анализа спектров EXAFS	60
2.2 Вейвлет Морле. Оценка пространственного разрешения	65

2.3	Применение метода вейлет-анализа EXAFS-спектров для определения локального атомного окружения <i>Ge</i> и <i>Sb</i> на границе раздела слоев <i>GeTe</i> и <i>Sb₂Te₃</i> в <i>Ge – Sb – Te</i> халькогенидных сверхрешетках	70
2.4	Связь пространственного разрешения с выбором материнского вейвлета. Вейвлет FEF-Морле	77
2.5	Заключение	85
Глава 3. Методы определения профилей протонного и рентгеновского микропучков, используемых в сканирующих системах		88
3.1	Метод определения профиля протонного микропучка с использованием карты флуоресцентных сигналов	88
3.2	Метод определения профиля рентгеновского микропучка с использованием карты флуоресцентных сигналов	95
3.3	Заключение	107
Глава 4. Рентгеновская томография. Алгебраический подход к томографической реконструкции в условиях низкой дозовой нагрузки		108
4.1	Томограф как аппаратно-программный комплекс. Задачи реконструктора	108
4.2	Рентгеновская флуоресцентная томография. Алгебраический метод реконструкции	114
4.3	Алгебраический метод реконструкции с нелинейной регуляризацией	130
4.4	Алгебраический метод реконструкции, учитывающий гетероскедастичность измеряемых сигналов	140
4.5	Алгебраический метод томографической реконструкции для оценки локального состава с использованием проекций в схеме «на просвет»	147
4.6	Метод реконструкции цифрового изображения полного объема в условиях ограничений на используемую память	154

4.7	Повышение быстройдействия. Метод автоматического определения минимального размера значимой области на томографических проекциях	160
4.8	Заключение	175
Глава 5. Рентгеновская томография. Методы уменьшения выраженности артефактов. Методы оценки точности реконструкции		
5.1	Источники искажений, возникающих на восстановленных изображениях	180
5.2	Артефакты при малоракурсной съемке. Реконструкция в условиях малоракурсной съемки	188
5.3	Артефакты при неравномерном отклике ячеек детектора. Метод уменьшения выраженности артефактов	197
5.4	Артефакты, возникающие при неточных параметрах положения оси вращения. Автоматический метод калибровки геометрии измерения	214
5.5	Артефакты при наличии сильнопоглощающих включений. Алгебраический метод уменьшения выраженности артефактов . .	222
5.6	Артефакты, возникающие при зондировании полихроматическим излучением. Автоматический метод уменьшения артефактов типа чаши	237
5.7	Проблема оценки точности реконструкции	244
5.8	Заключение	272
Выводы		274
Словарь терминов		283
Список литературы		285
Список рисунков		310
Список таблиц		326

Введение

По мере развития микроэлектронной промышленности каскадно осваивается большое количество новых технологических процессов. Из новых материалов создаются компоненты, узлы и изделия, причем функциональные и эксплуатационные характеристики изделий находятся в прямой зависимости от характеристик отдельных компонент и используемых материалов. Поэтому вопрос контроля характеристик критически важен для развития микро- и наноэлектроники, и не может быть сведен исключительно к выходному тестированию, но должен распространяться на все ключевые технологические процессы на маршруте изготовления изделия. Для этого требуются высокоточные и надежные средства объективного контроля, обеспечивающие как пространственное разрешение, так и разрешение по значениям характеристик, соответствующее необходимой точности изготовления в современных технологиях микро- и наноэлектроники.

Рентгеновское излучение, благодаря широкому энергетическому диапазону и высокой проникающей способности, является мощным диагностическим инструментом, подходящим для задач микроэлектроники. К настоящему времени уже известен ряд рентгеновских методов исследования материалов и сложных компонент, но их разрешающая способность не во всех случаях соответствует стоящим перед микроэлектроникой задачам. Важная особенность большинства современных методов рентгеновского исследования состоит в том, что они являются не измерительными, а измерительно-вычислительными методами, то есть определяемые характеристики не измеряются непосредственно, а получаются расчетным способом на основе косвенных измерений. Поэтому принципиальные возможности и точностные характеристики этих методов определяются математическим и алгоритмическим обеспечением в неменьшей степени, чем физическими параметрами измерительной части.

Основным направлением данного диссертационного исследования является развитие вычислительных методов рентгеновской диагностики с целью их применения для исследования атомной структуры природных и новых инженерных материалов, изучения морфологической структуры изделий микро- и наноэлектроники, проведения метрологического контроля и дефектоскопии готовых изделий. Полученные результаты относятся к областям исследования

структуры природных и инженерных материалов с целью разработки новых приборов твердотельной электроники, оптоэлектроники, микро- и наномеханических систем; исследования и характеристики сфокусированных микропучков, применяемых в сканирующих диагностических системах и в методах безмасочной литографии; исследования с высоким пространственным разрешением морфологической структуры объектов микронных и субмикронных размеров неразрушающим (т.е. ограничивающим дозовую нагрузку) методом микротомографии.

Уменьшение размеров ключевых компонентов интегральных схем приводит к необходимости использования новых материалов с высокой проводимостью, термостойкостью, механической прочностью, химической инертностью и пр. Новые материалы, способные преодолеть ограничения полупроводниковой технологической платформы, нужны также для расширения функциональных возможностей новых устройств. В 50-60-е годы И.Б. Боровским, В. А. Батыревым, В.В. Шмидтом и др., было исследовано поведение рентгеновских спектров поглощения во многих металлах и сплавах. В начале 70-х годов прошлого столетия Д.Е. Сауерс, Е.А. Штерн и Ф.В. Литл построили математическую модель EXAFS-спектра и предложили применить Фурье преобразование для определения оценки радиусов координационных сфер. В России в разное время развитием метода EXAFS в части оптимизации измерений и в части интерпретации данных занимались А.И. Костарев, В.П. Саченко, И.Б. Боровский, Ю.А. Бабанов, Р.В. Ведринский и А.В. Солдатов.

Метод EXAFS позволяет для выбранного химического элемента, входящего в исследуемый материал, определить структурные параметры ближнего окружения атомов указанного атомного номера. Метод либо уточняет сведения, получаемые иными методами (например, дифракционными), либо является самостоятельным источником информации о структуре материалов с ближним порядком (металлических, керамических, полимерных, композитных и пр.) Метод используется при изучении свойств материалов с целью разработки новых приборов твердотельной электроники, оптоэлектроники, микро- и наномеханических систем, в частности: при изучении процессов суперионной проводимости в бездефектных кристаллах, процессов электронного обмена в соединениях редкоземельных элементов с промежуточной валентностью; при изучение магнитной восприимчивости спиновых стекол при низких температурах; при изучении электропроводности и каталитической активно-

сти интеркалированных соединений, образующихся при введении примесных атомов, молекул или комплексов в межслоевое пространство кристаллов со слоистой структурой и пр.

Актуальность применения сканирующих рентгеновских методов, обладающих высокой элементной селективностью, для оценки чистоты поверхности, локального состава приповерхностных слоев, а также их использования для микроструктурирования, трудно переоценить. Чтобы увеличить пространственное разрешение, в этих методах рентгеновское излучение фокусируется. Фокусировка рентгеновского излучения в микронном и субмикронном диапазонах сопряжена с существенными техническими сложностями, и на практике используются пучки со сложным поперечным профилем, форма которого затем учитывается в вычислительной части метода. Проблемами формирования и оценки размеров рентгеновских микропучков в разное время занимались В.В. Аристов, Б. Ленгелер, Д.В. Рощупкин, С.И. Зайцев, А.А. Снигирев, С.М. Кузнецов, М. Брюнель и В.К. Егоров.

Благодаря высокой способности рентгеновского излучения проникать вглубь материалов, применение рентгеновской вычислительной или, иначе, компьютерной томографии (КТ) позволяет исследовать морфологическую структуру не только отдельных компонентов микро- и наноэлектроники, но и целых изделий. Развитие вычислительных методов КТ связано в России с именами Б.К. Вайнштейна, Н.Д. Введенской, И.М. Гельфанда, В.П. Паламодова, С.Г. Гиндикина, А.Н. Тихонова, А.В. Гончарского, В.В. Пикалова, Е.Н. Симонова, В.Е. Асадчикова, В.В. Арлазарова и А.В. Бузмакова, а в мире – с именами А. Кормака, Г. Хаунсфилда, Ф. Наттерера, Й. Батенбурга и Г. Хермена. И если изначально основными применениями метода являлись медицина и научные исследования, то сегодня КТ рассматривается как инструмент дефектоскопии и метрологического контроля на производстве. В связи с новыми приложениями развитие вычислительных методов КТ продолжается. В диссертационном исследовании рассматриваются проблемы создания методов КТ, способных работать в условиях плохого отношения сигнал-шум и при малом числе проекционных углов, в режиме полихроматического зондирования, при неполной калибровке узлов томографа, в присутствии сильно поглощающих включений в объекте, то есть в условиях, характерных для процессов дефектоскопии изделий микроэлектроники.

Целью данной работы является исследование моделей и разработка измерительно-вычислительных методов рентгеновской диагностики высокого разрешения для определения характеристик материалов и компонентов изделий микро- и нанoeлектроники.

Для достижения поставленной цели в работе решаются следующие **задачи**.

1. Разработка метода вейвлет-анализа протяженной тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения (EXAFS-спектров), позволяющего определять радиусы ближайших координационных сфер в геометрической модели окружения ионизируемого атома, а также элементный состав каждой сферы без привлечения априорной информации об элементном составе.
2. Разработка метода определения двумерных профилей микропучков, используемых в сканирующих методах исследования изделий микроэлектроники и в методе безмасочной литографии.
3. Уточнение модели формирования регистрируемых изображений в рентгеновской флуоресцентной томографии в части учета поглощения излучения в толще исследуемого образца.
4. Разработка метода рентгеновской флуоресцентной томографии, позволяющего контролировать локальный элементный состав изделий микроэлектроники не только в приповерхностных, но и в глубоко залегающих слоях.
5. Разработка вычислительного метода рентгеновской микротомографии, позволяющего уменьшить время измерения и дозовую нагрузку на микроэлектронные компоненты при исследовании их функциональных и эксплуатационных характеристик томографическими методами.
6. Разработка метода оценки точности результатов томографической реконструкции, с учетом наличия искажений (артефактов), возникающих на реконструированных изображениях в условиях, необходимых для реализации неразрушающего томографического метода исследования и контроля изделий микро- и нанoeлектроники.
7. Разработка метода томографической реконструкции, обеспечивающего при равной дозовой нагрузке существенно большую точность по сравнению с ранее известными методами микротомографии в полихрома-

тической моде, использующимися при исследовании пространственных характеристик микроэлектронных компонент.

Научная новизна:

1. Предложен новый метод анализа протяженной (дальней) тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (EXAFS-спектров), основанный на вейвлет-анализе с контролем размера ячейки спектральных характеристик, впервые позволивший связать базисные параметры материнского вейвлета и параметры геометрической модели окружения ионизируемого атома изучаемого материала.
2. Впервые предложен метод определения двумерного профиля микропучков (протонных и рентгеновских), используемых в сканирующих диагностических методах и методах микроструктурирования поверхностей, основанный на математической обработке карт флуоресцентных сигналов, формируемых при сканировании ортотропных структур на тонкой подложке.
3. Предложен новый вычислительный метод рентгеновской флуоресцентной томографии, позволяющий, в отличие от ранее известных, оценивать пространственное распределение химических элементов в толще образца без систематического занижения значений по причине ослабления сигнала.
4. Предложен новый вычислительный метод рентгеновской томографии алгебраического типа, отличающийся от ранее известных использованием нелинейных регуляризирующих операторов, что позволяет уменьшать время измерения и дозовую нагрузку на микроэлектронные компоненты при исследовании их характеристик без снижения точности диагностики.
5. Впервые предложен вычислительный метод рентгеновской томографии, позволяющий устанавливать локальный элементный состав многокомпонентного объекта на основе одного стандартного набора томографических измерений в полихроматической моде.
6. Предложен новый метод томографической реконструкции, обеспечивающий при равной дозовой нагрузке существенно большую точность по сравнению с ранее известными методами, что обеспечивается автоматической оценкой условий измерения, затрудняющих томографическое исследование изделий микроэлектроники: полихроматичности зондиру-

ющего излучения, наличия сильно поглощающих включений, возможных нарушений геометрии измерения.

Теоретическая и практическая значимость. Теоретическая значимость проведенного диссертационного исследования заключается в разработке и обосновании новых вычислительных методов рентгеновской диагностики, что создает основу для развития методов дефектоскопии и промышленного контроля не только поверхностей, но и внутренних объемов изделий микро- и наноэлектроники без их разрушения. Разработанные вычислительные методы опираются на модели формирования входных сигналов и изображений, существенно уточненных автором в ходе исследовательской работы. Эти модели имеют самостоятельную теоретическую значимость, поскольку на их основе могут создаваться и другие вычислительные методы, с теми или иными целевыми характеристиками, в том числе современные «физически информированные» нейросетевые методы.

Практическая значимость предложенного метода анализа EXAFS-спектров заключается в автоматизации и многократном сокращении сопутствующих временных затрат, поскольку в нем не требуется применения метода подгонки для оценки параметров идентификации центров рассеяния. Это позволяет ускорить процесс изучения атомной структуры новых материалов, ускорить оптимизацию технологических процессов создания новых материалов. Программное обеспечение, реализующее предложенный метод, размещено на официальном сайте синхротрона ESRF (г. Гренобль, Франция) и уже 20 лет активно используется учеными разных стран.

Использование предложенного метода определения двумерных профилей протонного и рентгеновского микропучков позволяет повысить пространственное разрешение сканирующих методов, применяемых для локальной оценки чистоты поверхностей, локального анализа элементного состава поверхностей и приповерхностных слоев изделий. Кроме этого, знание профилей микропучков позволяет проводить оптимизацию процедур микроструктурирования для достижения целевых параметров геометрической модели поверхности.

Точность работы методов рентгеновской томографии прямо зависит от интенсивности зондирующего излучения. Но высокая интенсивность может привести к деградации изделий микроэлектроники. Разработанные в диссертации вычислительные методы томографической реконструкции способны работать в условиях пониженной дозовой нагрузки, что значительно расширяет область

применения томографических методов в микроэлектронике. Разработанные методы реконструкции внедрены в программный продукт Smart Tomo Engine научно-производственной компании «Смарт Энджинс Сервис». Данное программное обеспечение может служить платформой для разработки комплексов локального контроля «систем в корпусе» при отладке производства или инспекции готовых изделий.

Методология и методы исследования. В диссертационной работе рассматриваются существующие и предлагаются новые измерительно-вычислительные методы рентгеновской диагностики, пригодные для исследования атомной структуры материалов, для исследования локальной морфологической структуры и проведения диагностического контроля изделий микро- и нанoeлектроники. Значительная часть результатов базируется на совместном использовании методов численного моделирования и экспериментальных измерительных методов. В работе используются методы математического анализа, линейной алгебры, элементы теории интегральных преобразований, численные методы, включая методы непрерывной оптимизации. Результаты подтверждаются формально-дедуктивно, численными экспериментами или результатами натурных измерений. Работа подготовлена в соответствии с паспортом научной специальности 2.2.2. «Электронная компонентная база микро- и нанoeлектроники, квантовых устройств». Решаемые в работе задачи относятся к п.4 «Исследование, моделирование и разработка ... методов измерения характеристик и совершенствования изделий по п. 1 [(приборов, интегральных схем, изделий микро- и нанoeлектроники, твердотельной электроники, дискретных радиоэлектронных компонентов, икроэлектромеханических систем (МЭМС), нанoeлектромеханических систем (НЭМС), квантовых устройств, включая оптоэлектронные приборы и преобразователи физических величин)]» и п. 5 «... исследование их [изделий] функциональных и эксплуатационных характеристик по п. 1, включая вопросы качества, долговечности, надежности и стойкости к внешним воздействующим факторам, а также вопросы их эффективного применения».

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработанный метод вейвлет-анализа протяженной тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения (EXAFS-спектров) с контролем размера ячейки спектральных характеристик позволяет определять радиусы ближайших координационных сфер в геометрической модели

- окружения ионизируемого атома, а также элементный состав каждой сферы без привлечения априорной информации об элементном составе.
2. Разработанный метод определения профилей микропучков, используемых в сканирующих методах исследования изделий микроэлектроники и в методе безмасочной литографии, обеспечивает построение двумерных (а не одномерных, как ранее предлагавшиеся методы) профилей, что позволяет использовать не только осесимметричные пучки.
 3. Уточненная модель формирования регистрируемых изображений в рентгеновской флуоресцентной томографии и метод реконструкции, разработанный на ее основе, позволяют контролировать локальный элементный состав изделий микроэлектроники не только в приповерхностных, но и в глубоко залегающих слоях.
 4. Предложенный вычислительный метод рентгеновской микротомографии, использующий регуляризующие фильтры, снизил требования к числу проекций и экспозиции при выполнении дефектоскопии и метрологического контроля, что позволяет уменьшать время измерения и дозовую нагрузку на микроэлектронные компоненты при исследовании их функциональных и эксплуатационных характеристик томографическими методами.
 5. Предложенный метод томографической реконструкции, учитывающий форму спектра зондирующего излучения, физические ограничения на коэффициент ослабления и возможные нарушения геометрии измерения, обеспечивает при равной дозовой нагрузке существенно большую точность по сравнению с ранее известными методами микротомографии в полихроматической моде, использующимися при исследовании пространственных характеристик микроэлектронных компонент.

Достоверность полученных теоретических результатов подтверждается формально-дедуктивным выводом. Адекватность уточненных автором моделей подтверждена результатами измерений. Для всех предложенных методов построены и программно реализованы алгоритмы, их характеристики оценены на реальных данных или данных, полученных методами имитационного моделирования. Программное обеспечение, реализующее предложенные в диссертационном исследовании методы, используется неаффилированными научно-исследовательскими группами в прикладных и научных исследованиях, что подтверждается цитированиями. Результаты, изложенные в диссертации,

получены на современном оборудовании исследовательского класса, включая оборудование станций синхротрона ESRF (установки класса «Мегасайенс»). Результаты диссертационного исследования не противоречат результатам, полученным другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на Всероссийской научно-практической конференции производителей рентгеновской техники, Международном научном семинаре и международной молодежной научной школе-семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных и актуальные проблемы рентгеновской оптики», Международной конференции по техническому зрению (International Conference on Machine Vision, ICMV), Рабочем совещании «Рентгеновская оптика», Международной научно-технической конференции «Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения», Междисциплинарной школе-конференции «Информационные технологии и системы» (ИТиС), Европейской конференции по моделированию «European Conference on Modelling and Simulation: Modelling Methodologies and Simulation» (ECMS), Международной научно-технической конференции IEEE «Искусственные интеллектуальные системы и интеллектуальные САПР», Симпозиуме «Нанозлектроника», Международном совещании «Physics in Signal and Image Processing», Международной конференции по томографии материалов и структур (ICTMS), Российском форуме «Микроэлектроника», Объединенной конференции «Электронно-лучевые технологии и рентгеновская оптика в микроэлектронике», Всероссийской научной конференции МФТИ, Международной конференции «Физика конденсированных состояний» (ФКС), Международной конференции по промышленной томографии (iCT).

Личный вклад. В диссертации представлены результаты исследований по заявленной теме, полученные самим автором или под его непосредственным руководством. Основные результаты и положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Ряд опорных результатов получен совместно с соавторами – независимыми исследователями (С.И. Зайцев, Х. Функе, У. Войтен, В.Е. Асадчиков, Д.В. Рощупкин, Д.П. Николаев, А. Симиновичи, А.А. Снегирев, А.В. Бузмаков, М.В. Григорьев, М.И. Гильманов, И.А. Щелоков) и студентами или аспирантами, работавшими под руководством автора (В.Е. Прун, Д.А. Иванов, Д.Е. Ичалова, Ж.В. Солдатова, П.А. Кулагин, Я.Л. Шабельникова, А.С. Ингачева, Д.Д. Казимиров, А.В. Яма-

ев, Л.Г. Кочиев, М.С. Шутов, А.В. Хафизов, Э.С. Аллахвердов, А.В. Вацюк), каждому из которых автор выражает искреннюю благодарность.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 71 печатных изданиях, 15 из которых изданы в периодических научных журналах, индексируемых RSCI, 26 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 28 — в тезисах докладов.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения. Полный объём диссертации составляет 326 страниц, включая 211 рисунков и 9 таблиц. Список литературы содержит 246 наименований.

Глава 1. Модели формирования сигналов как основа решения обратных задач в измерительно-вычислительных методах рентгеновской диагностики (литературный обзор)

1.1 Современные методы рентгеновской диагностики, применимые для определения атомной структуры материалов и морфологической структуры изделий микро- и нанoeлектроники

Освоение новых технологических процессов в микроэлектронике, таких как процессы создания полупроводниковых компонент или процессы корпусирования, требует скрупулезной отладки, прежде чем будут достигнуты целевые показатели качества. Это касается производства вертикально интегрированной памяти, логических светодиодов высокой яркости, микроэлектромеханических систем и сенсоров, оптоэлектроники, фототехники и пр. Контроль структурных параметров необходим на разных масштабах. От межатомного расстояния - при определении атомной структуры новых инженерных материалов, до миллиметров - при выполнении дефектоскопии или метрологического контроля структуры или состава готового изделия. Использование в диагностических методах **рентгеновского излучения** данный диапазон масштабов покрывает. В диссертационной работе рассматриваются три метода: метод рентгеновской спектроскопии, используемый для определения атомной структуры новых материалов; метод сканирующей микроскопии с регистрацией флуоресцентного сигнала, применяемый для локального контроля элементного состава, и метод рентгеновской микротомографии – для выполнения дефектоскопии и метрологического контроля внутренней морфологической структуры изделий неразрушающим способом.

Новые материалы, способные преодолеть ограничения полупроводниковой технологической платформы, нужны для расширения функциональных возможностей новых устройств. Несмотря на то, что в современной электронике пока предпочтение отдается кремнию и германию, однослойные 2D-промежуточные продукты продемонстрировали значительный потенциал для электронных металлов следующего поколения. Новые 2D-материалы, такие как теллулен, висмутен, арсенен и т. д. [1; 2], привлекают значительное внимание

создателей электронных и оптоэлектронных устройств. Материалы имеют повышенную теоретическую емкость, структурную анизотропию, настраиваемую ширину запрещенной зоны. Это открывает перспективы для новых методов хранения [3] и преобразования энергии. Для комбинирования свойств двумерных материалов создают латеральные или вертикальные гетероструктуры. Латеральные дуэты материалов изучаются методами зондовой микроскопии. Исследование вертикальных гетероструктур, изучение результатов внедрения атомов металла в легированные 2D материалы требует применения метода EXAFS [4]. Метод EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) спектроскопии, базирующийся на анализе дальней (протяженной) тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения, потенциально позволяет в геометрической модели окружения ионизируемых атомов определять радиусы ближайших координационных сфер и элементный состав каждой сферы, т.е. изучать атомную структуру создаваемых материалов. Метод EXAFS сегодня используется не только для изучения атомной структуры природных и инженерных материалов, но также применяется для наблюдения за динамикой формирования атомной структуры материалов при оптимизации параметров технологических процессов их получения [5].

Следующим рассмотренным в диссертации методом является метод сканирующей микроскопии с регистрацией флуоресцентного сигнала. Локальный контроль состава поверхностей (например, при оптимизации протоколов осаждения покрытий [6]) и пленок, контроль процессов формирования и старения пленок [7] являются важными задачами микроэлектроники. Чтобы реализовать локальный контроль поверхностей или пленок необходимо тем или иным способом локализовать объем, из которого собирается информация. Это можно сделать, сфокусировав рентгеновский пучок. Реализовав процедуру сканирования можно получить элементную карту поверхности, т.е. увидеть распределение элементов на поверхности. Пространственное разрешение диагностического метода определяется размером наименьшего объекта, который поддается идентификации. Параметрами функции, определяющей пространственное разрешение в сканирующем методе, являются размер используемого для генерации флуоресценции пучка (в работе рассматриваются протонные и рентгеновские пучки), шаг сканирования, а при использовании коллимирующих устройств перед окном детектора, параметры коллиматоров. Поскольку непрерывный фон, появляющийся в энергетическом спектре рентгеновского

характеристического излучения, генерируемом при бомбардировке материала тяжелыми заряженными частицами, намного меньше, чем при бомбардировке электронами, метод зондирования протонными пучками PIXE (Particle-Induced X-ray Emission) сегодня используют для локального анализа элементов, содержащихся в следовых количествах [8]. Дискуссии о том, протонные или рентгеновские пучки следует применять для генерации флуоресценции, начатые в 80-х годах прошлого столетия [9], не утихают и сегодня [10]. Оба пучка активно применяются как для диагностики, так и в технологических процедурах микроструктурирования. Одно несомненно, что сегодня размеры рентгеновских зондов, используемых для сканирования на синхротронных станциях, достигли нанометров [11], в то время как размеры протонных зондов остаются в области единиц микрон. При проведении локального контроля чистоты поверхности изображения с регистрирующих устройств (флуоресцентные карты) могут непосредственно использоваться для визуального анализа. Чтобы провести количественную оценку пространственного распределения элементов в изучаемом образце или оптимизировать процедуру микроструктурирования поверхности, в которой применяется сфокусированный пучок, необходимо учитывать реальную его форму, т.е. реальное пространственное распределение числа протонов или интенсивности рентгеновского излучения на поверхности образца. Задача определения формы сфокусированных протонного и рентгеновского зондов решается в третьей главе диссертации.

Возможность исследования морфологической структуры и состава локальных областей изделий микро- и нанoeлектроники, обнаружения внутренних дефектов или проведения метрологического контроля не только в приповерхностных слоях, но и в объеме изделия, предоставляют рентгеновские томографические методы. В этих методах рентгеновские изображения от объекта собираются с разных ракурсов (под разными проекционными углами). Метод рентгеновской томографии заключается в реконструкции 3D цифрового изображения внутренней морфологической структуры просвечиваемого объекта по набору 2D рентгеновских проекций. Задачам, возникающим в рентгеновской томографии, посвящены 4 и 5 главы диссертационной работы. Принципиальная схема сбора томографических абсорбционных проекций представлена на рисунке 1.1. Для зондирования могут быть использованы рентгеновские пучки разной формы: сфокусированный пучок, параллельный пучок, веерный или конусный пучки. При сканировании микропучком пространственно-разрешаю-

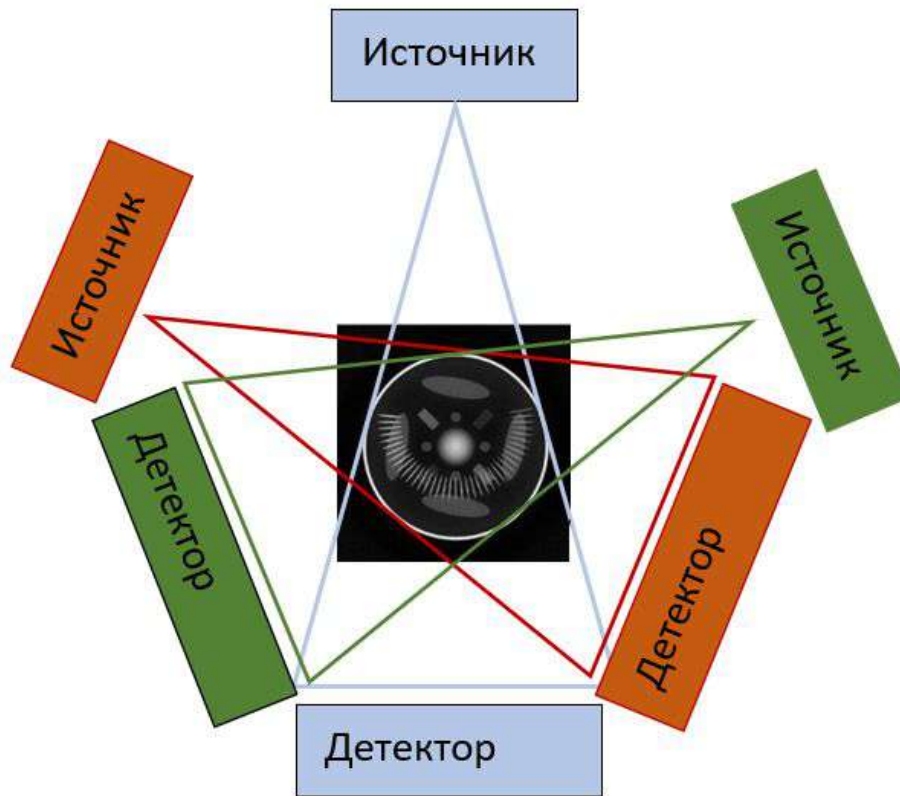


Рисунок 1.1 — Принципиальная схема сбора томографических проекций с разных ракурсов.

щего детектора не требуется. При зондировании параллельным или конусным пучками пространственное разрешение достигается за счет использования пространственно-разрешающих детекторов для регистрации сигналов. Томографический комплекс это всегда аппаратно-программный комплекс (АПК). В задачи аппаратной части входит получение проекций (генерация рентгеновского излучения, организация многоракурсной съемки, регистрация сигналов) и передача их в вычислитель. В задачи программной части включены управление и контроль за сбором и передачей проекций, реконструкция цифрового изображения объекта с использованием собранных проекций. Современные томографические комплексы снабжены часто инструментами анализа реконструированных цифровых изображений.

О необходимости создания рентгеновских методов контроля корпусированных интегральных схем заговорили в 2000-х годах [12]. В 2005 году появились работы об использовании рентгеновских микроскопов для контроля корпусированных систем [13], а в 2010 году были высказаны идеи об использовании томографических схем для уточнения результатов контроля [14]. С появлением

технологий 2.5D и 3D упаковки о необходимости использования рентгеновской томографии для контроля корпусированных систем стали говорить чаще [15].

сегодня существуют только в виде проектов, отдельных лабораторных экспериментальных комплексов или синхротронных станций. Одна из причин такого положения дел заключается в следующем. С ростом пространственного разрешения (речь об области субмикрон) требования к программной части АПК значительно возрастают, поскольку программное обеспечение должно парировать ошибки позиционирования и вибрационные эффекты. Особую важность приобретают методы автоматической калибровки узлов томографа. В диссертационном исследовании предложенные методы автоматической калибровки узлов томографа представлены в заключительной главе.

В диссертационном исследовании предложены методы решения обратных задач, т.е. задач восстановления цифрового описания исследуемого объекта по набору сигналов. Все обратные задачи решаются с использованием математических моделей формирования сигналов – математических выражений, которые связывают измеряемый сигнал с функцией, описывающей изучаемый объект. В следующих разделах данной главы для рентгеновских методов EXAFS спектроскопии, сканирующей микроскопии и томографии приведен обзор существующих математических моделей формирования сигналов и изображений. Предложенные методы решения обратных задач описываются в следующих главах.

1.2 Модель формирования протяженной тонкой структуры рентгеновского спектра поглощения

EXAFS спектроскопия - это рентгеновский метод исследования, позволяющий получить уникальную информацию о структуре материала. Метод базируется на анализе дальней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения. На рисунке 1.2 приведена принципиальная схема сбора рентге-

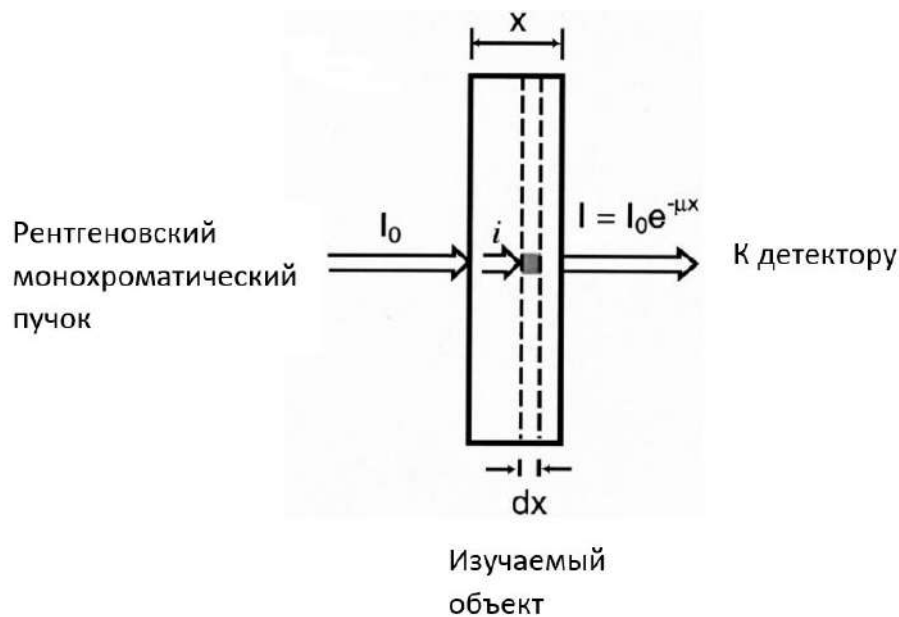


Рисунок 1.2 — Принципиальная схема сбора сигнала [16].

новского излучения, прошедшего через поглощающий образец. Исследуемый образец помещается в держатель. Зондирование проводится рентгеновским параллельным монохроматическим $\Delta E/E < 10^{-3}$ пучком. Изменение энергии рентгеновского излучения выполняется оптической системой, установленной в тракт спектрокопа. Извлекаемая структурная информация о материале это усредненная по зондируемому объему информация. Значение сигнала I , формируемое потоком рентгеновских квантов, прошедших через объект, согласно закону Бугера-Ламберта-Бера, описывается выражением:

$$I(E) = I_0(E) \exp(-\mu(E)X). \quad (1.1)$$

Здесь I_0 – интенсивность зондирующего излучения, μ - линейный коэффициент поглощения рентгеновского монохроматического излучения энергии E материалом объекта. Определим значение линейного коэффициента ослабления для

однородного материала толщиной X :

$$\mu(E) = X^{-1} \ln\left(\frac{I_0(E)}{I(E)}\right). \quad (1.2)$$

Зависимость коэффициента поглощения как функция от $(E - E_k)$, представленная на рисунке 1.3, имеет три особенности. Первая особенность, демонстрирующая квантово-механическое явление поглощения рентгеновских лучей атомами, – уменьшение поглощения рентгеновского излучения с ростом энергии. Вторая особенность – это резкий подъем значения при определенных энергиях, называемых краями поглощения E_k . Его положение уникально для конкретного типа поглощающего атома и соответствует энергии возбуждения электронов внутренней оболочки. Скачки являются сигнатурами типов атомов, присутствующих в материале. Третья особенность – наличие в области края поглощения осциллирующей структуры, убывающей по амплитуде с ростом энергии. Начальная амплитуда колебаний составляет обычно несколько процентов от величины поглощения края. Дальняя тонкая структура рентгеновского спектра поглощения (область EXAFS) относится к осциллирующей структуре, располагаясь в интервале приблизительно от 30 эВ до 1500-2000 эВ после края поглощения (рис. 1.3). Для иллюстрации выбора диапазона сканирования по энергии в методе EXAFS

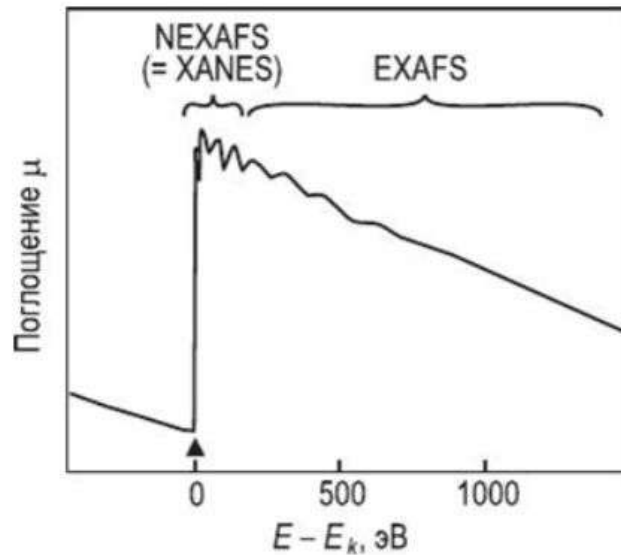


Рисунок 1.3 — Коэффициент поглощения [17]. E_k - энергия края поглощения ионизированного атома.

на рис. 1.4 приведены зависимости значений массовых коэффициентов ослабления рентгеновского излучения от величины энергии. Представлены кривые для Pb, Cd, Fe. Скачки поглощения (края) выделены цветными стрелками. Черным

цветом для Pb, синим для Cd и красным для Fe. Выбранный край для ионизируемого атома определяет левую границу диапазона сканирования. Сканирование по энергии проводится с шагом 100 эВ. Спектр EXAFS феноменологически

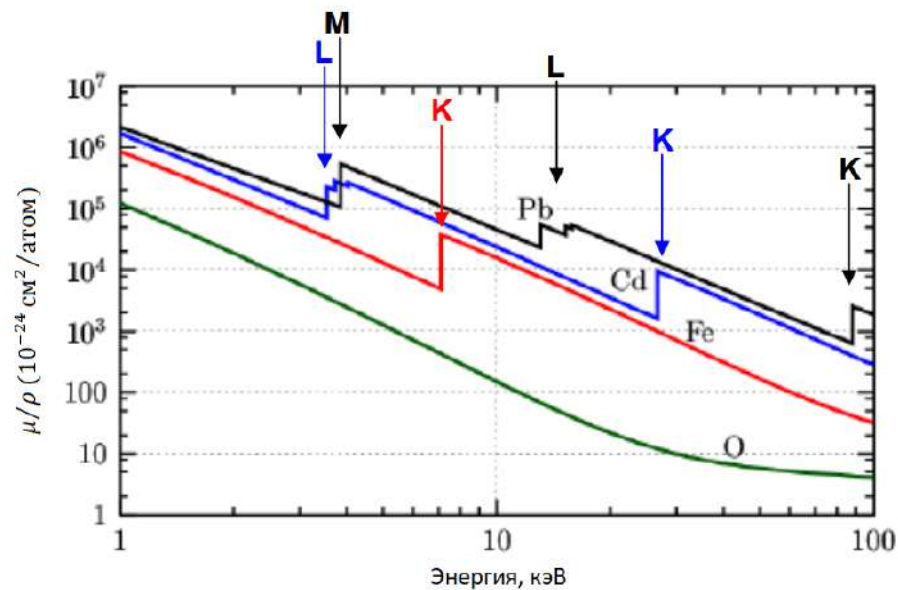


Рисунок 1.4 — Массовые коэффициенты поглощения. Края поглощения для Pb выделены черным цветом, для Cd - синим цветом, для Fe - красным цветом.

определяют как нормированную осциллирующую часть за краем поглощения [16; 18](рис. 1.5). EXAFS осцилляции определяются ближайшим окружением

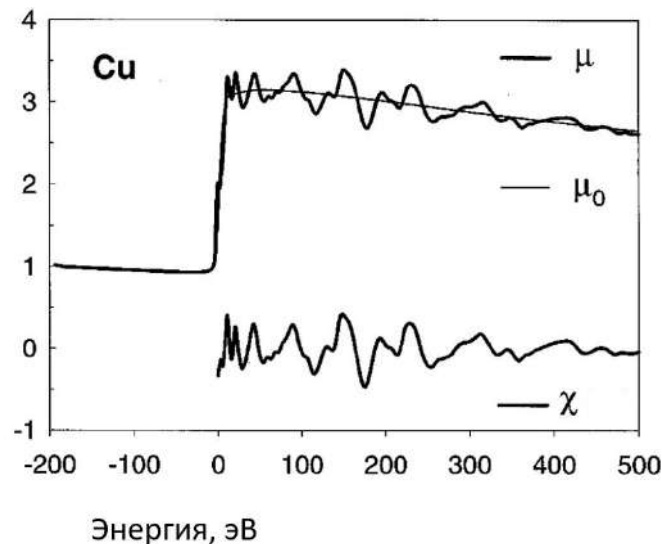


Рисунок 1.5 — Иллюстрация к процедуре выделения EXAFS спектра.

ионизируемого атома и не чувствительны к наличию или отсутствию дальнего порядка, поэтому их наблюдают в кристаллических и аморфных объектах, сложных молекулах, твердых растворах и т.п. [18]. Осцилляции обусловлены

процессами упругого рассеяния фотоэлектронной волны в потенциальном рельефе поглощающего атома (рис. 1.6) [18]. Это рассеяние ведет к формированию

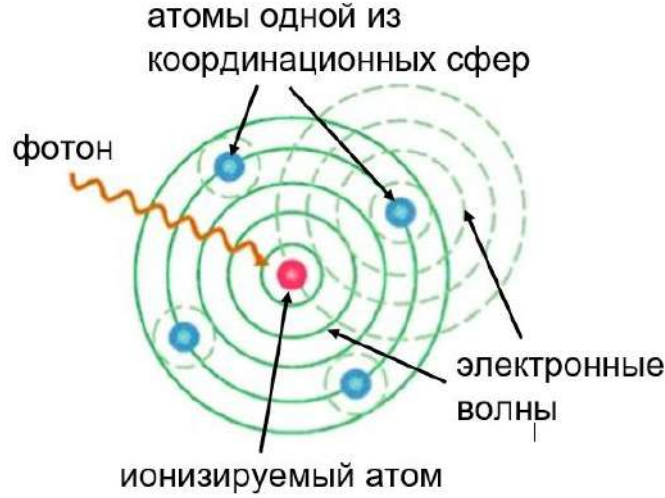


Рисунок 1.6 — Принципиальная схема формирования осцилляций в спектре поглощения.

отраженных вторичных электронных волн, которые интерферируют с первичной волной фотоэлектрона. В 1971 г. Сауерс, Штерн и Литл [19] предложили количественную параметризацию модели EXAFS, которая стала стандартом для многих современных исследований:

$$\chi(k) = S_0^2 \sum_{i=1}^n \frac{N_i}{R_i^2} \frac{F_i(k)}{k} \exp\left(-\frac{2R_i}{\lambda(k)}\right) \exp(-2\sigma_i^2 k^2) \sin(2kR_i - \Psi(k, R_i)), \quad (1.3)$$

где $\chi(k)$ – EXAFS спектр, k – волновой вектор фотоэлектрона, S_0 – фактор затухания амплитуды сигнала [16], i – номер координационной сферы, N_i – (координационное число) число атомов к координационной сфере радиуса R_i , F_i – амплитуда обратного рассеяния, $\lambda(k)$ – длина свободного пробега фотоэлектрона, σ^2 – фактор Дебая-Валлера (обусловлен тепловыми эффектами, которые заставляют все атомы колебаться вокруг своих равновесных положений), Ψ – фазовый сдвиг, обусловленный потенциалом поглощающего атома. Множитель $\exp(-\frac{2R_i}{\lambda(k)})$ описывает неупругие взаимодействия электронов. Значения амплитуд обратного рассеяния F_i , сдвига фазы Ψ и длины свободного пробега $\lambda(k)$ могут быть взяты из таблиц [20] или рассчитываются с использованием программы FEFF [21], которая имеет версию с открытой лицензией. В качестве примера на рисунке 1.7 приведена амплитуда обратного рассеяния для атомов фосфора, рассчитанная с помощью FEFF. Амплитуда обратного рассеяния ло-

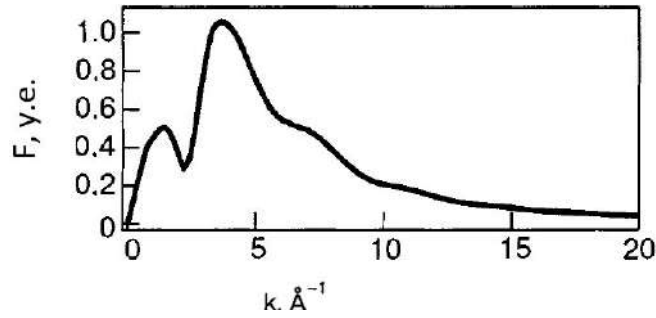


Рисунок 1.7 — Амплитуда обратного рассеяния для атомов фосфора.

кализует вклады единичных актов рассеяния в измеряемом сигнале. Поскольку в модели (1.3) Сауерса, Штерна и Литла [19] EXAFS осцилляции описываются функцией $\sin$ от волнового вектора k , то при анализе спектров переходят от энергии фотонов $h\nu$ к волновому вектору фотоэлектрона [22] :

$$k = \sqrt{\frac{2m_e}{\hbar^2}(h\nu - E_0)}. \quad (1.4)$$

Здесь m_e – масса электрона, $\hbar$ – приведенная постоянная Планка, E_0 – энергия края поглощения. Выбираемое значение степени k при взвешивании EXAFS спектра зависит от скорости затухания осцилляций, т.е. от окружения центрального атома. Пример EXAFS спектра слоистого двойного гидроксида $Zn-Al$ [23] приведен на рисунке 1.8. Измерения проводились на K -крае поглощения цинка. Сплошной линией показан результат измерения. Результат моделирования с использованием программы FEFF представлен пунктирной линией.

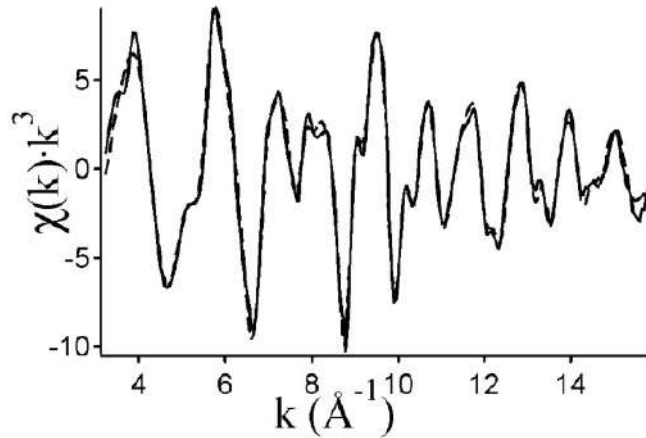


Рисунок 1.8 — EXAFS спектр, взвешенный на k^3 (сплошная линия - обработанный результат измерения, пунктир - результат моделирования) [23].

Сауерс, Штерн и Литл [19] предложили методику обработки взвешенных EXAFS спектров (рис. 1.8) с использованием Фурье преобразования (рис. 1.9). Если пренебречь сдвигом фазы в выражении 1.3, то положения максимумов

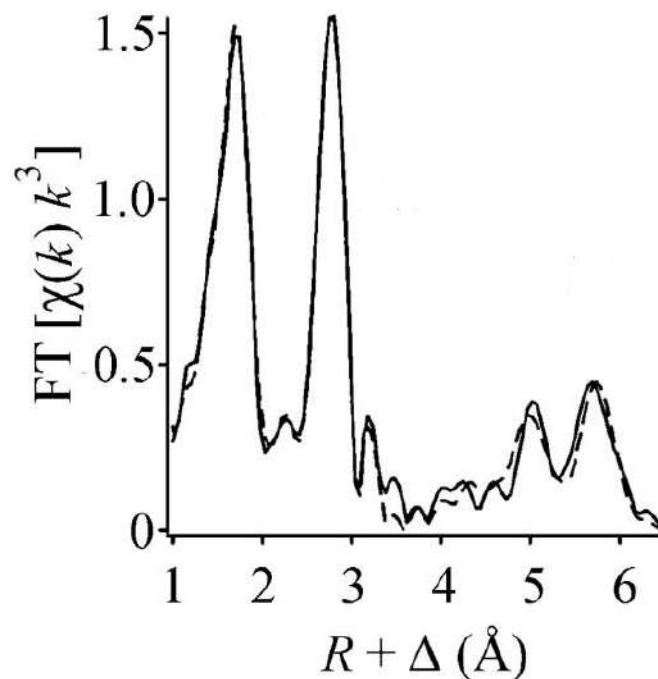


Рисунок 1.9 — Фурье спектр EXAFS сигнала.

амплитуды Фурье преобразования (рис. 1.9) дают оценки радиусов координационных сфер в геометрической модели ближнего окружения ионизируемого (поглощающего) атома, в приведенном примере – атома Zn . После определения радиусов координационных сфер тип рассеивающих атомов идентифицируется с ограниченной точностью путем подгонки параметров модели, чтобы различие между модельным и измеренным спектрами было минимальным. Такой подход хорошо работает, если в изучаемой структуре в каждой координационной сфере присутствует только один тип атомов. Если координационная сфера содержит разные типы атомов, т.е. под одним пиком в амплитуде Фурье преобразования (рис. 1.11) «уложены» процессы рассеяния на разных типах атомов, то возникают трудности с выбором критерия сравнения спектров и наличием локальных минимумов в многопараметрическом пространстве при использовании процедуры подгонки. Пример такой структуры представлен на рисунке 1.10. Ее EXAFS спектр и был приведен на рисунке 1.8. Раскрашенная модель была построена с использованием предложенного в диссертационной работе метода [24], который описан во второй главе. Это модель октаэдрического слоя $Zn - Al$ слоистого двойного гидроксида. Октаэдры $Zn(OH)_6$ показаны зеленым цветом, октаэдры $Al(OH)_6$ показаны желтым цветом. Первые три металлические координационные сферы показаны черными окружностями. Поскольку частотные компоненты EXAFS спектра локализованы в пространстве k , а элементы традиционно используемого базиса Фурье в пространстве не локализованы,

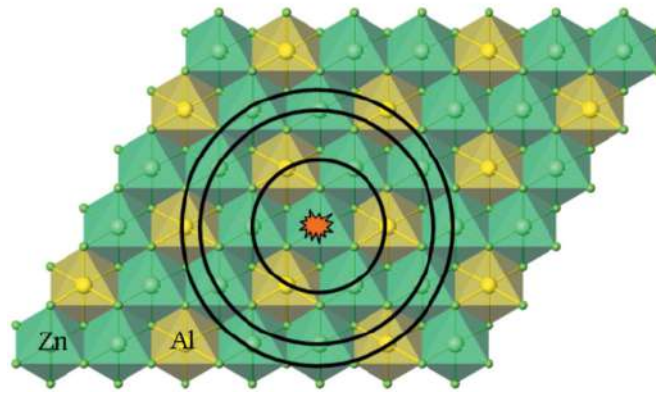


Рисунок 1.10 — Модель атомной структуры [24].

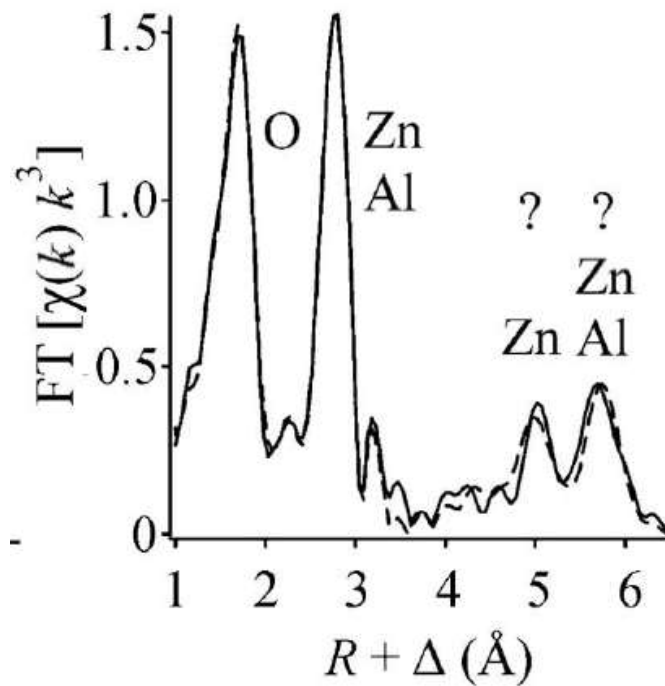


Рисунок 1.11 — Фурье спектр EXAFS сигнала с указанием проблемных мест.

то для анализа спектра требуется дополнять Фурье анализ процедурой подгонки. В диссертации предложено строить пространственно локализованные базисы, применение которых для анализа EXAFS спектра позволит избежать процедуры подгонки. Предложенные методы анализа EXAFS спектров с использованием новых базисов, исследование их свойств и примеры использования представлены во второй главе.

1.3 Модели сигналов в сканирующих методах РІХЕ и рентгенофлуоресцентной микроскопии

Сканирующие методы с использованием микропучков сегодня применяются для анализа локального состава образцов [25; 26], в процессах микроструктурирования [27] и т.п. Пример флуоресцентных карт для линий фосфора, серы и железа при сканировании образца протонным микрозондом (метод РІХЕ) [28] приведен на рис. 1.12. В каждом пикселе такого изображе-

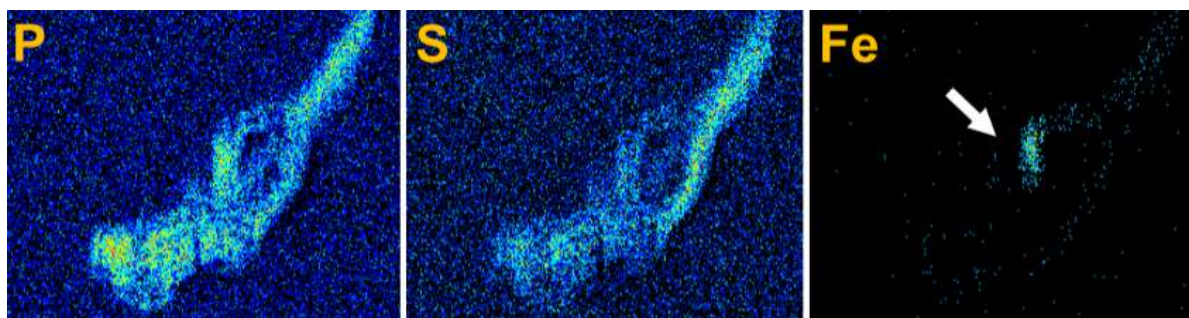


Рисунок 1.12 — Флуоресцентные карты для линий фосфора, серы и железа. Метод РІХЕ. Сканирование проводилось протонным пучком энергии 3 мэВ. Толщина образца 60 микрон [28].

ния записан флуоресцентный сигнал, собранный из локальной области образца, покрытой зондом. Толщина области, генерирующей сигнал, определяется длиной ослабления регистрируемого характеристического излучения.

Для метода РІХЕ принципиальная измерительная схема представлена на рисунке 1.13. Чтобы провести количественную оценку локального состава сканируемых образцов или сформировать изображение на поверхности с высокой точностью необходимо знать форму используемого микрозонда. Во второй главе диссертационного исследования будут описаны предложенные методы определения 2D формы протонного и рентгеновского микрозондов, которые основаны на математической обработке флуоресцентных карт, получаемых при сканировании тестовых объектов. В каждом пикселе карты записано значение флуоресцентного сигнала при положении центра пучка, используемого в процедуре сканирования, соответствующего пикселу карты. Ниже последовательно представлены две модели формирования флуоресцентных сигналов при латеральном сканировании тонкого образца бесконечно тонкими зондами двух типов - протонным и рентгеновским.

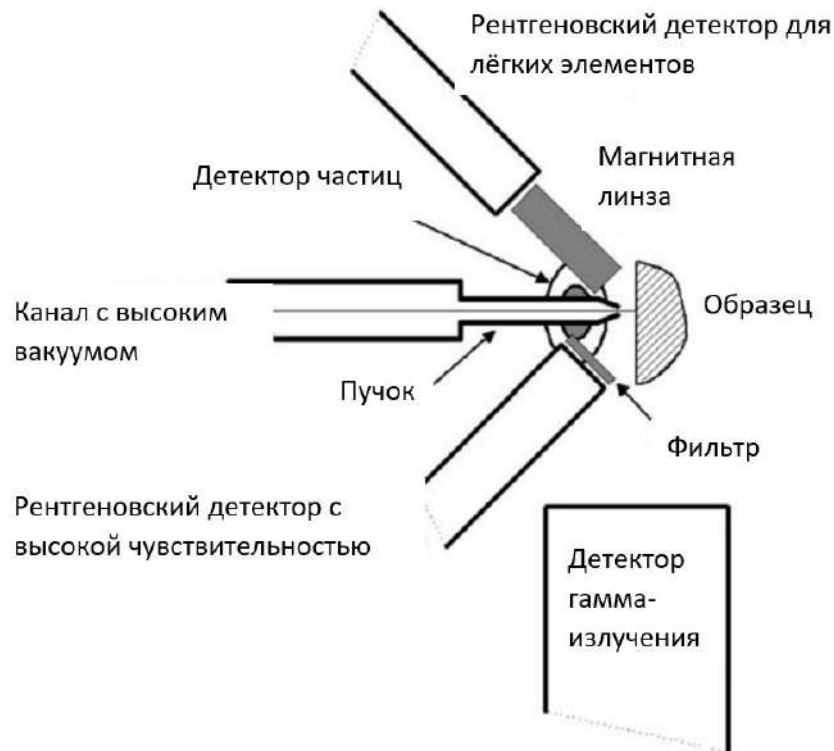


Рисунок 1.13 — Принципиальная схема сбора сигнала в методе PIXE [29].

Модель формирования флуоресцентного сигнала при сканировании протонным пучком.

Принципиальная схема формирования флуоресцентного сигнала при сканировании протонным бесконечно тонким зондом объекта с ортотропным профилем на поверхности проиллюстрирована на рисунке 1.13. Пучок падает на поверхность образца перпендикулярно и прямолинейно распространяется вглубь образца. Тормозная способность материала характеризует ионизационные потери. Ионизация атомов и генерация характеристического излучения происходит на всем пути проникновения протонов. Регистрируются не все сгенерированные флуоресцентные кванты, а только те, которым удалось достигнуть поверхности образца и которые попали в телесный угол сбора детектора. Часть квантов полностью поглощаются в образце. Закон Бугера-Ламберта-Бера описывает поглощение флуоресцентных квантов на пути к детектору. Флуоресцентным сигналом считается число зарегистрированных детектором флуоресцентных квантов. Пусть сканирование ведется бесконечно тонким пучком. Сканируется структура с нанесенным слоем, имеющим ортотропный рельеф. Регистрируется сигнал от микроструктурированного однородного нанесенного слоя. Ортотропность нам потребуется при решении обратной задачи, сейчас мы на этом

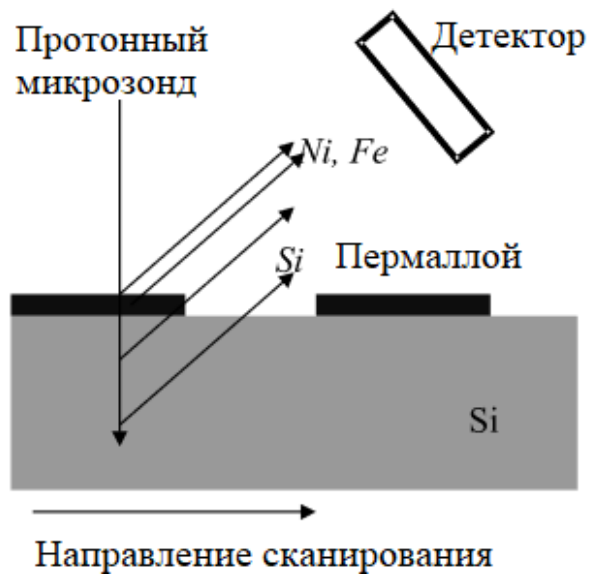


Рисунок 1.14 — Принципиальная схема формирования сигнала при сканировании бесконечно тонким протонным микрозондом структуры с ортотропным профилем поверхности [30].

останавливаться не будем. Пример участка ортотропной структуры приведен на рисунке 1.15.

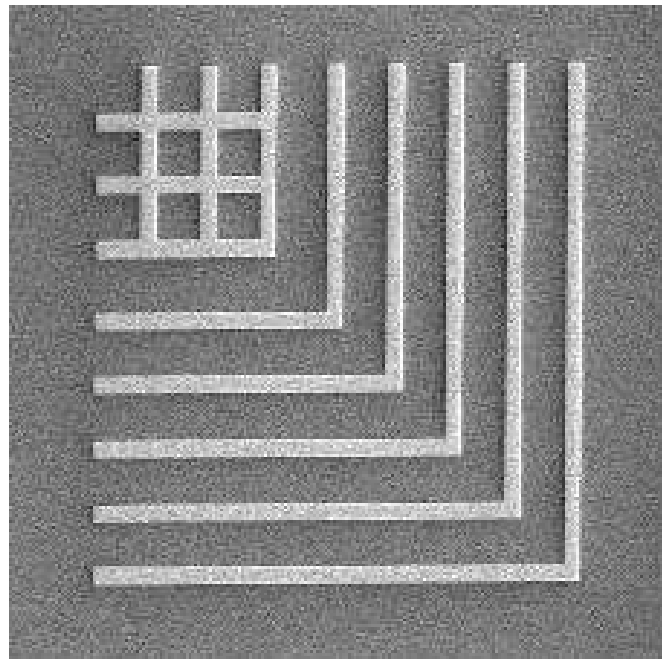


Рисунок 1.15 — Участок ортотропной референсной структуры [30].

Чтобы записать модель формирования флуоресцентного сигнала при сканировании объекта бесконечно тонким протонным зондом, введем декартову систему координат. Ось Z направим вниз, согласовав ее направление с направлением проникновения пучка протонов. Направление оси X задает направление сканирования. Пусть для простоты объект бесконечен, т.е. занимает область

$A = \{-\infty < x < \infty\}$. Тогда выражение, которое связывает измеряемую интенсивность флуоресцентного сигнала I_z от элемента с атомным номером Z и величину концентрации данного элемента N_z , записывается в виде [31]:

$$I_z(x) = N_p(x) \mathcal{E}_d N_z(x) \int_{E_p^0}^{E_p^f} \frac{\omega(Z, E_p) \sigma(Z, E_p, x) T(Z, E_p, x, Det_{E_p})}{S(Z, E_p, x)} dE_p, \quad (1.5)$$

где x задает положение протонного бесконечно тонкого пучка, форму которого будем аппроксимировать дельта-функцией Дирака, на поверхности, N_p определяет число протонов, упавших на поверхность в единицу времени (число протонов с энергией E_p^0), $\mathcal{E}_d$ – чувствительность используемого энергодисперсионного детектора, $\omega(Z, E_p)$ – флуоресцентный выход [32] для линии, возбуждаемой E_p , $\sigma(Z, E_p)$ – сечение ионизации атома с атомным номером Z , $T(Z, E_p, x, Det_{E_p})$ – функция, описывающая ослабление характеристических рентгеновских лучей на пути к детектору, Det_{E_p} – телесный угол детектора, $S(Z, E_p, x)$ – тормозная способность зондируемого объекта. Ионизационные потери учтены в пределах интеграла $\{E_p^0, E_p^f\}$. Для расчета тормозной способности в конкретном материале используются табулированные значения, рассчитанные с использованием полуэмпирической модификации подхода Бете-Блоха [33]. Сечения ионизации атомов рассчитываются согласно [34]. Ослабление характеристического излучения, сгенерированного при взаимодействии с протонами энергии E_p , на пути к детектору рассчитывается согласно закону Бугера - Ламберта - Бера с учетом положения детектора:

$$T(Z, E_p, x, Det_{E_p}) = \exp\left(-\int_{L(x, Det_{E_p})} \mu(E_p, Z, l) dl\right), \quad (1.6)$$

В модели (1.5) предполагается, что протонный зонд бесконечно тонкий, детектор характеризуется чувствительностью и телесным углом сбора, объект описывается, как распределение источников флуоресценции и среда, ослабляющая протонный пучок и сгенерированный флуоресцентный сигнал.

Флуоресцентные карты, пример представлен на рис. 1.16, полученные с помощью сканирующей РИХЕ микроскопии, без дополнительной математической обработки не дают количественной информации о пространственном распределении концентрации элемента. Есть две основные причины этому препятствующие. Первая причина - интенсивность сигнала от источников флуоресценции изменяется матричными эффектами. Это потери энергии протонами на пути проникновения в образец и ослабление характеристического

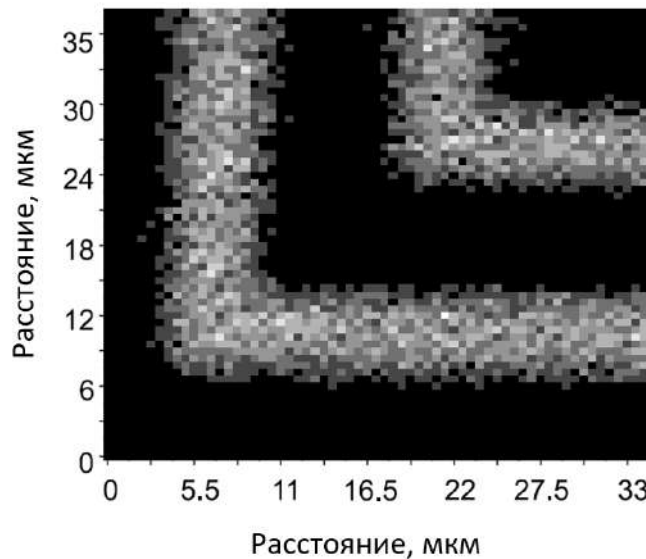


Рисунок 1.16 — Пример участка флуоресцентной карты *Ni* [30].

рентгеновского излучения на пути от места генерации к детектору. Вторая причина - сигнал, формируемый сканируемой структурой, размывается вследствие использования в реальных условиях не бесконечно тонкого пучка для зондирования. Чтобы получить количественную информацию о сканируемой структуре необходимо принять в рассмотрение реальную форму протонного микрозонда, использованного для сканирования. Предложенный в диссертационном исследовании метод определения формы протонного микрозонда, использующий уточненную модель формирования флуоресцентного сигнала, описан в разделе 3.1. Там же приведена уточненная модель формирования сигнала.

Параллельно с методами, использующими для диагностики или структурирования поверхностей протонные микрозонды, идет развитие рентгеновских сканирующих методов [35]. Сегодня они применяются для контроля чистоты поверхностей, контроля состава композитов с управляемыми физико-химическими характеристиками для твердотельных оптоэлектронных приложений, в частности, создания сцинтилляторов для рентгеновской визуализации [36] и пр.

Модель формирования флуоресцентного сигнала при сканировании рентгеновским пучком.

При сканировании объектов монохроматическим рентгеновским излучением энергии E флуоресцентный сигнал генерируется на всем пути зондирования. Принципиально схема сканирования ничем не отличается от случая применения протонного зонда. Пусть пучок падает перпендикулярно поверхности образца. Чтобы записать выражение, которое связывает описание объекта и параметры измерения с величиной регистрируемого сигнала, т.е. записать мо-

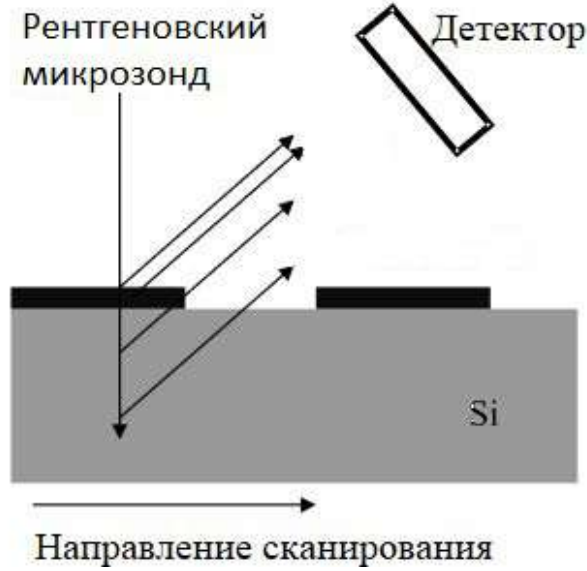


Рисунок 1.17 — Принципиальная схема формирования сигнала при сканировании бесконечно тонким рентгеновским микрозондом структуры с ортотропным профилем поверхности на кремниевой подложке.

дель формирования флуоресцентного сигнала при зондировании рентгеновским монохроматическим бесконечно тонким зондом, введем декартову систему координат SOT . Ось S задает направление зондирования, ось T определяет направление сканирования. Пусть для простоты объект бесконечен, т.е. занимает область $A = \{-\infty < t < \infty\}$. Объект опишем пространственным распределением источников флуоресценции. Каждый источник флуоресценции описывается не только своим положением (s, t) и концентрацией $c(s, t)$ флуоресцирующего элемента, но также включает линейный коэффициент ослабления падающего рентгеновского излучения энергии E флуоресцирующим элементом μ_F^E и квантовым выходом [37] излучения наблюдаемой серии флуоресцирующего элемента Z (рис. 1.18). Для излучения K -серии элемента с атомным номером Z обозначим квантовый выход через ω_k^Z . Тогда распределение источников флуоресценции описывается функцией вида:

$$p(s, t) = c(s, t) \mu_F^E \omega_k^Z. \quad (1.7)$$

Связь между величиной генерируемого в точке (s, t) рентгено-флуоресцентного излучения K -серии элемента Z энергии E_F при сканировании бесконечно тонким рентгеновским зондом энергии E , распределением источников флуоресценции и схемой сканирования описывается следующим выражением [38]:

$$dI(s, t) = I_0 p(s, t) \mathcal{E}_d T(s, t, E) F(s, t, E_F, Det). \quad (1.8)$$

Здесь I_0 – начальная интенсивность бесконечно тонкого рентгеновского зонда (число фотонов в единицу времени), форму которого будем аппроксимировать дельта-функцией Дирака, $p(s,t)$ описывает источник флуоресценции, $\mathcal{E}_d$ – чувствительность детектора, $T(s,t,E)$ описывает ослабление зондирующего излучения на пути проникновения в образец, $F(s,t,E_F, Det)$ описывает ослабление характеристического излучения E_F на пути выхода из образца, Det – телесный угол детектора. Ослабление рентгеновского излучения описывается законом Бугера-Ламберта-Бера. Ослабление зондирующего излучения:

$$T(s,t,E) = \exp\left(- \int_{s_{min}}^s \mu_0^E(s',t) ds'\right) \quad (1.9)$$

и ослабление характеристического излучения:

$$F(s,t,E_F, Det) = \exp\left(- \int_{L(s,t,Det)} \mu_F(l) dl\right). \quad (1.10)$$

Здесь $\mu_0^E(s',t)$ – линейный коэффициент ослабления зондирующего рентгеновского излучения в точке (s',t) , $\mu_F(l)$ – линейный коэффициент ослабления характеристического рентгеновского излучения в точке, положение которой задано l .

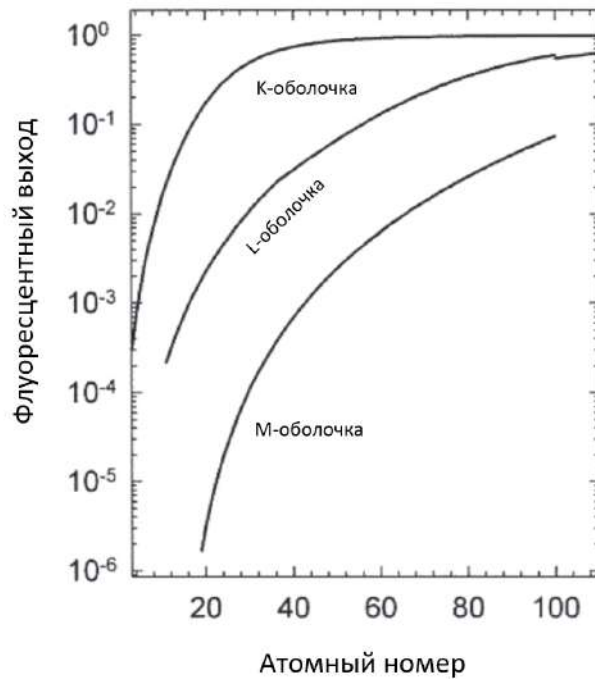


Рисунок 1.18 — Флуоресцентный выход для K , L , M оболочек для $3 \leq Z \leq 110$, усредненный по подоболочкам [39].

Просуммировав вклады от всех источников флуоресценции, расположенных на пути проникновения рентгеновского пучка вглубь образца, получаем выражение, которое связывает величину регистрируемого в единицу времени флуоресцентного сигнала, формируемого при сканировании бесконечно тонким монохроматическим рентгеновским пучком, с описанием объекта и траекторией сканирования:

$$I(t) = I_0 \mathcal{E}_d \int_{s_{min}}^{s_{max}} p(s^*, t) T(s^*, t, E) F(s^*, t, E_F, Det) ds^*. \quad (1.11)$$

Здесь s_{min} – координата точки на поверхности образца, соответствующей положению бесконечно тонкого зонда, s_{max} определяется длиной ослабления E_F в зондируемом материале. В модели (1.11) предполагается, что рентгеновский зонд монохроматический и бесконечно тонкий, детектор характеризуется своей чувствительностью и телесным углом сбора флуоресцентного излучения, объект участвует в трех процессах – генерация флуоресцентного излучения, ослабление зондирующего излучения, ослабление характеристического излучения. Флуоресцентные карты, получаемые в методе сканирующей рентгеновской микроскопии, без дополнительной математической обработки дают количественной информации о пространственном распределении концентрации элементов. Это связано с тем, что формируемые изображения размываются. Размытие обусловлено использованием не бесконечно тонких пучков для зондирования. Чтобы получить количественную информацию о зондируемом изделии необходимо принять в рассмотрение реальную форму рентгеновского микрозонда, использованного для сканирования, при математической обработке получаемых флуоресцентных карт. Предложенный в диссертационном исследовании метод определения формы рентгеновского микрозонда, использующий уточненную модель формирования флуоресцентного сигнала, описан в разделе 3.2. Там же приведена уточненная модель формирования сигнала.

1.4 От сканирующей микроскопии к томографии

Применение сканирующих рентгеновских методов для исследования локального состава или локальной морфологической структуры объектов, толщина которых превышает длину ослабления зондирующего рентгеновского излучения в несколько раз, дает низкие по точности оценки исследуемых параметров. Для изучения внутренней морфологической структуры и состава таких объектов применяется метод томографии. В диссертационном исследовании развиваются методы трансмиссионный и трансмиссионно-эмиссионной томографии. Суть метода трансмиссионной томографии заключается в следующем. Объект зондируется рентгеновским излучением с разных ракурсов или, другими словами, под разными углами, называемыми проекционными. Прошедшее через объект и ослабленное на этом пути рентгеновское излучение регистрируется. Для каждого проекционного угла регистрируется проекция. Если для зондирования используются сфокусированный пучок и детектор без пространственного разрешения, то процедура сканирования в двух направлениях позволяет собрать 2D проекцию (изображение) трехмерного объекта. Если для зондирования используется широкий пучок, то применение позиционного чувствительного детектора для регистрации ослабленного при прохождении через объект излучения позволяет зарегистрировать 2D проекцию трехмерного объекта сразу. Проекции от объекта собираются с разных ракурсов. После применения к собранному набору проекций процедур коррекции, нормализации и выполнения этапа томографической реконструкции восстанавливается 3D цифровое изображение объекта.

Чтобы построить 3D цифровое изображение прозондированного под разными углами объекта необходимо выполнить операцию реконструкции. Классические методы томографической реконструкции, создаваемые в восьмидесятые-девяностые годы прошлого столетия, были построены в предположении идеальных условий съемки. Таковыми являются:

- монохроматическое зондирование бесконечно тонким рентгеновским пучком, энергия которого такова, что все интересующие включения объекта вносят детектируемый вклад в контраст регистрируемого абсорбционного сигнала;
- параметры геометрии измерения известны с бесконечной точностью;
- отклик детектора строго пропорционален числу прилетевших квантов;

отсутствуют ограничения на время выполнения реконструкции и на объем памяти, требуемой для вычислений. Модель для идеальных условий съемки рассматривается в разделе 1.5.

В диссертационной работе уточнена математическая модель формирования проекции с учетом условий съемки, отличающихся от идеальных, и предложены методы томографической реконструкции по проекциям, собираемым в условиях, отличающихся от идеальных. Предложенные методы, представленные в третьей главе, опираются на уточненную модель. Предложенные методы позволяют проводить реконструкцию при наличии ограничений на дозовую нагрузку и/или на вычислительное время и/или на объем используемой памяти.

В следующих разделах данной главы рассматриваются модель формирования томографической проекции с использованием микрозонда (раздел 1.5), модель формирования рентгено-флуоресцентной проекции (раздел 1.6), модель формирования проекции при зондировании монохроматическим параллельным пучком (раздел 1.7), модель формирования проекции при зондировании конусным пучком (раздел 1.8) и модель формирования проекции при наличии оптического элемента между объектом и детектором (раздел 1.9). В трансмиссионно-эмиссионной томографии (раздел 1.6) применяется сканирование объекта монохроматическим сфокусированным пучком. Для регистрации используется интегральный (по пространству) детектор с энергетическим разрешением. Детекторы с пространственным и одновременно энергетическим разрешением сегодня проходят испытания и оптимизируются в нескольких лабораториях мира и в данном диссертационном исследовании не рассматриваются.

1.5 Модель формирования томографической проекции с использованием микропучка

При зондировании объекта бесконечно тонким монохроматическим рентгеновским пучком значение I_1 , формируемое потоком рентгеновских квантов, прошедших через объект в направлении «источник-детектор» за единицу времени, в бесконечно малом пикселе идеального детектора, согласно закону Бугера-Ламберта-Бера, описывается следующим выражением [40]:

$$I_1 = I_0 \exp \left(- \int_L \mu(l) dl \right). \quad (1.12)$$

Здесь I_0 – начальная интенсивность пучка (число фотонов в единицу времени), μ – линейный коэффициент ослабления рентгеновского излучения используемой для зондирования энергии материалом объекта, L задает направление зондирования. Если зондируемый объект однороден, то, переписав выражение (1.12), легко определить значение линейного коэффициента ослабления рентгеновского излучения используемой энергии материалом толщиной L :

$$\mu = L^{-1} \ln \left(\frac{I_0}{I} \right). \quad (1.13)$$

Пусть 3D объект не является однородным, а имеет локальные области разного состава. Рассмотрим бесконечно тонкое двумерное сечение такого 3D объекта. Введем на плоскости сечения декартову систему координат XOY (рис. 1.19). Будем описывать сечение исследуемого объекта функцией распределения линейного коэффициента ослабления $\mu(x, y)$.

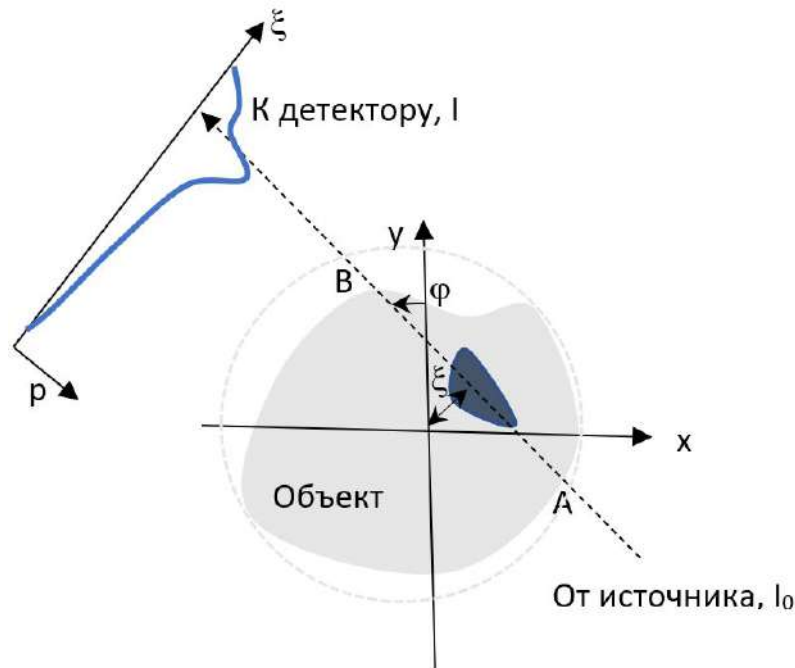


Рисунок 1.19 — Принципиальная схема формирования томографической проекции при сканировании рентгеновским микронзондом [41].

Пусть процедура сканирования сечения объекта бесконечно тонким рентгеновским монохроматическим пучком реализуется перемещением пучка в плоскости сечения от одного края сечения объекта к другому. Будем задавать текущее положение луча расстоянием ξ от начала координат до луча AB ,

задающего направление зондирования. Тогда интервал $[\xi_{min}, \xi_{max}]$ определит возможные положения луча для заданного ракурса, необходимые для сбора томографической проекции, т.е. определит поле сканирования. Поскольку объект вращается при смене ракурса, то поле, содержащее сечение объекта, является окружностью. Обозначим текущий ракурс углом φ , который образует луч AB с осью Y . Тогда пара φ и ξ однозначно определит положение бесконечно тонкого зонда на плоскости сечения как пересечение луча AB с окружностью радиуса ξ_{lim} . Запишем выражение, которое связывает значение сигнала, формируемое при прохождении бесконечно тонкого зонда через сечение объекта, и функцию объекта (распределение $\mu(x, y)$):

$$I(\varphi, \xi) = I_0(\varphi, \xi) \exp \left(- \iint \mu(x, y) \delta(x \cos \varphi + y \sin \varphi - \xi) dx dy \right). \quad (1.14)$$

Перемещая зонд по горизонтали таким образом, чтобы поле сканирования покрыло полностью томографируемое сечение объекта с текущего ракурса, соберем 2D проекцию для текущего ракурса. Шаг сканирования бесконечно тонким лучом и величина проекционного угла определяют пространственное разрешение, т.е. минимальный размер локальной области, внутри которой значение линейного коэффициента ослабления принимаем постоянным. После регистрации текущей проекции объект поворачивается на некоторый угол и регистрируется следующая проекция. Линеаризуем выражение 1.14 и введем новое обозначение:

$$p(\varphi, \xi) = \ln \frac{I_0(\varphi, \xi)}{I(\varphi, \xi)} = \iint \mu(x, y) \delta(x \cos \varphi + y \sin \varphi - \xi) dx dy. \quad (1.15)$$

Назовем $p(\varphi, \xi)$ лучевой суммой для проекционного угла φ и положения луча ξ (кривая на рис. 1.19). Легко увидеть, что выражение 1.15 это выражение для расчета преобразования Радона для двумерного случая. Преобразование Радона переводит функцию в набор ее линейных интегралов. Пример сечения объекта, заданного распределением линейного коэффициента ослабления $\mu(x, y)$, в декартовой системе координат представлен на левом рисунке 1.20. На правом рисунке 1.20 приведен результат его преобразования Радона, называемой в томографии синограммой. По горизонтальной оси отложены значения ξ , т.е. координаты положения зонда. По вертикальной оси отложены значения φ , т.е. значения проекционного угла. Каждый пиксел синограммы содержит линеаризованное значение абсорбционного сигнала (выражение 1.15). Если бы

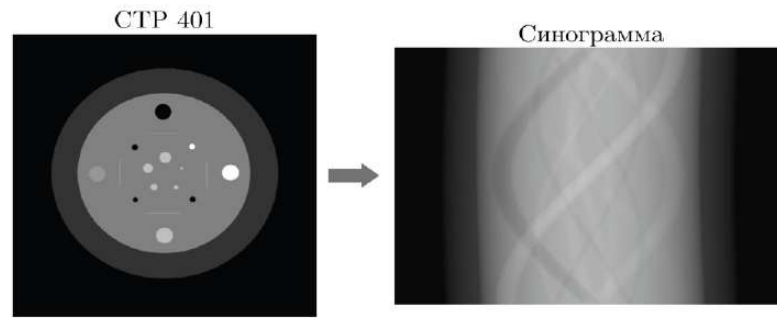


Рисунок 1.20 — Сечение объекта. Распределение линейного коэффициента ослабления (слева). Синограмма, рассчитанная для диапазона проекционных углов от 0° до 180° (справа).

направлений зондирования было бесконечное множество, то задача определения $\mu(x,y)$ свелась бы к задаче обращения преобразования Радона [42]. При реальных измерениях микрозонд не бесконечно тонкий, сканировать с бесконечно малым шагом не позволяют две вещи - бесконечно большое время измерения и большая дозовая нагрузка на образец, функция отклика детектора на прилетающий квант не равна 1 (т.е. регистрируемый сигнал всегда зашумлен), количество проекционных углов всегда ограничено. Перечисленные выше причины не позволяют использовать аналитическую формулу обращения преобразования Радона для решения задачи томографии без дополнительных грубых аппроксимаций. Использование последних приводит к возникновению ошибок. Однако, рассмотренная модель формирования идеальной томографической трансмиссионной проекции ложится в основу уточненных моделей и не могла быть пропущена в рассмотрении.

1.6 Модель формирования рентгено-флуоресцентной проекции

При использовании математических методов обработки регистрируемых изображений модель описания исследуемого объекта зависит от типа регистрируемого сигнала. При сканировании объекта монохроматическим рентгеновским излучением и регистрации ослабленного при прохождении через объект излучения объект описывается пространственным распределением линейного коэффициента ослабления рентгеновского излучения используемой энергии материалами, входящими в состав объекта. Линейный коэффициент ослабления материала для заданной энергии является линейной комбинацией линейных коэффициентов ослабления атомов каждого типа. В связи с этим не всегда удастся однозначно определить элементный состав локального объема зондируемого объекта по одному значению линейного коэффициента ослабления. Дополнив измерительную схему энергочувствительным детектором, способным измерять спектр флуоресцентного излучения, сгенерированный локальным объемом, появляется возможность оценить локальный элементный состав объекта. На рис. 1.21 приведен пример такой измерительной схемы. Схема измерений была реализована на станции источника синхротронного излучения ESRF в Гренобле, Франция [38],

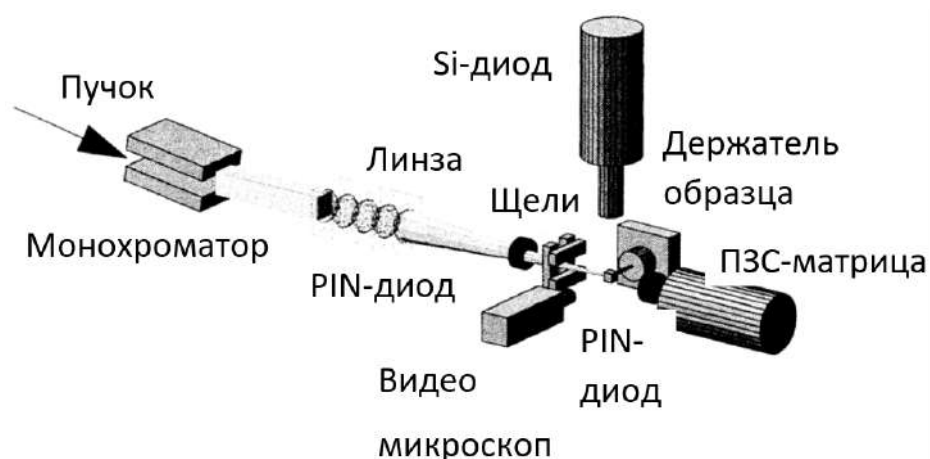


Рисунок 1.21 — Измерительная схема, использованная для сбора рентгеновских флуоресцентных проекций на станции ID22 источника синхротронного излучения ESRF (Гренобль, Франция) [38].

О флуоресцентной томографии с использованием сфокусированных монохроматических рентгеновских пучков синхротронов, как о потенциальном

аналитическом инструменте для изучения распределения химических элементов, содержащихся в образцах в следовых количествах, было заявлено в 1986 году после первых успешно проведенных экспериментов на Национальном источнике синхротронного излучения в Брукхейвене, США [43]. В ходе экспе-

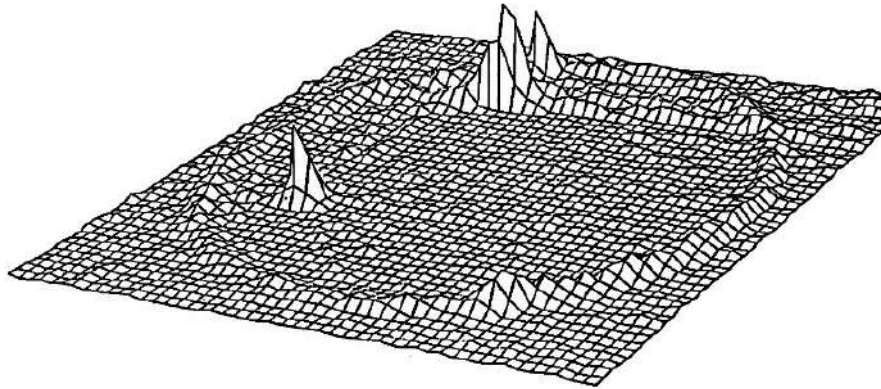


Рисунок 1.22 — Пространственное распределение титана [43].

римента удалось собрать рентгено-флуоресцентные томографические проекции от кусочка натриево-боросиликатного стекла, содержащего следовые количества элементов железа и титана. Обратное проецирование измеренных значений флуоресцентных сигналов было использовано для построения карт пространственного распределения источников характеристического излучения железа и титана. В подходе использовано предположение об однородности ослабления зондирующего и характеристического излучения в объекте. Т.е. была решена задача восстановления пространственного распределения отдельных точечных источников флуоресценции.

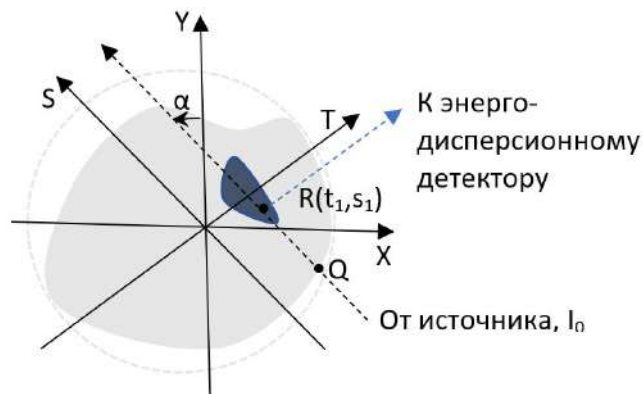


Рисунок 1.23 — Схема формирования рентгено-флуоресцентного сигнала при сканировании рентгеновским микронзондом [38].

В 1999 году был проведен эксперимент по рентгено-флуоресцентной микротомографии [38] объектов, содержащих протяженные флуоресцирующие включения. Тестовый объект, содержащий протяженные локальные флуоресцирующие области был измерен в томографической схеме с регистрацией рентгеновских флуоресцентных проекций и абсорбционных проекций. проведена реконструкция цифровых изображений объекта методом, предложенным автором диссертации, описание которого представлено в третьей главе данной работы.

Запишем модель формирования проекции [38], не использующую аппроксимаций при описании объекта (в терминах однородно поглощающей матрицы с отдельными точечными источниками флуоресценции). Не уменьшая общности задачи по-прежнему рассматриваем двумерное сечение трехмерного объекта. Дополним рассуждения из предыдущего раздела 1.5 о локализации тонкого зондирующего пучка в декартовой системе координат, связанной с объектом XOY , введением дополнительной декартовой системы координат TOS , повернутой относительно первой, и связанной с тройкой источник излучения-объект-энергодисперсионный детектор (рис. 1.23). Ось S задает направление зондирования сечения объекта бесконечно тонким рентгеновским пучком, ось T определяет направление на энергодисперсионный детектор. Связь между системами координат:

$$\begin{cases} t = x \cos \alpha + y \sin \alpha \\ s = -x \sin \alpha + y \cos \alpha. \end{cases} \quad (1.16)$$

Ограничим интервал сканирования $[t_{min}, t_{max}]$. Поскольку объект вращается для смены ракурса, поле, содержащее сечение объекта (или носитель функции, описывающей объект), является окружностью. Пусть $p(x, y)$ описывает источник флуоресценции:

$$p(x, y) = c(x, y) \mu_0^F \omega_k^Z. \quad (1.17)$$

Здесь $c(x, y)$ – концентрация флуоресцирующего элемента, μ_0^F – линейный коэффициент ослабления падающего излучения энергии E элементом – источником характеристического излучения, ω_k^Z – квантовый выход [37] излучения К-серии элемента Z (рис. 1.18). Запишем выражение, которое связывает величину регистрируемого флуоресцентного сигнала энергии E_F , формируемого при зондировании объекта бесконечно тонким монохроматическим рентгеновским пучком энергии E , с функцией распределения источников флуоресценции

и параметрами томографической схемы:

$$I(t_1, \alpha) = I_0 \int_{s_{min}(t_1, \alpha)}^{s_{max}(t_1, \alpha)} p(t_1, s_1) \Omega_D(s_1) T(t_1, s_1, E) F(t_1, s_1, E_F) ds_1. \quad (1.18)$$

Здесь положение зонда определяется как пересечение луча (t_1, α) с окружностью, I_0 – начальная интенсивность рентгеновского зонда, Ω_D – телесный угол энергодисперсионного детектора, $s_{min}(t_1, \alpha)$ и $s_{max}(t_1, \alpha)$ – координаты точек пересечения луча (t_1, α) с окружностью, соответственно. Ослабление зондирующего излучения $T(s^*, t_1, E)$ рассчитывается согласно закону Бугера-Ламберта-Бера:

$$T(t_1, s_1, E) = \exp \left(- \iint \mu_0^E(x, y) \delta(x \cos \alpha + y \sin \alpha - t_1) dx dy \right), \quad (1.19)$$

и ослабление характеристического излучения $F(t_1, s_1, E_F)$ рассчитывается согласно закону Бугера-Ламберта-Бера:

$$F(t_1, s_1, E_F) = \exp \left(- \iint \mu_F(x, y) \delta(-x \sin \alpha + y \cos \alpha - s^*) dx dy \right). \quad (1.20)$$

Здесь $\mu_0^E(x, y)$ – линейный коэффициент ослабления зондирующего рентгеновского излучения энергии E , $\mu_F(x, y)$ – линейный коэффициент ослабления характеристического рентгеновского излучения. Энергия рентгеновского зонда выбирается таким образом, что процессами рассеяния можно пренебречь в силу их небольшого вклада в сигнал. Эффекты переизлучения в модели не учитываются. В модели предполагается, что эффективность детектора не зависит от энергии фотона, угла влета и считается равной 1, угол между падающим пучком и направлением на детектор прямой. Модель будет использована в третьей главе при описании предложенного метода томографической реконструкции пространственного распределения источников флуоресценции из набора рентгено-флуоресцентных проекций.

1.7 Модель формирования проекции при зондировании монохроматическим параллельным пучком

В лабораторных условиях томографическое зондирование проводится параллельными или конусными пучками. Параллельный пучок от лабораторного

источника рентгеновского излучения формируется установленным в оптический тракт томографа монохроматором. Монохроматор устанавливается между источником и зондируемым объектом. При использовании параллельного пучка реконструкция 3D цифрового изображения объекта может выполняться послойно (рис. 1.24).

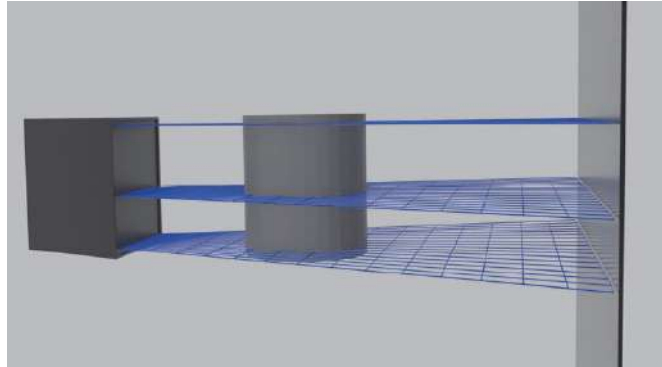


Рисунок 1.24 — Принципиальная схема формирования параллельных проекций.

На рисунке 1.25 проиллюстрирован принцип формирования проекции при параллельном зондировании.

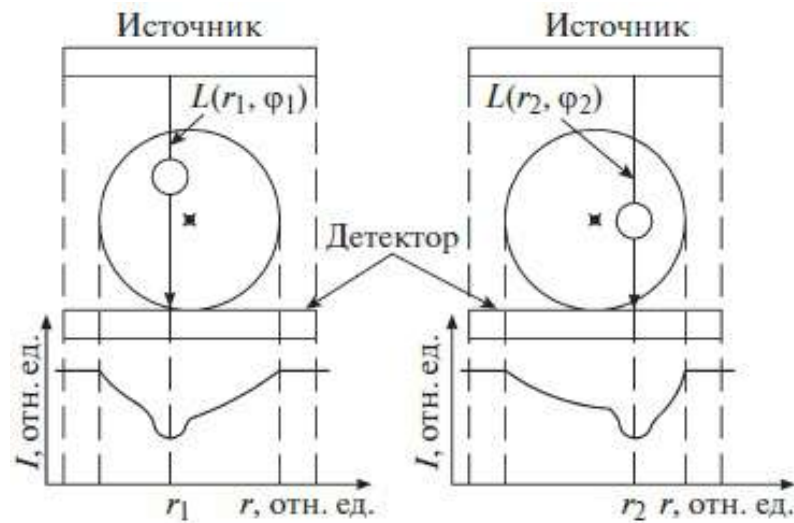


Рисунок 1.25 — Формирование проекций при параллельном зондировании.

При переходе от сканирования объекта бесконечно-тонким пучком к зондированию широким параллельным пучком в выражении, которое связывает регистрируемую значения сигналов с моделью зондируемого объекта меняется не много. Обратимся к выражению, которое связывает значение сигнала, формируемое при прохождении бесконечно тонкого зонда через сечение объекта, и

функцию, описывающую объект, $\mu(x, y)$:

$$I(\varphi, \xi) = I_0(\varphi, \xi) \exp \left(- \iint \mu(x, y) \delta(-x \cos \varphi + y \sin \varphi - \xi) dx dy \right). \quad (1.21)$$

Если при сканировании микропучком шаг сканирования определялся минимальным размером локальной области, внутри которой значение линейного коэффициента ослабления должно считаться постоянным, то при параллельном зондировании размер ячейки позиционно-чувствительного детектора определяет размер локальной области цифрового изображения, внутри которой значение линейного коэффициента ослабления будет иметь постоянное значение. Т.е. в выражении для расчета сигнала появится множитель Δ_{det} для учета реального размера ячейки детектора:

$$I_{real}(\varphi, \xi) = I_0(\varphi, \xi) \Delta_{det} \exp \left(- \iint \mu(x, y) \delta(-x \cos \varphi + y \sin \varphi - \xi) dx dy \right). \quad (1.22)$$

Такой же множитель появляется в выражении для расчета сигнала от пустого пучка:

$$I_{empty} = I_0(\varphi, \xi) \Delta_{det}. \quad (1.23)$$

При линеаризации множители Δ_{det} сокращаются и получаемое выражение эквивалентно выражению для случая бесконечно-тонкого зонда:

$$p(\varphi, \xi) = \ln \frac{I_0(\varphi, \xi)}{I(\varphi, \xi)}. \quad (1.24)$$

1.8 Модель формирования проекции при зондировании конусным пучком

Если в тракт лабораторного томографа не установлен монохроматор, то весь спектр излучения падает на образец и, соответственно, интегральный (не энерго-дисперсионный) позиционно-чувствительный детектор, установленный за образцом, регистрирует спектр, ослабленный при прохождении через образец. Объект зондируется коническим пучком [1.26](#). Профиль интенсивности

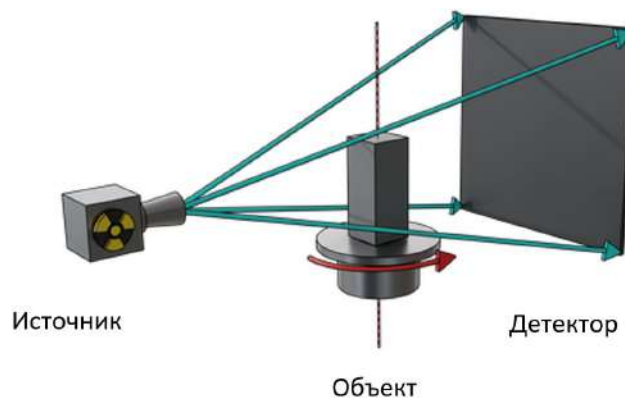


Рисунок 1.26 — Принципиальная схема формирования проекции при использовании конического рентгеновского пучка.

спектра определяется типом анода и параметрами источника электронов. Пример модельного спектра, рассчитанного для W анода при напряжении 100 кэВ с использованием программного обеспечения TASMIP Spectra Calculator [1.27](#) представлен на рисунке [1.27](#). Необходимость учитывать вклад каждой энергии спектра в регистрируемый сигнал усложняет модель формирования сигнала. Поскольку каждая из длин волн, содержащихся в спектре, ослабляется согласно закону Бугера-Ламберта-Бера ([1.12](#)), а величина линейного коэффициента ослабления от энергии зависит не линейно (см. рис. [1.28](#)), связать линейно модель формирования сигнала в монохроматическом и полихроматическом случаях не удастся.

Запишем выражение, которое связывает значение сигнала, формируемое при прохождении бесконечно тонкого полихроматического рентгеновского пуч-

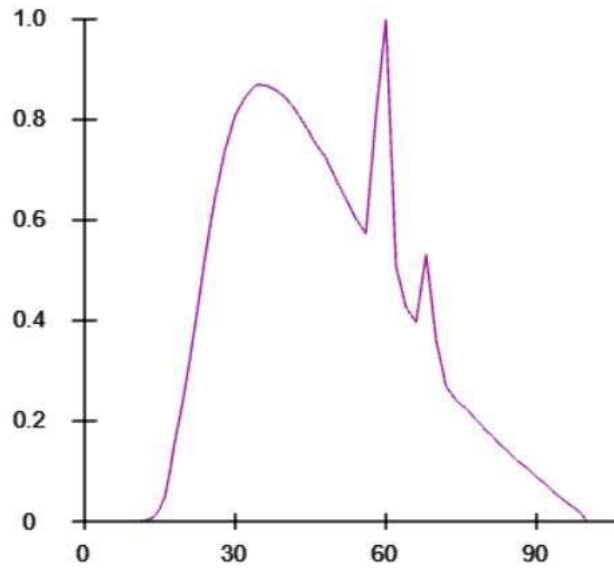


Рисунок 1.27 — Модельный спектр вольфрамового анода при напряжении 100кэВ.

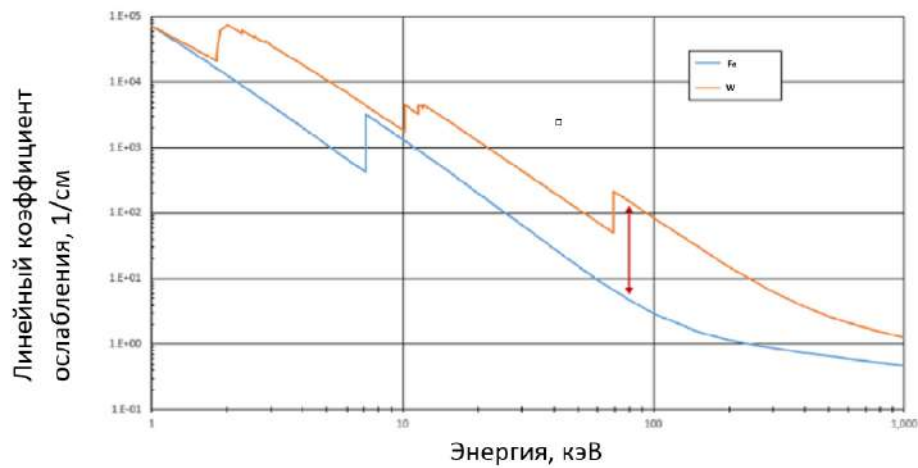


Рисунок 1.28 — Зависимость линейных коэффициентов ослабления рентгеновского излучения от энергии для железа и вольфрама.

ка через сечение объекта, и функции $\mu(E, x, y)$, описывающие объект:

$$I(\varphi, \xi) = \int (I_0(E, \varphi, \xi) \exp \left(- \iint \mu(E, x, y) \delta(-x \cos \varphi + y \sin \varphi - \xi) dx dy \right)) dE. \quad (1.25)$$

Были проведены измерения с использованием тестового объекта. В качестве тестового объекта использовался цилиндр из ПММА высотой 25 мм и диаметром 10 мм, в который добавлены четыре медные вставки диаметром 1.1 мм (рис. 1.30). Измеренный одной строкой ячеек позиционно-чувствительного детектора сигнал представлен на рисунке 1.31. Слева – направо приведены

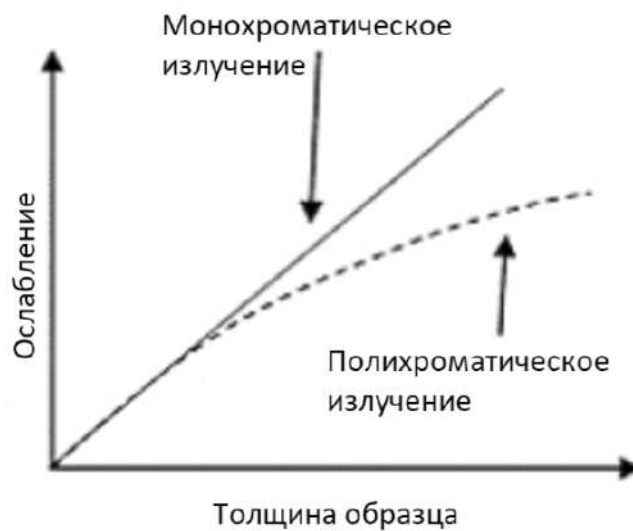


Рисунок 1.29 — Зависимость ослабления излучения от толщины однородного образца при зондировании монохроматическим и полихроматическим излучением [44].

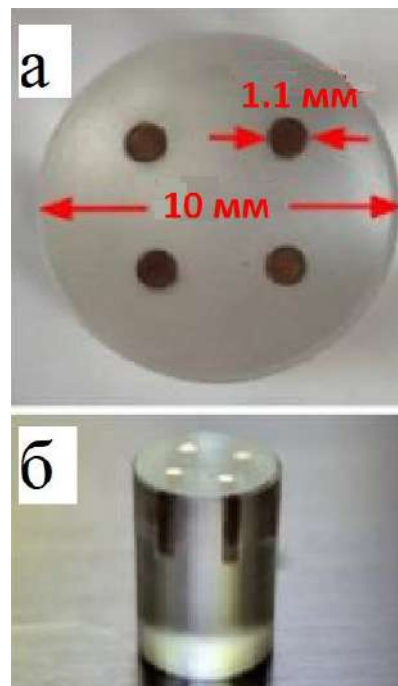


Рисунок 1.30 — Пластиковый цилиндр с 4 вставками.

результаты следующих этапов. На первом слева рисунке синим цветом представлен результат измерения (показаний детектора) при наличии объекта в тракте, красным - темновой ток. Значения темнового тока – результат усреднения по 5 независимым измерениям. На втором рисунке слева приведен результат вычитания темнового тока из измеренных значений. Далее представлен результат измерения пустого пучка в отсутствии объекта в оптическом тракте. Результат выполненной согласно 1.26 линеаризции представлен на последнем рисунке.

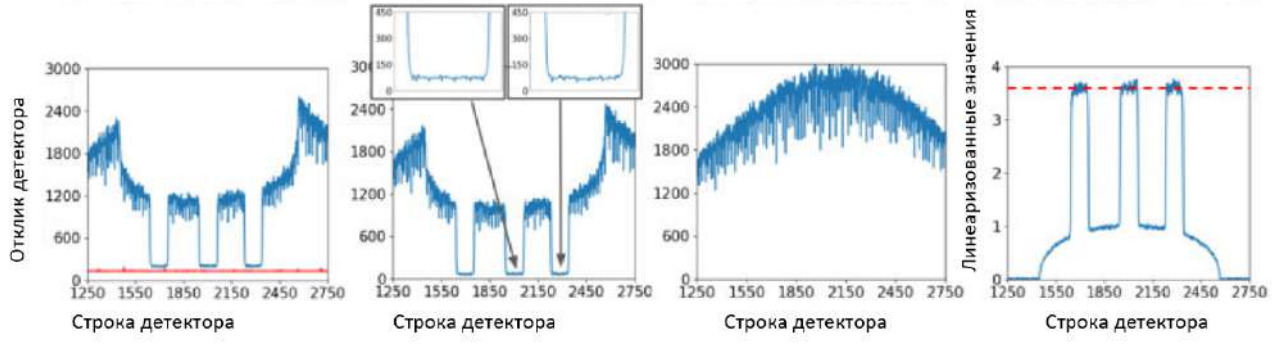


Рисунок 1.31 — Слева-направо. Результат измерения. Результат вычитания темнового тока. Результат измерения пустого пучка. Результат выполненной линеаризации.

Для линеаризации использовалось следующее выражение:

$$I_{norm}(pix_i, \varphi) = \ln \left(\frac{I_0(pix_i) - D_{pix_i}}{I(pix_i, \varphi) - D_{pix_i}} \right), \quad (1.26)$$

где $I_0(pix_i)$ – сигнал пиксела детектора при включенном источнике в отсутствии объекта, D_{pix_i} – темновой ток, $I(pix_i, \varphi)$ – сигнал пиксела при установленном в тракт объекте. Были рассчитаны модельные проекции с использованием цифрового изображения (фантома), повторяющего тестовый объект. Параметры модельного эксперимента полностью совпадали с параметрами реальных измерений. Использование приведенной выше идеальной модели 1.25 формирования сигнала не позволило получить значения сигналов, близкие к измеряемым (рис. 1.32). Дискретная математическая модель формирования сигнала была уточнена [45] введением функций, описывающих работу источника и детектора:

$$I(i, \varphi) = D_i + \sum_k [\nu_{E_k}(i) det_i Poisson(I_{0k} \exp(-\sum_L \omega_j \mu_j(E_k)) + S_k(i, \varphi))]. \quad (1.27)$$

Здесь I – рассчитываемый сигнал, i – номер ячейки детектора, φ – проекционный угол, D_i – темновой ток, k – энергетический интервал спектра, ν_{E_k} – коэффициент усиления детектора, det_i описывает влияние соседних ячеек детектора на рассматриваемую ячейку, I_{0k} – начальная интенсивность энергетической компоненты k – го интервала энергетического спектра, L – участок пути рентгеновского излучения, пройденного в материале, ω_j – весовой вклад j -го пиксела на участке пути (в соответствии с моделью луча), $\mu_j(E_k)$ – линейный коэффициент ослабления материалом j -го пиксела энергии k – го интервала

спектра, S_k описывает вклад рассеяния. Три модели луча описаны в разделе 4.3 при рассмотрении алгебраического метода реконструкции. Значение темнового тока усредняется по результатам нескольких измерений. Модель учитывает смещение значения темного тока, если предварительно детектор находился под нагрузкой. Смещение становится значимым при падении нагрузки на пиксел. Для $\sigma_{on/off}$ и $d_{on/off}$ используются разные значения. Влияние соседних пикселей det_{ct} моделируется свёрткой с гауссовым фильтром. Ниже представлены результаты модельного эксперимента. Для численных расчетов использовался инструмент SmartTomoSim, разработанный в составе программного пакета STE (Smart Tomo Engine) [46]. Поскольку было обнаружено, что значения темнового

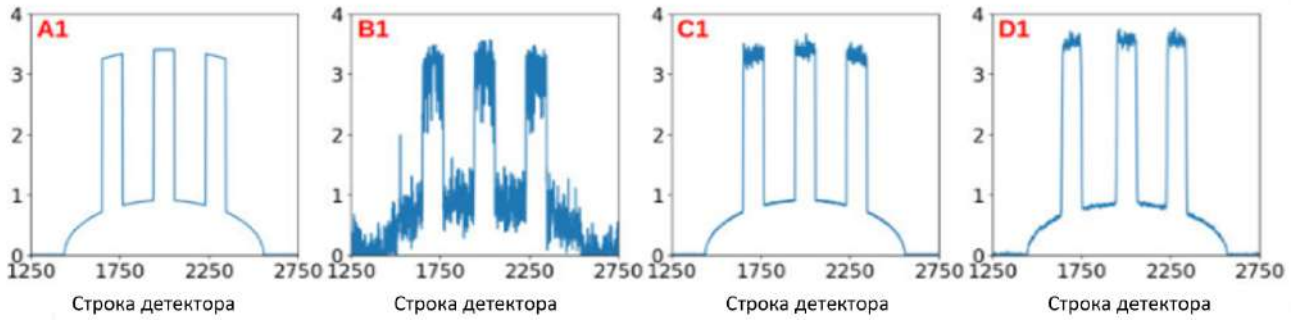


Рисунок 1.32 — Лучевые суммы (линеаризованные значения) для линейки пикселей позиционно-чувствительного детектора. А,В,С – результаты моделирования, D - результат измерения.

тока различаются до первого включения трубки и после ее отключения по окончанию измерений, при моделировании карты темнового тока использовалось не постоянное значение, а был добавлен нормально распределенный шум с нулевым средним и $D \sim N(d, \sigma)$. Параметры, использованные при моделировании, приведены в таблице 1.

Таблица 1 — Параметры модельного эксперимента

Эксперимент	A	B	C
Пуассоновский шум	-	+	-
Перекрестные помехи	-	+	+
σ_{on}	0	7	7
σ_{off}	0	5	5
d_{on}	200	120	120
d_{off}	200	120	120

Визуальное сравнение результатов моделирования (рис. 1.32С) и результатов измерения (рис. 1.32D) позволяет сделать вывод об адекватности уточненной модели. Проведем сравнение с модельными результатами, полученными с использованием доступного программного обеспечения с открытым исходным кодом XCIST. Данное программное обеспечение [47] сегодня используется в мире во многих научных группах, что подтверждается 41 ссылкой за 3 года. Симулятор XCIST использует CatSim [48] для моделирования взаимодействия рентгеновского излучения с объектом. CatSim позволяет провести моделирование спектра источника, процессов поглощения и рассеяния. Наилучший результат, который удалось получить с использованием данного программного обеспечения, визуально сопоставимый с результатом измерения, приведен на рисунке 1.33. Отличие в профилях, рассчитанных с использова-

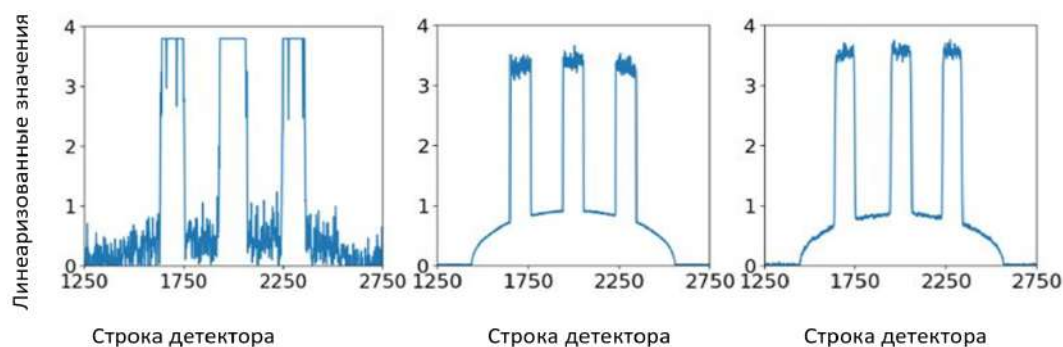


Рисунок 1.33 — Сравнение результатов моделирования с результатом измерения. А - моделирование с использованием ПО XCIST, В - моделирование с использованием модели (1.27), С - результат измерения.

нием программного обеспечения XCIST и уточненной модели [45] наблюдается в области наибольших значений линеаризованного сигнала. Это пиксели, куда приходят лучи, прошедшие через сильно поглощающие включения. Уточненная модель [45] описывает данный процесс с большей точностью, чем XCIST.

1.9 Модель формирования проекции при наличии оптического элемента между объектом и детектором

Сегодня продемонстрированное пространственное разрешение абсорбционной томографии достигает единиц нанометров [49], позволяя надеяться на организацию детальной дефектоскопии процессоров. Для реализации высоко разрешения в оптический тракт томографа дополнительно устанавливается рентгеновская оптика. В 2007 г. была опубликована работа [50], в которой авторы, описывая возможности электронной нанотомографии, оценили потенциальные возможности рентгеновской нанотомографии. Сегодня публикации о томографии чипов с нанометровым разрешением уже далеко не единичное явление [51—54]. Технология рентгеновского контроля внутренней структуры с пространственным разрешением десятки нм и выше базируется на использовании высокоразрешающих рентгеновских томографов. Для достижения такого разрешения в тракт томографа устанавливаются оптические элементы между объектом и детектором [55]. В тракт между объектом и детектором могут быть установлены оптические элементы другого назначения. Установка оптического элемента в тракт изменяет вид модели, описывающей процесс формирования регистрируемого сигнала. Рассмотрим это на примере установки в тракт кристалла-анализатора. В рамках диссертационного исследования был проведен эксперимент [56] с установкой кристаллического анализатора в оптический тракт для выделения двух характеристических линий из спектра рентгеновской трубки при одновременной регистрации томографических проекций. При использовании кристалла-анализатора проекционные изображения на разных длинах волн разделяются в пространстве и могут регистрироваться независимо для дальнейшей обработки. Эксперимент проводился на рентгеновском дифрактометре, схема эксперимента приведена на рисунке 1.34. Кристалл кремния толщиной 540 мкм был установлен на гониометре перпендикулярно направлению зондирования (рис. 1.34). Источником рентгеновского излучения служила рентгеновская трубка с молибденовым анодом. Размер фокуса 0.4×12 мм. Первоначально кристалл устанавливался так, чтобы его плоскость (111) была перпендикулярна лучу. Вращением вокруг осей X, Y и Z (рис. 1.34) анализатор настраивался на максимальные отражения в геометрии Лауэ для кристаллографической плоскости $(\bar{1}11)$ в случае линии K_α и $(1\bar{1}1)$ для линии K_β . Настройка

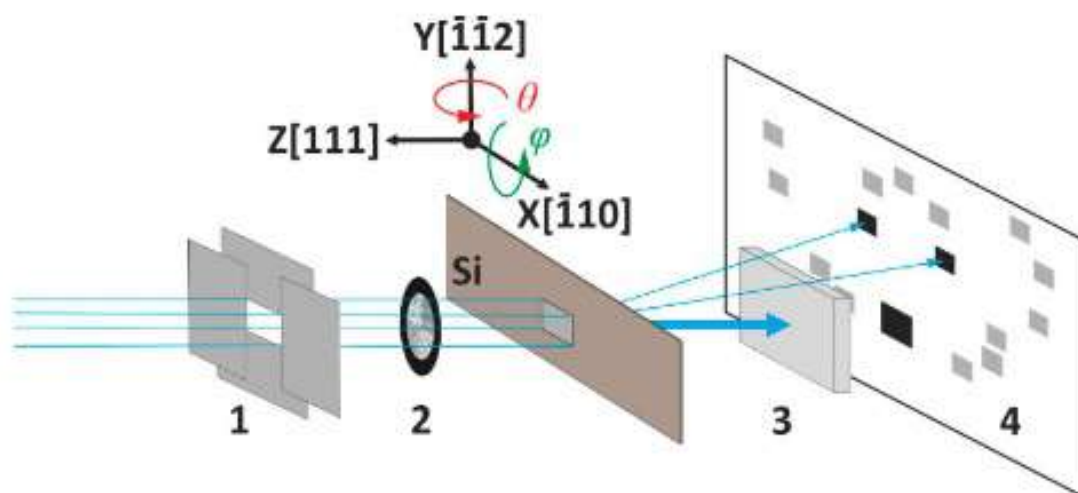


Рисунок 1.34 — Схема эксперимента: 1 - система щелей; 2 - исследуемый образец (сетка); 3 - алюминиевый фильтр; 4 - камера прибора с зарядовой связью (CCD).

кристалла-анализатора подробно описана в [56]. Рентгеновские изображения для двух линий, прошедших через алюминиевый фильтр толщиной 5 мм, были зарегистрированы позиционно-чувствительным детектором Ximea XiRay 11. Время экспозиции одного кадра составляло 10 секунд. Размер пиксела составлял 9 мкм. Расстояние между источником и кристаллом составляло 1000 мм, а между кристаллом и детектором - 22 мм. Результаты, полученные с использованием тестового объекта (калибровочной сетки), показаны на рисунке 1.35а. Для

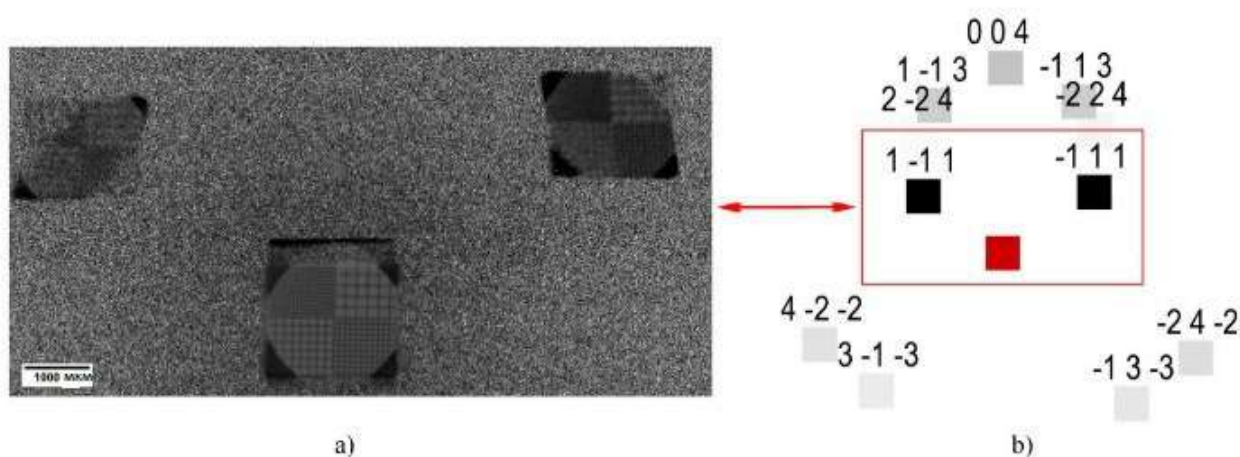


Рисунок 1.35 — Изображения калибровочной сетки (а) рентгеновские «на просвет» и для 2-х характеристических линий. Плоскости $(\bar{1}11)$ и $(1\bar{1}1)$ соответствуют характеристическим линиям K_α и K_β Мо, соответственно; (б) результат моделирования с использованием ПО LauePt [57].

интерпретации результатов эксперимента предложено выражение, которое связывает значение, регистрируемое пикселом детектора, с параметрами объекта и

кристалла-анализатора, помещенного в оптический тракт. Начнем с изображения, зарегистрированного в режиме на просвет, и запишем выражение с учетом положения кристалла-анализатора:

$$I_T(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}) = \int dE I_0(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}, E) \exp \left(- \int_0^{L(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})} \mu(z; E) dz \right) \times \quad (1.28)$$

$$\times (1 - F_{\text{refl}}(E, \varphi, \vartheta),$$

где $I_T(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})$ - интенсивность, регистрируемая ячейкой, положение которой задается парой x_{det} и y_{det} , L - линия, проходящая через источник (предполагается точечным) и центр пиксела, а φ и ϑ - азимутальный и тангенциальный углы, которые определяют ориентацию семейства отражающих плоскостей относительно падающего луча, соответственно. Аппроксимация ослабления интенсивности из-за отклонения части лучей, т.е. уточнение вида функции $F_{\text{refl}}(E, \varphi, \vartheta)$, остается задачей, требующей решения. Квазимонохроматические изображения $I_{k\alpha}$ и $I_{k\beta}$, формируемые кристаллом, проективно искажены. Чтобы компенсировать искажения, возникающие в результате асимметричной дифракции выбранных семейств отражающих плоскостей, было использовано проективное преобразование H :

$$HI_{k\alpha}^i = I_T^i, i = \overline{1, 4}, \quad (1.29)$$

где i - количество проективных базовых точек. Преобразование рассчитывалось по координатам проективных базовых точек [58–61]. При регистрации изображения на просвет используется фильтр, устанавливаемый перед окном детектора, т.е. модель формирования сигнала дополняется функцией ослабления фильтра:

$$I_T(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}) = \int dE I_0(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}, E) \exp \left(- \int_0^{L(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})} \mu(z; E) dz \right) \times \quad (1.30)$$

$$\times F_{\text{abs}}(E, d_{\text{cr}})(1 - F_{\text{refl}}(E, \varphi, \vartheta)) \exp(-\mu^{Al} d^{Al})$$

Выражение, которое связывает измеренную интенсивность без использования образца, имеет вид:

$$I_T^0(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}) = \int dE I_0(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}, E)(1 - F_{\text{refl}}(E_i, \varphi, \vartheta)) \exp(-\mu^{Al} d^{Al}) \quad (1.31)$$

Разделив 1.31 на 1.30 и взяв логарифм, линеаризуем данные:

$$\int_0^{L(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})} \bar{\mu}(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}, z) dz = \ln \left(\frac{I_T^0(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})}{I_T(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})} \right) \quad (1.32)$$

Обратим внимание, что подинтегральная функция $\bar{\mu}(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}, z)$ описывает распределение усредненного коэффициента ослабления спектра. Спектр ослабляется объектом и изменяется кристаллом-анализатором, установленным на пути. На рисунке 1.36 показаны нормированные результаты измерений калибровочной сетки P_*^{norm} . В реальных измерениях темновой ток детектора не равен нулю, поэтому перед процедурой линеаризации измеренные значения корректируются:

$$P_*^{\text{norm}}(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}) = \ln \left(\frac{I_*^0(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}) - I^{\text{dark}}(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})}{I_*(x_{\text{det}}, y_{\text{det}}) - I^{\text{dark}}(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})} \right) \quad (1.33)$$

с учетом измеренных значений темнового тока $I^{\text{dark}}(x_{\text{det}}, y_{\text{det}})$. Индекс * принимает одно из трех значений: Т (на просвет) (рис. 1.36а), K_α (рис. 1.36b) или K_β (рис. 1.36с). Изображения для линий (K_α и K_β) отличаются от изображения на

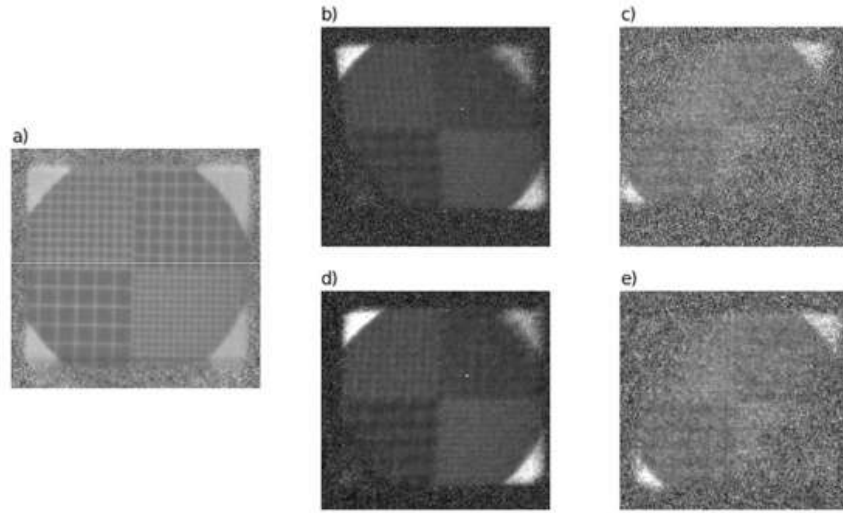


Рисунок 1.36 — (а) Изображение в режиме на просвет; (b) нормированное изображение $P_{K_\alpha}^{\text{norm}}$; (с) нормированное изображение $P_{K_\beta}^{\text{norm}}$; (d) изображение после проективной коррекции $P_{K_\alpha}^{\text{proj}}$; (е) изображение после проективной коррекции $P_{K_\beta}^{\text{proj}}$.

просвет способом формирования. Это псевдомонохроматические изображения. На рисунках 1.36b,с приведены нормированные изображения, сформированные кристаллом, $P_{K_\alpha}^{\text{norm}}$ и $P_{K_\beta}^{\text{norm}}$, соответственно. На рисунках 1.36d,е приведены результаты проективной коррекции изображений $P_{K_\alpha}^{\text{proj}}$ (рисунок 1.36b) и $P_{K_\beta}^{\text{proj}}$

(рис. 1.36с), соответственно. Чтобы визуальнo оценить результаты выравнивания, построено трехканальное цветное изображение, которое приведено на рисунке 1.37. Для расчета изображения использовалась следующая последовательность шагов. На первом этапе была создана маска, чтобы минимизировать вклад пиксeлов, не содержащих объект, и пиксeлов объекта с высокой дисперсией шума. Для пиксeлов маски был сжат динамический диапазон значений для увеличения контрастности до $[0.3 - 0.95]$ и выполнена эквализация гистограммы значений. Трехканальное изображение было построено с использованием линейного метода. Красный канал содержал значения пиксeлов изображения, измеренного на просвет, зеленый канал содержал пиксeлы изображения $P_{K_\alpha}^{proj}$, а синий канал содержал пиксeлы изображения $P_{K_\beta}^{proj}$. Чтобы продемонстрировать потенциальные возможности метода, представлены результаты измерений участка микросхемы в схеме измерения с кристаллом-анализатором в оптическом тракте. Было собрано 50 изображений, каждое с экспозицией 3 секунды, в режиме на просвет и 50 изображений, каждое с экспозицией 30 секунд в двух отражениях. Усредненные и проективно скорректированные согласно описанной выше процедуре изображения показаны на рисунке 1.38.

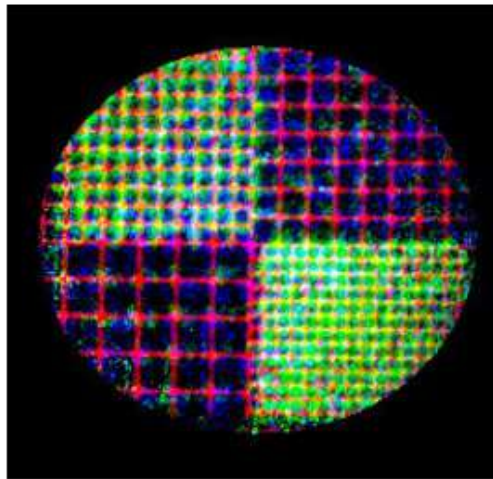


Рисунок 1.37 — Трехканальное изображение калибровочной сетки. Красный канал содержит P_T^{norm} , зеленый канал содержит $P_{K_\beta}^{proj}$, а синий канал содержит $P_{K_\alpha}^{proj}$

После применения проективного преобразования к пиксeлам каждого из линеаризованных изображений K_α и K_β построено трехканальное изображение, которое показано на рис. 1.39. Изображения каждого из каналов могут служить полноценными томографическими проекциями, снятыми под разными углами поворота объекта. Использование этой схемы измерения позволяет поместить

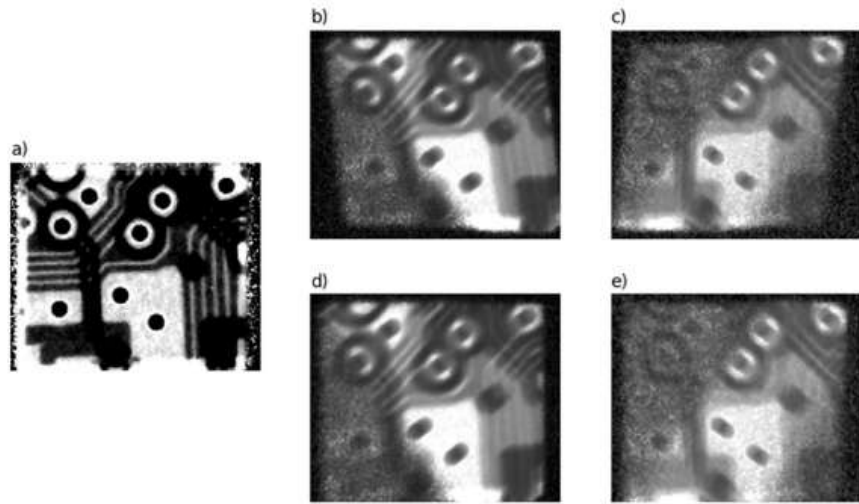


Рисунок 1.38 — (a) Изображение в режиме на просвет; (b) нормированное изображение $P_{K_\alpha}^{norm}$; (c) нормированное изображение $P_{K_\beta}^{norm}$; (d) изображение после проективной коррекции $P_{K_\alpha}^{proj}$; (e) изображением после проективной коррекции $P_{K_\beta}^{proj}$.

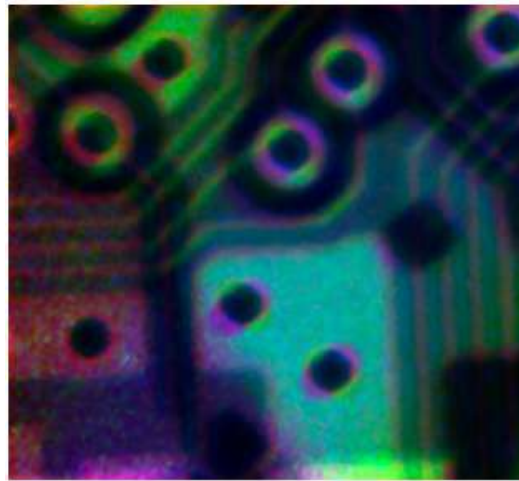


Рисунок 1.39 — Цветное изображение участка микросхемы. Красный канал содержит P_T^{norm} , зеленый канал содержит $P_{K_\beta}^{proj}$, а синий канал содержит $P_{K_\alpha}^{proj}$.

объект на гониометр, т.е. осуществить вращение образца. Наличие кристалла анализатора в оптическом тракте усложняет модель формирования проекции, но разработка методов решения задачи томографической реконструкции с учетом изменяющейся фазы зондирующего излучения продолжается [62—64]. При решении задачи реконструкции каждый тип собранных линейаризованных проекций обрабатывается отдельно алгоритмами, представленными далее.

1.10 Заключение

Основной материал главы посвящен обзору существующих моделей формирования рентгеновских сигналов и изображений, на которые опираются построенные в ходе выполнения диссертационного исследования вычислительные рентгеновские методы определения атомной структуры материалов, морфологической структуры изделий микро- и нанoeлектроники.

Для определения атомной структуры природных и новых инженерных материалов используется метод рентгеновской спектроскопии (в части дальней). Анализ дальней тонкой структуры спектра поглощения (область EXAFS) потенциально позволяет в геометрической модели окружения ионизируемого атома определять радиусы ближайших координационных сфер и элементный состав каждой сферы. Дальняя тонкая структура рентгеновского спектра поглощения (область EXAFS) относится к осциллирующей структуре, располагаясь в интервале приблизительно от 30 эВ до 1500-2000 эВ после края поглощения. В семидесятые годы прошлого века Сауерс и др. предложили количественную параметризацию модели EXAFS. В главе приведено описание данной модели, ставшей стандартом для многих современных исследований. Указав на то, что осцилляции в спектре описываются функцией синуса от значений волнового вектора, авторы модели предложили использовать преобразование Фурье для определения радиусов ближайших координационных сфер. Если в координационной сфере присутствуют атомы одного типа, преобразование Фурье хорошо справляется с задачей определения радиуса. Проблемы возникают если в одной координационной сфере присутствуют атомы разных типов. В этом случае под одним пиком Фурье спектра оказываются вклады от несколько типов рассеивателей. Идентификация центров рассеяния требует применения трудоемкого метода подгонки. Чтобы исключить этап подгонки параметров модели, в диссертационном исследовании предложен метод вейвлет анализа EXAFS спектров. Метод представлен во второй главе.

Для локальной оценки чистоты или состава поверхностей и приповерхностных слоев создаваемых электронных компонент применяются сканирующие методы. Флуоресцентное излучение локального объема, генерируемое под воздействием пучка частиц или под воздействием рентгеновского излучения, дает информацию о локальном элементном составе образца. Чтобы умень-

шить размер локальной зондируемой области, пучок фокусируется. Знание формы микрозондов, используемых в сканирующих диагностических методах, позволяет повысить пространственное разрешение метода, т.е. точность оценки локального состава. При использовании микрозонда для микроструктурирования поверхности знание формы микрозонда позволяет провести оптимизацию параметров используемого технологического процесса. Рассмотренные в данной главе модели формирования флуоресцентных сигналов, генерируемых при сканировании бесконечно-тонкими зондами, являются платформой для предложенных в диссертационной работе методов определения формы протонного и рентгеновского микрозондов, которые представлены в следующей главе в разделах (3.1) и (3.2), соответственно.

Рентгеновская томография позволяет восстанавливать внутреннюю морфологическую структуру объектов без разрушения этих объектов. Создаваемые микроэлектронные изделия должны удовлетворять нормативным требованиям, формирующимся исходя из функционального назначения и условий их эксплуатации. Наличие дефекта или метрологическая погрешность изготовления приводит к незапланированному действию устройства или отказу. Для локализации дефектов, контроля и устранения неисправностей, мониторинга процесса производства высокоразрешающая трехмерная визуализация оказывается полезным инструментом. Цифровое изображение объекта в методе рентгеновской томографии реконструируется из набора 2D томографических проекций, собираемых от объекта с разных ракурсов. В данной главе рассмотрены модели формирования абсорбционных и рентгено-флуоресцентных проекций. Абсорбционные проекции могут быть собраны с использованием сфокусированного зонда (фокусирующая система располагается между источником рентгеновского излучения и объектом), с использованием параллельного или конусного рентгеновского пучков, а также в схеме, когда оптический элемент находится в тракте между образцом и детектором. В диссертационном исследовании на базе представленных моделей построены методы томографической реконструкции цифровых изображений с использованием рентгено-флуоресцентных проекций (раздел 4.2) и абсорбционных проекций, собираемых в условиях, отличающихся от идеальных (разделы 5.3, 5.4, 5.5 и 5.6), способные работать при условии ограничений на дозовую нагрузку (разделы 4.3 и 4.4) на используемый объем памяти (раздел 4.6) или на время выполнения реконструкции (раздел 4.7).

Глава 2. Вейвлет-анализ EXAFS-спектров для уточнения атомной структуры новых материалов

Данная глава посвящена описанию предложенного метода вейвлет анализа EXAFS спектров, позволяющего в геометрической модели окружения ионизируемого атома определять радиусы ближайших координационных сфер и элементный состав каждой сферы. Метод исключает этап подгонки параметров модели, необходимый в предложенном ранее методе Фурье. Глава построена следующим образом. Начинается она со сравнения результатов двух преобразований Фурье и вейвлет преобразования, используемых для анализа сигналов (Раздел 2.1). В разделе 2.2 обосновывается выбор вейвлета Морле в качестве материнского вейвлета для анализа EXAFS спектров. Далее на примере анализа EXAFS спектров, зарегистрированных от Ge-Sb-Te халькогенидных сверхрешеток (Раздел 2.3) описана процедура изучения атомной структуры. Связь пространственного разрешения с выбором материнского вейвлета объясняется в Разделе 2.4, где предложен способ повышения разрешения и представлен сконструированный FEFF-Морле вейвлет.

2.1 Сравнение двух Фурье- и вейвлет-методов анализа спектров EXAFS

Чтобы провести сравнение, обратимся к модели EXAFS спектра:

$$\chi(k) = S_0^2 \sum_{i=1}^n \frac{N_i}{R_i^2} \frac{F_i(k, R_i)}{k} \exp\left(-\frac{2R_i}{\lambda(k)}\right) \exp(-2\sigma_i^2 k^2) \sin(2kR_i - \Psi(k, R_i)). \quad (2.1)$$

Колебания $\sin$ с частотой $2kR$, обусловленные актами обратного рассеяния на окружающих атомах координационной сферы радиуса R , промодулированы функциями амплитуд обратного рассеяния F . Пример функции амплитуды обратного рассеяния для свободного атома фосфора приведен на рисунке 2.1. Амплитуда обратного рассеяния локализует вклад рассеивателя (атомов с определенным атомным номером Z) в регистрируемый сигнал. Т.е. сигнал $\chi(k)$ – это функция, частотные компоненты которой не стационарны по k .

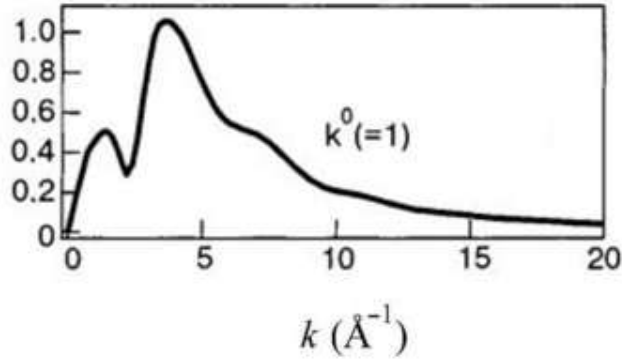


Рисунок 2.1 — Вид функции амплитуды обратного рассеяния фосфора.

Отсюда следует, что в случае применения метода EXAFS спектроскопии для решения задачи уточнения радиуса одной из координационных сфер R использование преобразования Фурье:

$$\hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(k) \exp(i \omega k) dk \quad (2.2)$$

является достаточно информативным инструментом. Если координационная сфера содержит атомы разных типов, т.е. под одним максимумом Фурье-спектра оказываются несколько амплитуд рассеяния (есть несколько типов атомов на одной координационной сфере), то задача усложняется. Предложенный в 1946 году Габором способ ограничивать бесконечные волны синуса и косинуса окном в ядре Фурье-преобразования имеет недостатки. Размер окна, которым ограничивается волна, остается постоянным для всех частот, содержащихся в сигнале. Т.е. в окно попадает разное число периодов для разных частотных компонент. В задаче анализа EXAFS спектров использование Габоровского подхода приведет к тому, что для разных координационных сфер радиусы будут определяться с разной точностью. Хотелось бы иметь гибкое окно, которое сжимается в области высоких частот и расширяется в области низких.

Именно таким свойством обладает вейвлет преобразование [65]:

$$WT_{\chi}^{\psi}(a,b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(k) \psi^*\left(\frac{k-b}{a}\right) dk, \quad (2.3)$$

где a — параметр масштаба (растяжения-сжатия), b — параметр сдвига, ψ — функция базисного (материнского) вейвлета, $*$ — знак комплексного сопряжения. Обратим внимание, что $\psi^*\left(\frac{k-b}{a}\right)$ получена из $\psi(k)$ в результате сдвига на b и сжатия в a раз. На практике ψ можно использовать в качестве базисного вейвлета, только если существует обратное преобразование:

$$\chi(k) = \frac{1}{C_\psi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} WT_\chi^\psi(a, b) \frac{1}{a^2} \psi^*\left(\frac{k-b}{a}\right) da db. \quad (2.4)$$

Здесь

$$C_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\hat{\psi}(\omega)|^2}{|\omega|} d\omega. \quad (2.5)$$

Отсюда следует, что функция $\hat{\psi}(\omega)$ (преобразование Фурье функции $\psi(k)$) обращается в ноль в начале координат. Другими словами,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(k) dk = 0. \quad (2.6)$$

Это так называемое условие допустимости.

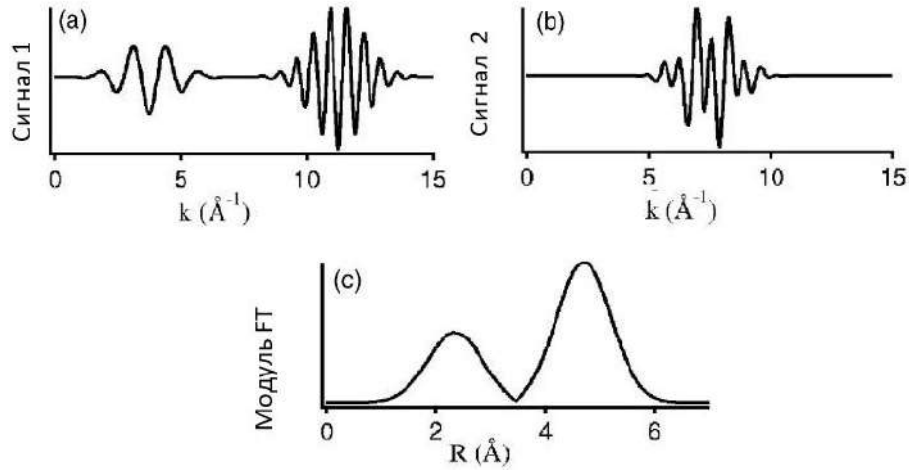


Рисунок 2.2 — Модельные сигналы (верхний рисунок), амплитуда преобразования Фурье модельных сигналов (нижний рисунок).

Чтобы продемонстрировать преимущества использования вейвлет преобразования для анализа EXAFS спектров, обратимся к модельному примеру. На рисунке 2.2 в верхнем ряду приведены два модельных сигнала. Каждый из них состоит из суммы двух синусов, промодулированных функцией Гаусса. Амплитуда и частота второго синуса удвоены относительно первого слагаемого. Положения центров функций Гаусса на левом верхнем рисунке $k = 3.75$ и $k = 11.25$ соответственно. На правом верхнем рисунке центр функции Гаусса расположен в точке $k = 7.5$. Амплитуды Фурье преобразования для двух функций совпали. Результат приведен на нижнем рисунке 2.2.

На рис. 2.3 представлены две вейвлет карты, соответствующие каждому из сигналов рисунка 2.2. Обратим внимание, что подписи осей даны с использованием обозначений, используемых в модели спектра EXAFS.

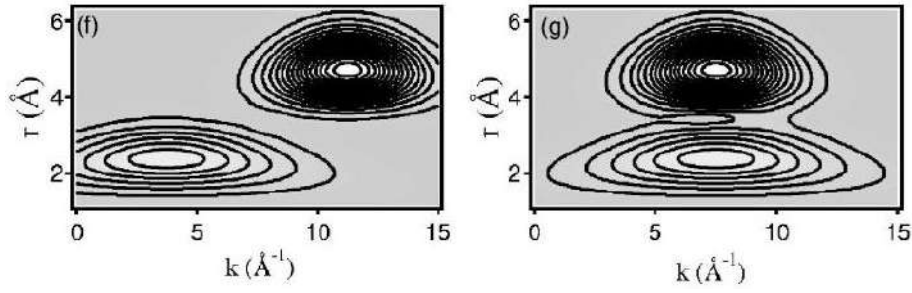


Рисунок 2.3 — Вейвлет карты сигналов, представленных на рис. 2.2 [23]

В отличие от нижнего рисунка 2.2 (амплитуды Фурье преобразования), на вейвлет картах информация о частотных составляющих (вертикальная ось r) каждого из вкладов сигнала дополняется информацией о положении каждого из них (горизонтальная ось k). Знание о положении центра частотной компоненты на оси k позволяет идентифицировать вклад акта обратного рассеяния в EXAFS спектр. В дальнейшем будем рассчитывать вейвлет-преобразование взвешенного на k^n EXAFS спектра 1.3. Этап взвешивания, как отмечалось в разделе 1.2, введен для того, чтобы нивелировать влияние процесса затухания колебаний в конечной части спектра [66]. Перепишем формулу для вычисления вейвлет преобразования взвешенного EXAFS спектра, заменив обозначения параметров сдвига и сжатия, используемые в выражении 2.3, соответствующими обозначениями, используемыми в модели спектра EXAFS. Параметр сдвига интерпретируем в терминах k .

$$WT_{\chi}^{\Psi}(k, r) = \frac{1}{\sqrt{2r}} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(k') k'^m \Psi^*[2r(k' - k)] dk'. \quad (2.7)$$

Здесь $\chi(k)$ – EXAFS спектр, k^m – весовой множитель, Ψ^* – материнский вейвлет. Как было продемонстрировано выше, результатом вейвлет-преобразования одномерного сигнала $\chi(k)$ является двумерная карта. Ось сдвигов соответствует переменной k , ось масштабов (сжатия, растяжения) соответствует переменной r (радиусы координационных сфер). Интерпретация значений вертикальной оси зависит от выбора материнского вейвлета. Приведенный пример рассчитан с использованием вейвлета Морле, о котором пойдет речь в следующем разделе. Связь между параметром масштаба a и радиусом координационной сферы r выражается через равенство $\frac{1}{a} = 2r$. В отличие от Фурье преобразования, рассчитанная карта значений вейвлет преобразования раскладывает содержимое спектра EXAFS на компоненты прямого пространства k и обратного к k пространства. Положение максимума в обратном пространстве определяет оценку

радиуса координационной сферы. Положение максимума по k идентифицирует положение максимума соответствующей амплитуды рассеяния в координационной сфере соответствующего радиуса. Тип используемой базисной функции определяет алгоритм пересчета значения обратного пространства в оценку радиуса координационной сферы.

2.2 Вейвлет Морле. Оценка пространственного разрешения

Предложение использовать вейвлет Морле в качестве материнского при анализе EXAFS спектров [23] обусловлено тем, что вид вейвлета коррелирует со вкладами актов обратного рассеяния в спектр. Вейвлет Морле представляет собой комплексный синус (в дальнейшем это позволит соотносить результаты вейвлет преобразования с результатами Фурье преобразования), промодулированный функцией Гаусса (рис. 2.4):

$$\psi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} (\exp(i\eta k) - \exp(-\frac{\eta^2}{2})) \exp(-\frac{k^2}{2\sigma^2}). \quad (2.8)$$

Здесь параметр η определяет число колебаний под покрывающей функции Гаусса при $\sigma = 1$. Введение константы $-\exp(-\frac{\eta^2}{2})$ гарантирует выполнение условия допустимости (2.6). На рисунке 2.4 представлены действительная и мнимая части функции Морле при $\eta = 5$ и $\sigma = 1$.

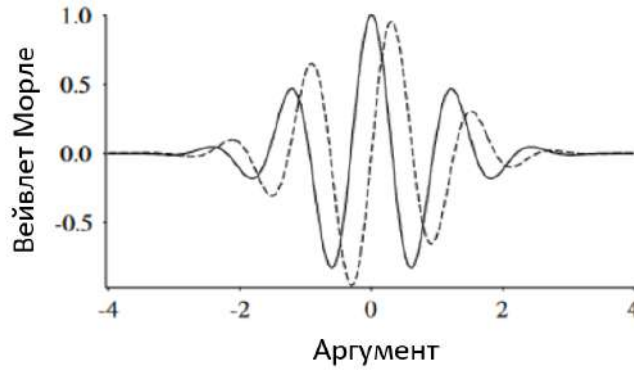


Рисунок 2.4 — Реальная (сплошная линия) и мнимая (пунктирная линия) части функции Морле.

Как было сказано в разделе (2.1), размер окна, определяющего анализируемую часть сигнала, не постоянный, а меняется в зависимости от положения центра окна на плоскости вейвлет карты. Он определяет пространственное разрешение результата применения вейвлет преобразования. Пусть функция материнского вейвлета $\psi(k)$ и ее преобразование Фурье $\hat{\psi}(\omega)$ быстро убывают, т.е. являются функциями окна [67]. Тогда вейвлет преобразование (2.3) локализует сигнал в окне пространства измерения (прямого пространства):

$$[b + ak^* - a\Delta_\psi, b + ak^* + a\Delta_\psi] \quad (2.9)$$

с центром в точке $b + ak^*$ и шириной $2a\Delta_\psi$. Здесь

$$k^* = \frac{1}{\|\psi\|_2^2} \int_{-\infty}^{\infty} k |\psi(k)|^2 dk \quad (2.10)$$

и

$$\Delta_\psi = \frac{1}{\|\psi\|_2^2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} (k - k^*)^2 |\psi(k)|^2 dk \right\}^{1/2}. \quad (2.11)$$

Размер окна в обратном пространстве определяется выражением:

$$\left[\frac{\omega^*}{a} - \frac{1}{a} \Delta_{\hat{\psi}}, \frac{\omega^*}{a} + \frac{1}{a} \Delta_{\hat{\psi}} \right]. \quad (2.12)$$

Центр окна находится в точке $\frac{\omega^*}{a}$, ширина окна составляет $\frac{2\Delta_{\hat{\psi}}}{a}$. Т.е. размер окна

$$[b + ak^* - a\Delta_\psi, b + ak^* + a\Delta_\psi] \times \left[\frac{\omega^*}{a} - \frac{1}{a} \Delta_{\hat{\psi}}, \frac{\omega^*}{a} + \frac{1}{a} \Delta_{\hat{\psi}} \right]. \quad (2.13)$$

изменяется в зависимости от его положения в точке вейвлет пространства. Окно сужается в высокочастотной области и расширяется в области низких частот, сохраняя площадь, равную $4\Delta_\psi\Delta_{\hat{\psi}}$. Для функции Морле размер окна определяется следующим выражением:

$$\left[k - \frac{\eta\sigma}{\sqrt{2}r}, k + \frac{\eta\sigma}{\sqrt{2}r} \right] \times \left[r - \frac{r}{\sqrt{2}\eta\sigma}, r + \frac{r}{\sqrt{2}\eta\sigma} \right]. \quad (2.14)$$

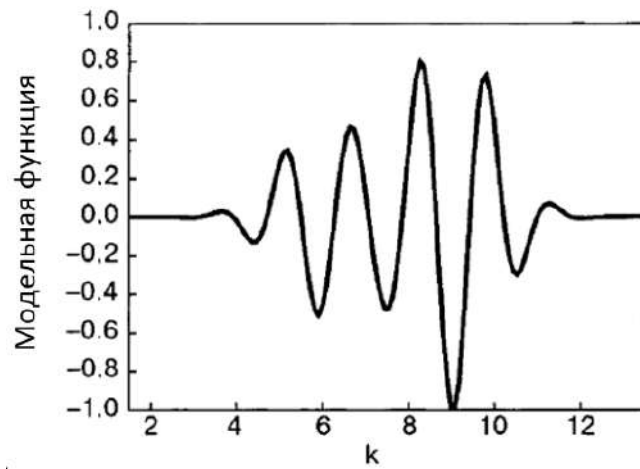


Рисунок 2.5 — Вид модельной функции для демонстрации пространственного разрешения при использовании вейвлет преобразования.

Результаты расчетов вейвлет карт для трех значений параметра η [68], проведенных с целью проиллюстрировать влияние значений параметров функции Морле на размер окна, представлены на рисунке 2.5. Модельная функция была рассчитана согласно выражению:

$$f(k) = 0.5 \sin(2rk + \delta_1) \exp\left(-\frac{(k - C_1)^2}{2}\right) + \sin(2rk + \delta_2) \exp\left(-\frac{(k - C_2)^2}{2}\right). \quad (2.15)$$

Использованные для расчетов значения параметров модельной функции сле-

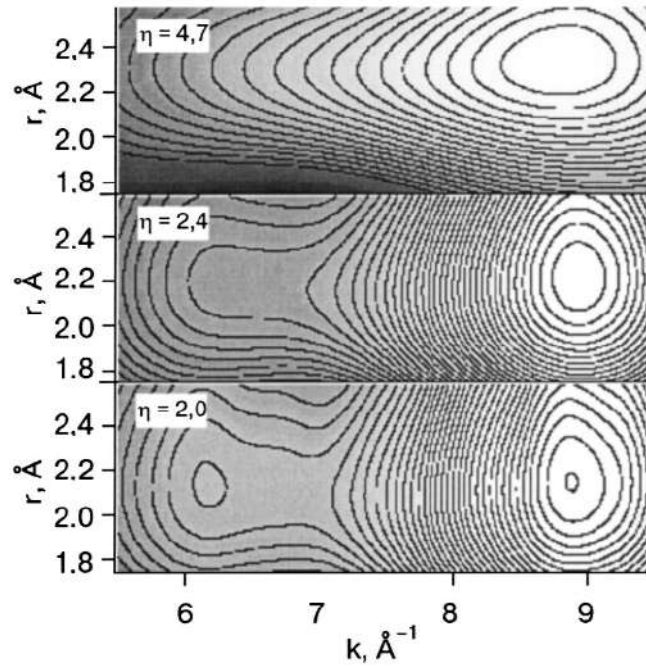


Рисунок 2.6 — Результат вейвлет преобразования модельной функции 2.15. Участок изображения.

дующие: $r = 2.1 \text{ Å}$, $\delta_1 = \delta_2 = 0$, $C_1 = 6$, $C_2 = 9$. Использованные значения параметров функции Морле ($\sigma = 1$, $\eta = 4.7, 2.4$ и 2.0), соответственно. Обратим внимание, что два центра локализации волновых процессов не могут быть разрешены, если горизонтальный размер окна больше, чем расстояние между центрами локализации. В приведенном примере расстояние между центрами локализации C_1 и C_2 равно 3. В соответствии с выражением 2.14 при $\eta = 4.7$ горизонтальный размер окна в k -направлении равен 3.35. Максимумы не могут быть разрешены, если расстояние между ними меньше поперечного размера частотно-временного окна.

Вернемся к реальному EXAFS спектру слоистого двойного гидроксида $Zn - Al$ (рис. 2.7). Если параметры функции Морле удовлетворяют условию

$\eta\sigma > 15$, т.е. если все осцилляции спектра уложены под покрывающей, то параметр r очень близок по интерпретации к параметру частоты в Фурье преобразовании и разрешить вклады от рассевателей разного типа не удастся. Если же значение $\eta\sigma$ мало, то появляется возможность анализировать практически каждое колебание EXAFS спектра в деталях («под лупой»). Параметры η и σ выбираются согласно задаче по идентификации элементов, находящихся на одном расстоянии от центрального атома, т.е. в одной координационной сфере. Вейвлет карта, построенная с использованием материнского вейвлета Морле

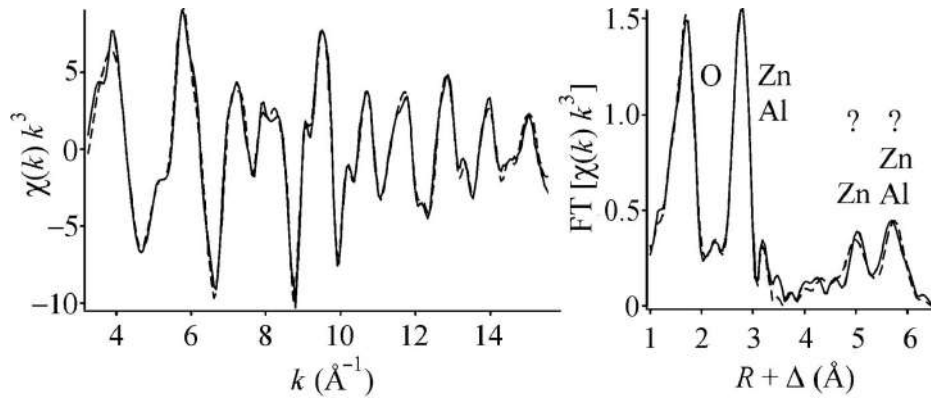


Рисунок 2.7 — (Слева) EXAFS сигнал $Zn - Al$ слоистого двойного гидроксида. (Справа) Амплитуда Фурье спектра сигнала.

для первой металлической координационной сферы $r = 3.1 \text{ \AA}$, приведена на рисунке 2.8. Положение двух пиков в пространстве по k соответствуют положению

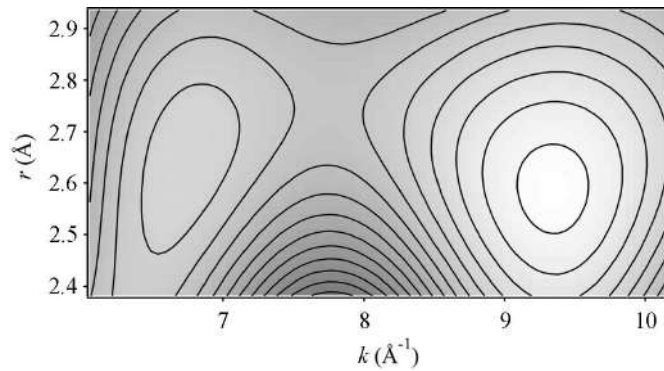


Рисунок 2.8 — Вейвлет карта. Первая металлическая координационная сфера. Параметры Морле $\eta = 30$, $\sigma = 0.19$.

ниям максимумов амплитуд рассеяния $k = 6.7 \text{ \AA}^{-1}$ для Al и $k = 9.4 \text{ \AA}^{-1}$ для Zn . Состав первой металлической координационной сферы для слоистой структуры $Zn - Al$ определен. Задача анализа второй и третьей металлических координационных сфер будет рассмотрена в разделе 2.4. В следующем разделе 2.3 приведен

пример использования вейвлет преобразования с материнским вейвлетом Морле для анализа локальной структуры халькогенидных сверхрешеток.

2.3 Применение метода вейлет-анализа EXAFS-спектров для определения локального атомного окружения Ge и Sb на границе раздела слоев $GeTe$ и Sb_2Te_3 в $Ge - Sb - Te$ халькогенидных сверхрешетках

Халькогенидные сверхрешетки (Chalcogenide Superlattices, CSLs), образованные путем чередования слоев $GeTe$ и Sb_2Te_3 , также называемые межфазной памятью с фазовым переходом (Phase-Change materials, PCM), являются ведущим кандидатом для применения в устройствах памяти [69; 70]. Теоретически было предсказано, что структура PCM образует трехмерный топологический изолятор или полуметаллическую фазу Дирака в зависимости от толщины составляющих слоев. Халькогенидные сверхрешетки с настройкой толщины могут играть важную роль в манипулировании топологическими состояниями, что открывает новые возможности для спинтронных устройств на их основе. Ниже представлено описание изучения деталей атомной структуры высокотекстурированной эпитаксиальной сверхрешетки $GeTe(1 \text{ нм})/Sb_2Te_3(3 \text{ нм})$ [71] с использованием предложенного метода вейлет анализа EXAFS спектров. Определялось локальное атомное окружение Ge и Sb на границе раздела слоев $GeTe$ и Sb_2Te_3 .

Образец сверхрешетки $GeTe(1 \text{ нм})/Sb_2Te_3(3 \text{ нм})$ общей толщиной 60 нм был нанесен на пассивированную Sb поверхность $Si(111)$ при температуре подложки $230^\circ C$ с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии [72]. Затем пленку закрыли, чтобы избежать окисления. Ранее было показано, что термодинамически контролируемый рост приводит к получению высококачественных сверхрешеток $GeTe$ и Sb_2Te_3 . В качестве контрольных образцов были использованы монокристаллы. Высококачественный монокристалл Sb_2Te_3 размером 5 мм² был получен путем медленного охлаждения расплавленной стехиометрической смеси Sb и Te чистоты (99.999%) методом Бриджмена в вертикальной геометрии [73]. Синтез высококачественного монокристалла $GeTe$ размером несколько мм² был осуществлен путем плавления чистых элементов (Ge, Te) в вакуумной ампуле в соотношении $Te : Ge = 1.002 : 1$. Затем расплав охлаждали, а конец ампулы, расположенный в области продуктов реакции, помещали на три дня в печь (при температуре 600°). Оставшийся Te испарялся и конденсировался на холодном конце ампулы [74].

Измерения проводилась на линии SAMBA синхротрона SOLEIL (Париж, Франция) и на линии B18 синхротрона Diamond (Англия). EXAFS спектры были получены в режиме флуоресцентной моды при комнатной температуре. Сканирование для К-края *Ge* проводилось в области 11 – 11,8 кэВ. Сканирование для К-края *Sb* проводилось в диапазоне 35 – 40 кэВ. Размер рентгеновского пучка, падающего на образец 22×300 мкм². Обработывался результат, усредненный по шести спектрам. Измерения занимали 30 минут на скан. Образец непрерывно вращался для исключения Брэгговских пиков от *Si* подложек. Несмотря на то, что ближайшее окружение атомов *Ge* и *Sb* в CSLs напоминает окружение атомов *GeTe* и *Sb₂Te₃* в объеме, за пределами первой оболочки наблюдаются искажения. На рис. 2.9 показаны EXAFS спектры и их Фурье образы на К-краях поглощения *Ge* и *Sb* в диапазоне значений k 0–13.5 Å⁻¹. Спектры собраны для объемных образцов *GeTe*, *Sb₂Te₃* (пунктирные линии) и CSL (сплошные линии), соответственно. Сравнение показывает различающиеся по динамике процессы затухания амплитуды и небольшой сдвиг фазы колебаний в спектре CSL по отношению к сигналу от кристалла.

Что касается расстояния между ближайшими соседями, то наблюдается сходство CSL кривых с кривыми, соответствующими монокристаллам, использованными для сравнения (*GeTe* и *Sb₂Te₃*). Рассмотрим верхний рисунок. На нем 2.9(a) показан EXAFS спектр и его Фурье образ для центрального атома *Ge*. Оба Фурье спектра демонстрируют заметную особенность с двойным пиком в области $R = 2.7 - 3.2$ Å, обусловленную двумя траекториями рассеяния фотоэлектронов от первых ближайших соседей. По аналогии с монокристаллом *GeTe*, эти пути связывают атомы *Ge* с атомами *Te*. Более слабые пики и плечи на больших расстояниях могут быть объяснены вкладом ближайших соседей и эффектами многократного рассеяния. В частности, заметное различие сигналов в области $R = 3.2 - 5.0$ Å указывает на различное окружение атомов *Ge* в слоях сверхрешетки по сравнению с объемной структурой *GeTe*. На рисунке 2.9(b) показан EXAFS спектр и его Фурье образ для центрального атома *Sb*. В Фурье спектре видно перекрытие колебаний без седла, что демонстрирует явную близость траекторий при $R = 2.7 - 3.2$ Å. Визуальное сравнение профилей для центральных атомов *Sb* и *Ge* говорит о том, что за пределами диапазона ближайших соседей усредненные локальные детали атомной структуры в слоях сверхрешетки и в объемных кристаллических структурах *GeTe* и

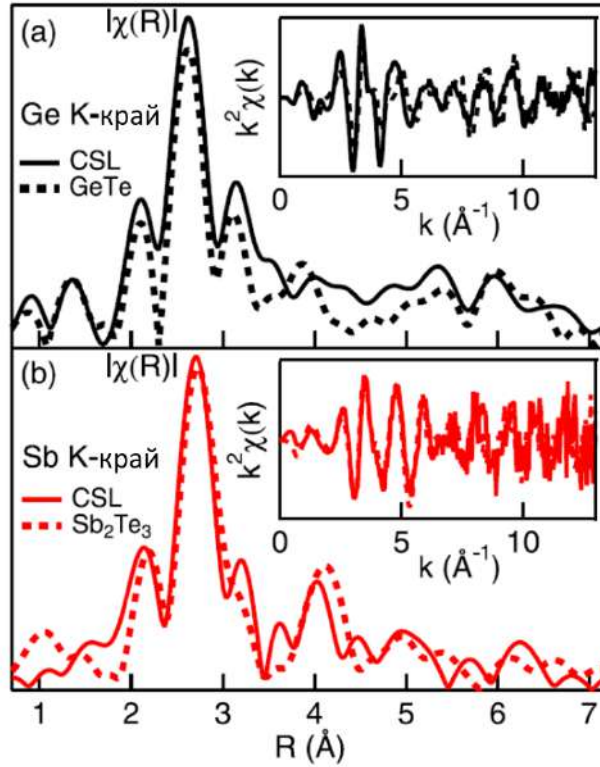


Рисунок 2.9 — Спектры EXAFS, взвешенные на k^2 (вставка), соответствующие значения преобразования Фурье (R) (основное окно) для образца CSLs (сплошные линии) и эталонных образцов кристаллов (пунктирные линии) $GeTe$ и Sb_2Te_3 , соответственно. (a) К- край поглощения Ge ; (b) К- край поглощения Sb .

Sb_2Te_3 различаются. Наблюдаемые различия диктуют необходимость уточнить расположение атомов Ge и Sb в структуре сверхрешетки другими методами.

В качестве структурной модели интерфейса $GeTe/Sb_2Te_3$ рассмотрена кристаллическая структура, базирующаяся на визуальном анализе изображения высокоразрешающего сканирующего просвечивающего микроскопа [69]. Данное изображение представлено на рисунке 2.10(a). Модель в дальнейшем будем называть Kooi TEM (KT). Она соответствует слоистой структуре сверхрешетки, приведенной слева. Атомы Sb , Te и Ge обозначены красным, синим и зеленым кружками, соответственно. Полуцветные кружки указывают на 50%-ное перемешивание атомов Sb и Ge , такое же представление на черном профиле справа. На рис. 2.10(b) приведены значения модуля преобразования Фурье, рассчитанные для экспериментальных спектров EXAFS (серым цветом), для центральных атомов Sb (верхний рисунок) и Ge (нижний рисунок), а также значения модуля преобразования Фурье, рассчитанные для модельных EXAFS

спектров (*Ge*-черные, *Sb*-красные кривые). Модельные EXAFS спектры рассчитывались с использованием модели структуры, построенной по изображениям просвечивающего электронного микроскопа Kooi TEM (КТ).

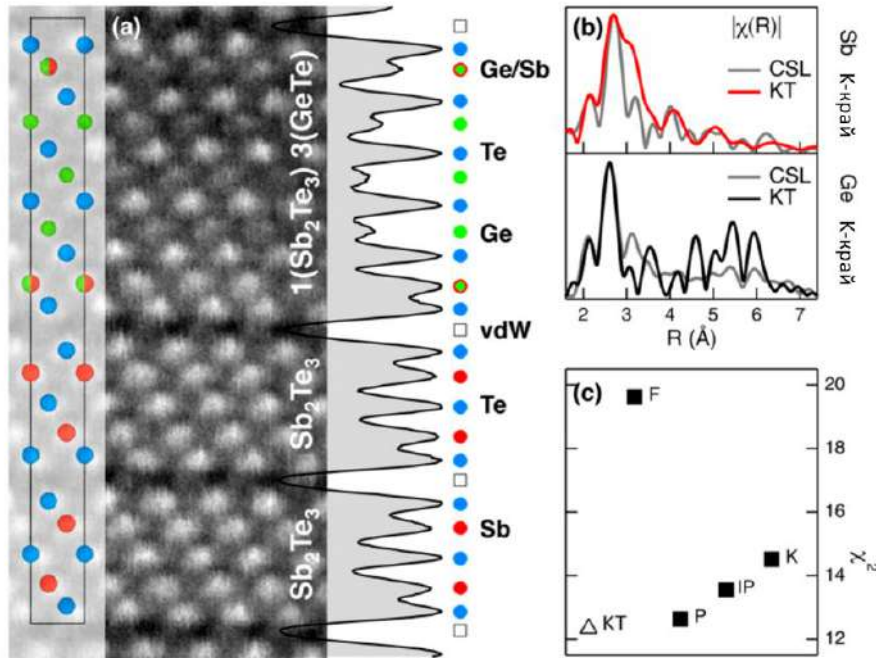


Рисунок 2.10 — (а) — Изображение образца CSLs, полученное в электронном микроскопе. Слева — модель. Атомы *Sb*, *Te* и *Ge* обозначены красным, синим и зеленым кружками, соответственно. Полуцветные кружки указывают на идеальное 50%-ное перемешивание атомов *Sb* и *Ge*. Черный профиль справа — результат количественного анализа изображения. (b) — Модуль преобразования Фурье экспериментальных спектров EXAFS для центральных атомов *Sb* и *Ge* (серые кривые) и результат моделирования (*Ge*-черные, *Sb*-красные кривые). (c) Сравнение теоретических моделей с экспериментальными данными CSLs.

Черный профиль на рисунке 2.10(а) справа показывает две основные тенденции:

- (1) m *GeTe* блоков интеркалированы в пятикратный *Sb₂Te₃* слой [*Te* — *Sb* — *Te* — *Sb* — *Te*]. Блок может быть связан потенциалами Ван-дер-Ваальса с $(n - 1)$ *Sb₂Te₃*, как в природных сплавах *GST* [75]. Здесь $m = 3$ и $n = 2$;
- (2) на внешнем слое *Sb* в блоке перемешаны с атомами *Ge*, предположительно из-за взаимной диффузии.

Для данной структурной модели стека *GeTe/Sb₂Te₃* были рассчитаны EXAFS спектры для *K*-краев поглощения *Ge* и *Sb* с использованием програм-

мы FEFF6 [76]. Модельные спектры были рассчитаны с учетом всех возможных положений атомов *Ge* и *Sb* как поглотителей. Учитывалось однократное и многократное рассеяние на окружающих атомах в радиусе до 8 Å. При расчете модельных EXAFS спектров (1.3) были использованы следующие параметры $S_0^2 = 1$, $\sigma^2 = 0.003$. Рассчитанные для К-краев *Sb* и *Ge* спектры нормировались каждый на величину своего основного пика.

На рисунке 2.10(b) для модели структуры КТ представлены модули Фурье преобразования на К-границе *Ge* (черные кривые) и *Sb* (красные кривые). Для экспериментальных спектров модули Фурье преобразования даны серым цветом.

Также были проведены расчеты спектров и соответствующих им преобразований Фурье для четырех известных в литературе моделей укладки атомов в структурах данного типа [77]. Модели обозначены следующим образом: Ferro Ge-Te (F), Petrov (P), Inverted Petrov (IP), Koon (k). Соответствующие 4 модели и результаты преобразования Фурье, рассчитанного для модельных и измеренного спектров приведены на рисунке 2.11.

Для координационной сферы $R = 2.7 - 3.2$ Å наблюдается хорошее соответствие в Фурье пространстве между всеми моделями и экспериментальными данными. Значительные различия наблюдаются во второй и третьей координационных сферах. Таким образом, визуальное сравнение кривых преобразования Фурье позволяет оценить репрезентативность той или иной модели. Для количественной оценки схожести использовались значения среднеквадратичного отклонения модельного спектра от измеренного для двух К-границ. На рис. 2.10(c) теоретические модели сравниваются с построенной. Модель КТ имеет наименьшее значение для величины среднеквадратичного отклонения. Она является хорошей отправной точкой для дальнейшего уточнения. Результат расчета вейвлет-преобразования с материнским вейвлетом Морле для образцов CSL и *GeTe* на К-границе *Ge* представлен на рисунке 2.12. Основное различие между сигналами монокристалла и сверхрешетки заметно в области 2-3 Å, где в CSL четко выделяются два вклада при 4 Å^{-1} и 10 Å^{-1} .

Проведенное моделирование амплитуд обратного рассеяния с использованием программного обеспечения [76] позволило интерпретировать карты, подтвердив неоднородный состав границы между слоями. Пунктирные вертикальные линии связывают максимумы взвешенных на k^3 огибающих с соответствующими областями на двумерной карте вейвлет преобразования. Раз-

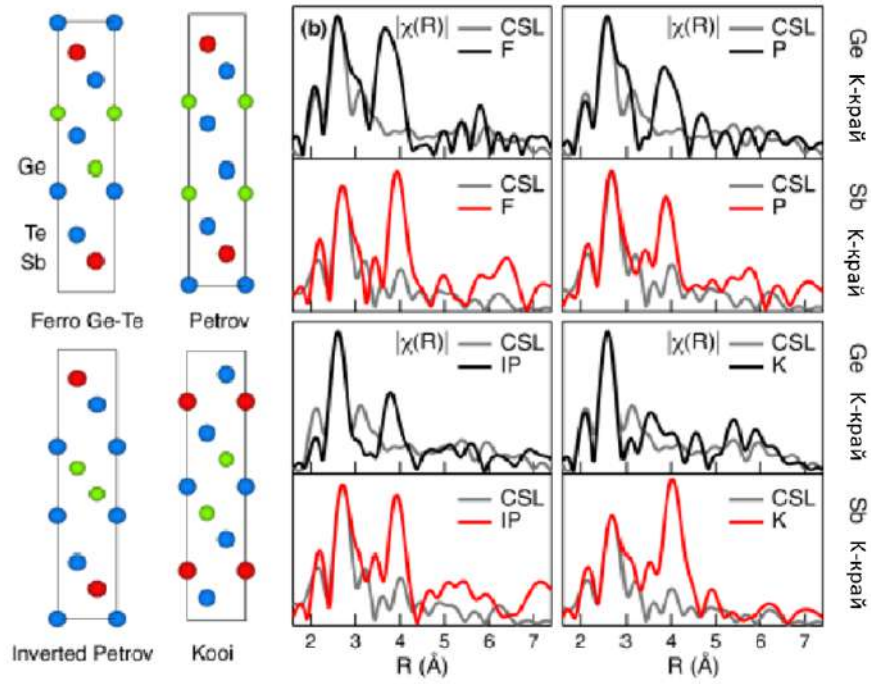


Рисунок 2.11 — Результаты теоретических расчетов, проведенных согласно Томинаги и др. [77]. Атомы *Sb*, *Te* и *Ge* обозначены красным, синим и зеленым кружками, соответственно. (b) Фурье преобразования, рассчитанные по экспериментальным EXAFS спектрам на *K*-границе *Ge* и *Sb* (серые кривые) и модельным спектрам (черные кривые *Ge*, красные кривые *Sb*) для четырех моделей.

ница на двух картах в области первой координационной сферы между CSL и *GeTe* демонстрирует наличие не эквивалентных связей *Ge* в сверхрешетке (рис. 2.13). Двигаясь далее от центрального атома к оболочке 3 – 4 Å, на карте *CSL* появляется плечо в районе *k* между 4 – 6 Å. Для карты *GeTe* ничего подобного не наблюдается. Моделирование показывает, что это следы вкладов *Sb*. В результате анализа вейвлет карт сделан вывод, что на границе раздела между слоями *GeTe* и *Sb₂Te₃* образован слой, в котором идентифицированы две концентрические координационные сферы, окружающие два центральных атома *Ge* и *Sb*. Первая включает короткие и длинные внеплоскостные связи между поглотителями и атомами *Te* (рис. 2.13 b). Для обозначения атомных позиций на рис. 2.13 b использованы следующие обозначения: (i) обозначение *A* использовано для атомов *Ge* или *Sb* в центре соответствующего блока (*GeTe* или *Sb₂Te₃*); (ii) обозначение *B* для атомов *Ge*, расположенных близко к смешанному слою в основном блоке; (iii) обозначение *C* для атомов *Ge* или *Sb* в смешанном слое. Вторая сфера содержит два типа связей поглотителей с атомами *Ge* и *Sb*, кото-

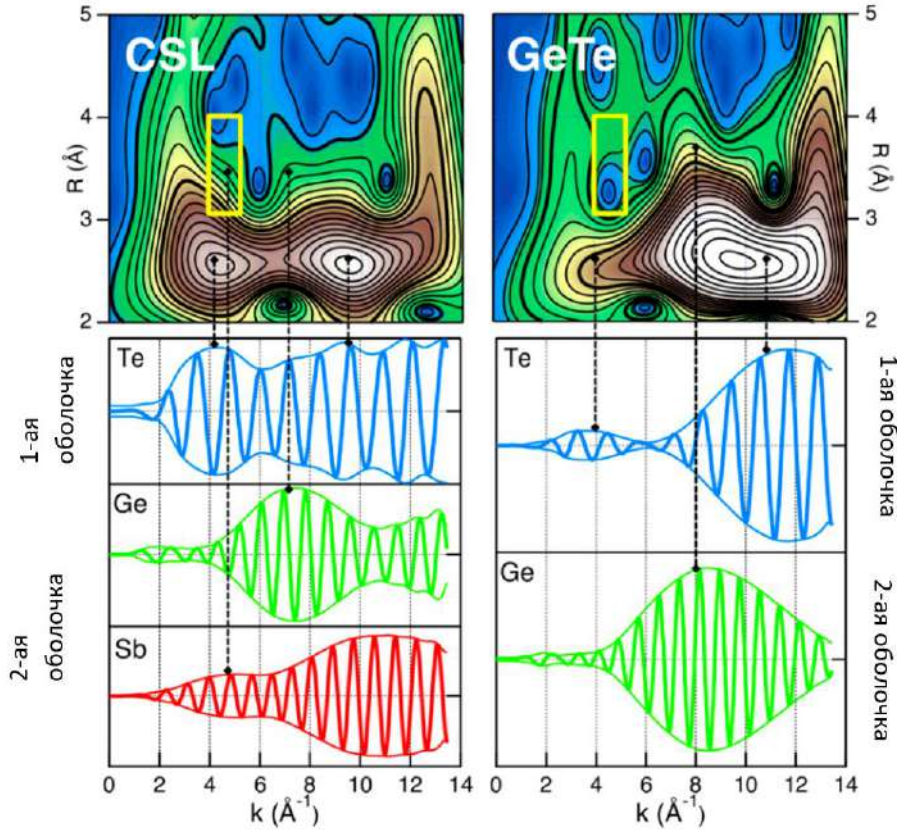


Рисунок 2.12 — Верхние рисунки: вейвлет карты с использованием материнского вейвлета Морле. Нижние рисунки: результаты моделирования траекторий обратного рассеяния, соответствующих 1-й и 2-й оболочкам, для модели KT монокристалла $GeTe$.

рые схематически изображены на рис. 2.13 c). В таблице 2.14 $X - X$ определяет пары $Ge - Ge$, $Ge - Sb$ и $Sb - Sb$. Расстояние в плоскости $X - X_{in-p}$ совпадает с параметром сверхрешетки для всех слоев. Оценки чуть меньше, чем у эталонных монокристаллов. Наблюдаемые искажения в структуре сверхрешетки свидетельствуют о том, что физические свойства, и в частности характер связи, отличаются от идеализированной CSL . Делокализация электронов изменяет свойства структуры и может влиять на сегнетоэлектрические свойства структуры.

Сравнение с известными в литературе моделями укладки атомов в структурах данного типа не позволило однозначно интерпретировать измеренные EXAFS спектры. Проведенный вейвлет анализ спектров с использованием материнского вейвлета Морле показал, что $GeTe$ двойные слои не изолированы, а интеркалированы в один пятикратный слой Sb_2Te_3 , где на внешних слоях атомы Sb перемешаны с атомами Ge .

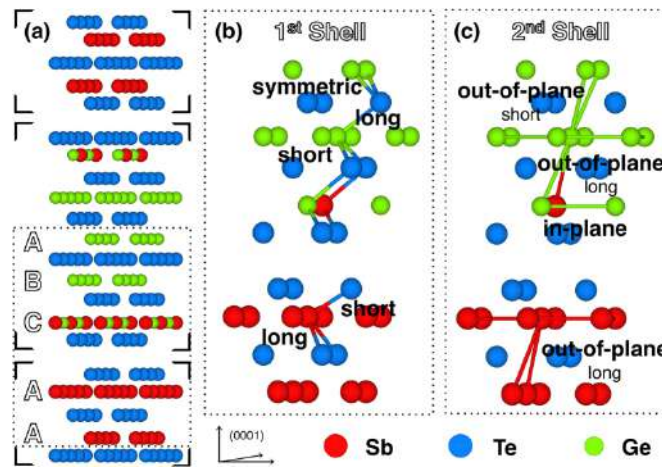


Рисунок 2.13 — Структура сверхрешетки [71].

1 st shell	Distance (Å)		
	A	B	C
Ge-Te _{short}	2.85 (1)	2.81 (1)	2.93 (1)
Ge-Te _{long}	2.85 (1)	3.09 (2)	3.15 (2)
Sb-Te _{short}	2.95 (2)		2.93 (2)
Sb-Te _{long}	3.13 (3)		3.15 (3)
2 nd shell	A,B	B,C	A,B,C
Ge-Ge _{out-p,short}	3.94 (3)		
X-X _{in-p}			4.17 (3)
X-X _{out-p,long}		4.39 (4)	

Рисунок 2.14 — Таблица. Межатомные расстояния для 1-й и 2-й координационных сфер CSL, полученные в результате модельных расчетов. Атомные позиции обозначены буквами А, В и С, как показано на рис. 2.13, они определяют пары:

$$Ge - Ge, Ge - Sb \text{ и } Sb - Sb.$$

2.4 Связь пространственного разрешения с выбором материнского вейвлета. Вейвлет FEFF-Морле

При анализе EXAFS-спектров структуры слоистых двойных гидроксидов, в которых часть катионов Zn^{2+} замещена катионами Al^{3+} , использование вейвлет преобразования с материнским вейвлетом Морле, как описано в разделе 2.2, позволило уточнить распределение атомов обоих типов в первой металлической координационной сфере (рис. 2.15) [23]. Слоистые двойные гидроксиды,

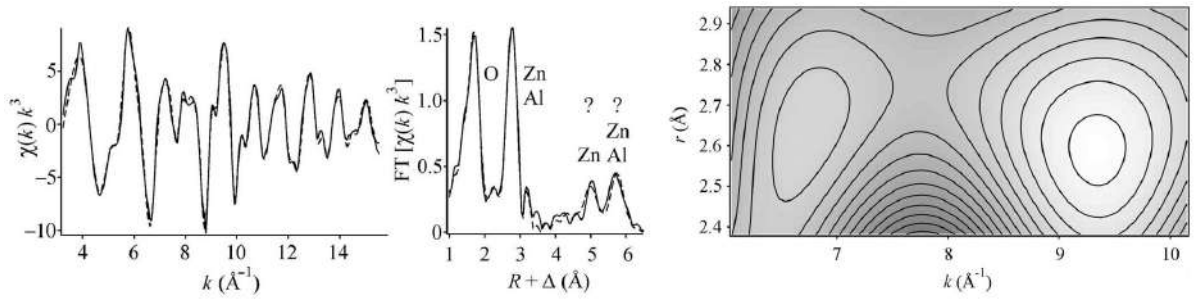


Рисунок 2.15 — (Слева) EXAFS сигнал $Zn - Al$ слоистого двойного гидроксида. (По центру) Амплитуда Фурье спектра сигнала. (Справа) Участок вейвлет карты для первой металлической координационной сферы.

как неорганические соединения, состоящие из положительно заряженных слоёв, образованных ионами разновалентных металлов и гидроксид-ионами, разделенных подвижными анионами и молекулами воды, используются в качестве двумерных нанореакторов или двумерных модельных систем для изучения процессов переноса энергии. Взаимное расположение второй и третьей метал-

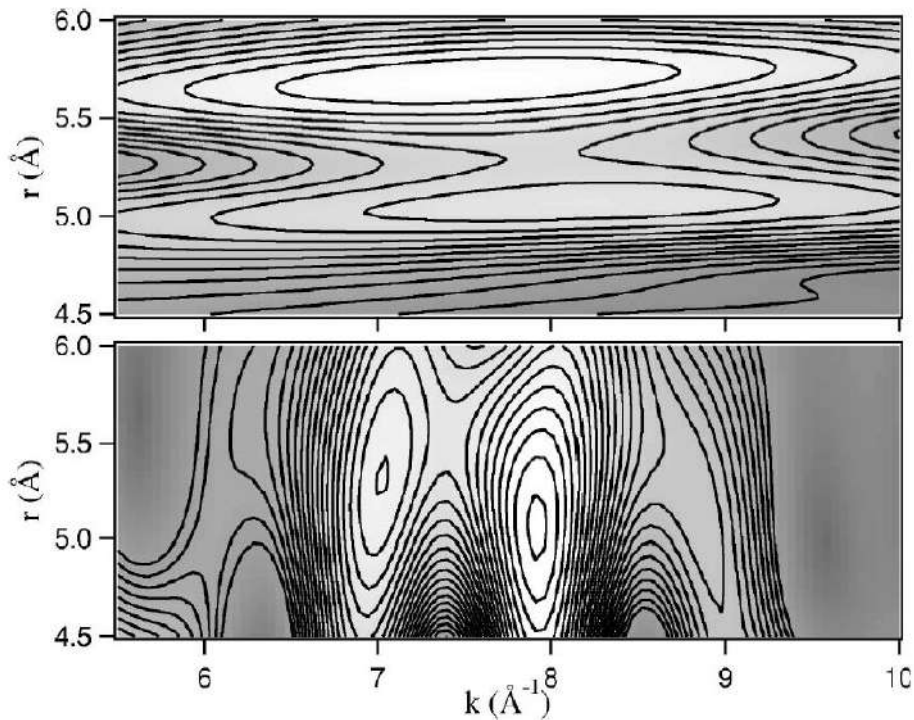


Рисунок 2.16 — Вейвлет карты, рассчитанные для второй и третьей металлических сфер. Верхний рисунок: $\eta = 15$, $\sigma = 2$. Нижний рисунок: $\eta = 9.9$, $\sigma = 0.47$.

лических сфер и амплитуд обратного рассеяния для Zn и Al по k не позволяют разделить вклады от актов рассеяния в двух направлениях (по k и по r) одновременно. На рисунке 2.16 это проиллюстрировано. Обратимся к выражению для расчета размера окна при использовании функции Морле в качестве ма-

теринского вейвлета:

$$\left[k - \frac{\eta\sigma}{\sqrt{2}r}, k + \frac{\eta\sigma}{\sqrt{2}r} \right] \times \left[r - \frac{r}{\sqrt{2}\eta\sigma}, r + \frac{r}{\sqrt{2}\eta\sigma} \right]. \quad (2.16)$$

Разрешение по k и по r критически зависит от выбора значений параметров η и σ . При этом для k эта зависимость прямая, для r - обратная (рис. 2.17). Подход с использованием материнского вейвлета Морле в качестве ядра вейвлет-преобразования не позволяет обеспечить требуемого для решения задачи пространственного разрешения по пространства k и r одновременно для второй и третьей металлических координационных сфер, поскольку условия, вытекающие из выражения (2.16):

$$\begin{cases} \frac{\eta\sigma}{\sqrt{2}r} < \frac{k_2 - k_1}{2} \\ \frac{r}{\sqrt{2}\eta\sigma} < \frac{r_2 - r_1}{2}, \end{cases} \quad (2.17)$$

одновременно выполнены быть не могут для исследуемого образца. Испол-

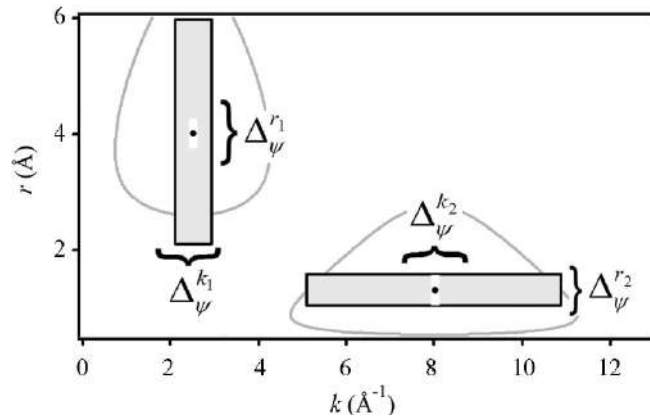


Рисунок 2.17 — Иллюстрация к масштабированию окна.

зование вейвлета Морле не позволило определить состав второй и третьей металлических сфер. Т.е. не удалось подтвердить или опровергнуть наличие атомов Zn^{2+} и/или Al^{3+} под пиками Фурье, отмеченных вопросительными знаками, на рисунке 2.18.

Для случаев, подобных рассматриваемому, в диссертационном исследовании предложено сконструировать материнский вейвлет, адаптируя его к модели акта рассеяния от известного центра рассеяния, находящегося на заданном расстоянии от центрального (ионизируемого) атома [78]. В этом случае вертикальная ось вейвлет-карты принимает смысл оси масштабов. И если вклады актов рассеяния рассматриваемого типа присутствуют в анализируемом EXAFS спектре, то на масштабе, равном 1, будет максимум.

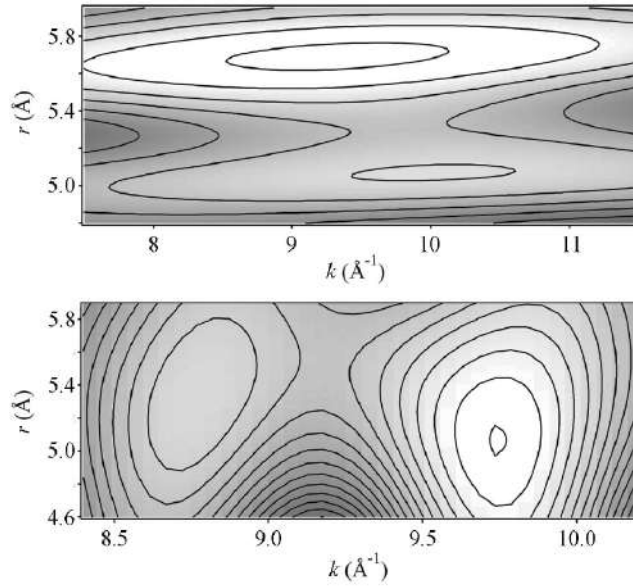


Рисунок 2.18 — Вейвлет карта. Вторая и третья металлические координационные сферы. Параметры Морле $\eta = 30$, $\sigma = 1$ и $\eta = 30$, $\sigma = 0.16$.

Далее описана процедура построения вейвлета, названного *FEFF – Morlet*. Будем использовать программу FEFF [21], позволяющую проводить

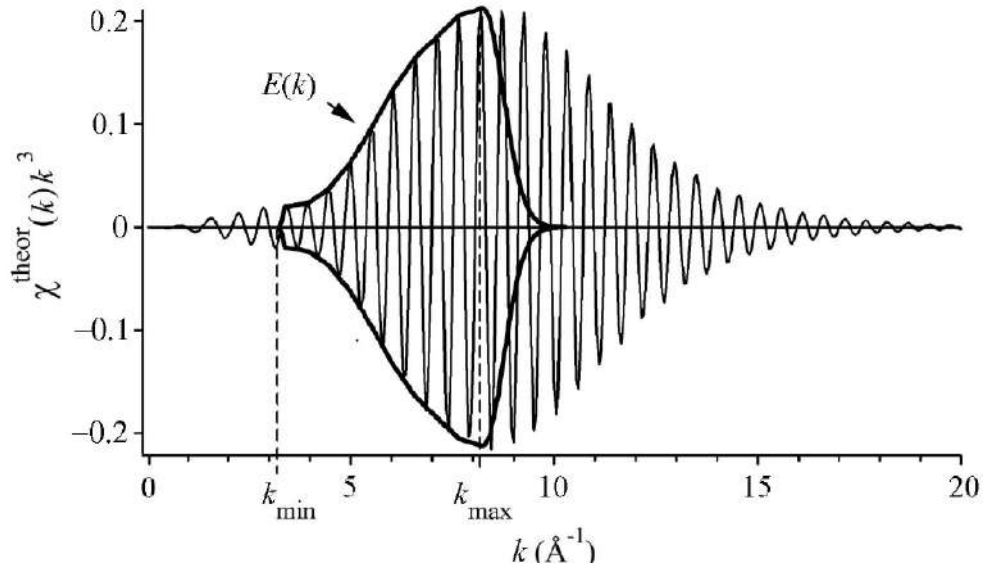


Рисунок 2.19 — Спектр EXAFS для однократного акта рассеяния $Zn - Zn$, $R = 6.0 \text{ Å}$. Черным цветом показана огибающая.

расчет спектров для однократных и многократных актов обратного рассеяния после задания окружения центрального (ионизируемого) атома. Программа FEFF рассчитывает отдельно каждый из путей от центрального атома к рассеивателю и обратно. Будем использовать вклады путей, рассматриваемых согласно нашей гипотезе о наличии рассеивателя заданного типа, рассчи-

танные с помощью программы FEFF, в качестве основы для построения материнских *FEFF – Morlet* вейвлетов.

Опишем шаги построения вейвлета. Входной файл для программы FEFF

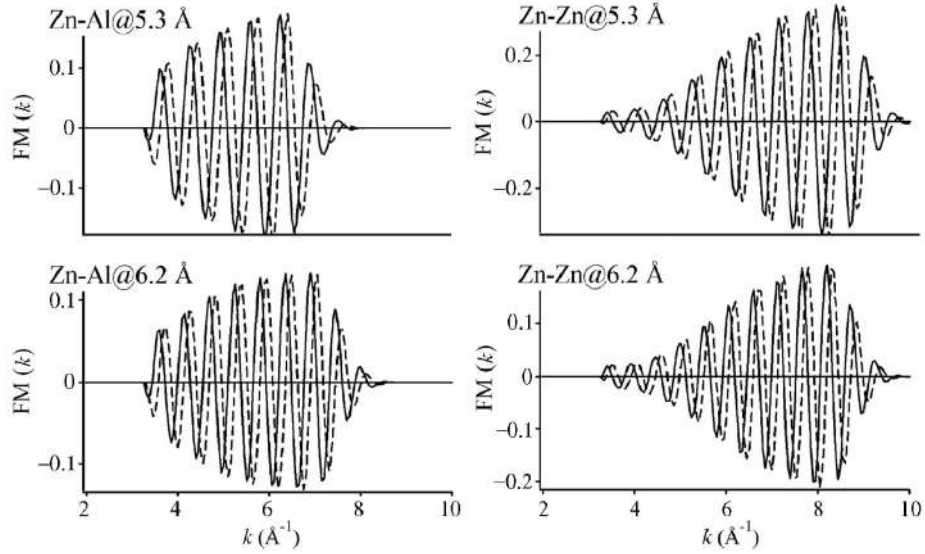


Рисунок 2.20 — Действительная (сплошные линии) и мнимая (пунктирные линии) части вейвлетов *FEFF – Morlet*, построенных на основе четырех модельных спектров $Zn-Al$ $r = 5.2 \text{ Å}$ и $r = 6.0 \text{ Å}$; $Zn-Zn$ $r = 5.2 \text{ Å}$ и $r = 6.0 \text{ Å}$.

содержит тип центрального атома и тип атома рассеивателя с указанием расстояния для описания положения атома. Результат расчета программы FEFF файл feff0001.chi, взвешенный по k^3 , используется в качестве теоретического спектра $theor(k)$ (рис. 2.19). Рассчитанный спектр $theor(k)$ необходимо ограничить, чтобы сохранить свойство локальности вейвлета для последующего анализа измеренного спектра. Левая граница определяется границей интервала реального измерения, обозначим ее k_{min} . Правая граница определяется зоной влияния фактора Дебая-Уоллера, обозначим ее k_{max} . Огибающая кривая $E(k)$ строится с использованием сплайн-процедуры, соединяющей максимумы колебаний $theor(k)$ (рис. 2.19) между k_{min} и k_{max} . Чтобы избежать появления высокочастотных компонент в вейвлет пространстве, обусловленных резким краем, огибающая справа дополняется гауссовой кривой с полушириной 0.5 Å . Обозначим $\chi^{mod}(k)$ результирующий модельный спектр в пределах $(k_{min}; k_{max})$, дополненный справа функцией Гаусса. Огибающая $E(k)$, используемая для построения вейвлета *FEFF – Morlet*, отмечена черной линией. Запишем действительную часть комплексной функции *FEFF – Morlet* $\psi(k)$:

$$Re\psi(k) = E(k) \cos(2kr + \varphi). \quad (2.18)$$

Определим значения r и φ для функции $Re\psi(k)$, максимизируя значение корреляционной функции:

$$C(r, \psi) = \int_{k_{min}}^{k_{max}} E(k) \cos(2kr + \varphi) \chi^{mod}(k) dk \quad (2.19)$$

Диапазоны для поиска значений r и φ определены как $r \in [r - \delta r; r + \delta r]$ и $\varphi \in [0; 2\pi]$, соответственно. δ_r необходимо выбирать таким образом, чтобы избежать влияния соседней координационной сферы. Оценки радиусов координационных сфер берутся из Фурье спектра. Мнимая часть вейвлета $FEFF - Morlet$ конструируется путем добавления фазового сдвига $\frac{\pi}{2}$ к фазе

$$Im\psi(k) = E(k) \sin(2kr + \varphi). \quad (2.20)$$

Будем использовать сконструированный материнский вейвлет для анализа состава второй и третьей металлических координационных сфер спектра структуры $Zn - Al$ слоистого двойного гидроксида, представленного на рисунке 2.15. Для построения материнских вейвлетов были рассчитаны однократные пути рассеяния $Zn - Al$ при расстояниях $r = 5.2 \text{ \AA}$ и $r = 6.0 \text{ \AA}$, а также однократные пути рассеяния $Zn - Zn$ при расстояниях $r = 5.2 \text{ \AA}$ и $r = 6.0 \text{ \AA}$. Реальные и мнимые части $FEFF - Morlet$ вейвлетов для каждого из перечисленных случаев представлены на рис. 2.20.

Чтобы выполнить условие допустимости 2.6 спектры смещались по k на k_{grav} , чтобы центр тяжести был в нуле:

$$\begin{aligned} Re\psi(k) &= E(k + k_{grav}) \cos(2(k + k_{grav})r + \varphi) \\ Im\psi(k) &= E(k + k_{grav}) \sin(2(k + k_{grav})r + \varphi). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Величина вейвлет преобразования максимальна, при максимальном совпадении материнского вейвлета и сигнала. Благодаря своей конструкции, вейвлет $FEFF - Morlet$ является оптимальным материнским вейвлетом, чтобы почувствовать вклад конкретного акта рассеяния, т.е. почувствовать тип и расположение атома. Если проверяемая гипотеза о наличии атома конкретного типа на конкретном расстоянии от центрального (ионизированного атома) атома верна, то на вейвлет карте на единичном масштабе в области положения максимума амплитуды рассеяния анализируемого атома возникнет ярко выраженный максимум. Изменение положения максимума по любой из осей будет приводить к опровержению проверяемой гипотезы. Обозначим параметр

масштаба s (scale), чтобы обозначение соответствовало смысловому значению параметра.

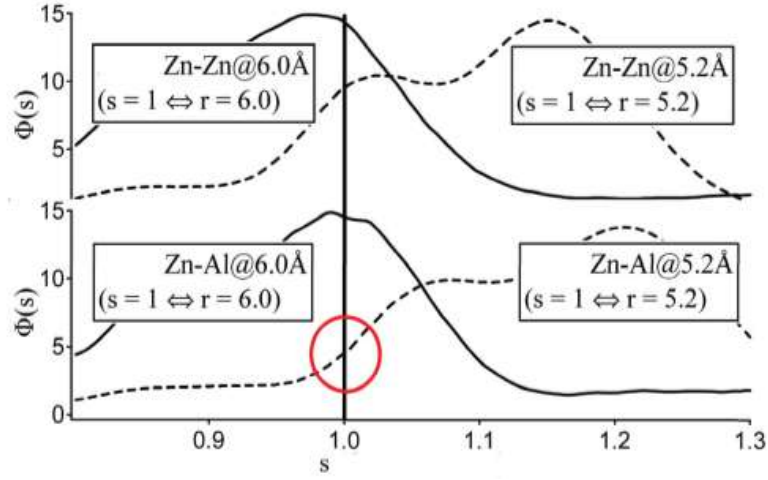


Рисунок 2.21 — Результат анализа вейвлет-карт с использованием FEFF-Морле вейвлетов для путей Zn–Zn при $r = 6.0 \text{ \AA}$, Zn–Al при $r = 6.0 \text{ \AA}$, Zn–Zn при $r = 5.2 \text{ \AA}$ и Zn–Al при $r = 5.2 \text{ \AA}$ [24].

Положение максимумов при $s = 1$ говорит о верной оценке величины радиуса координационной сферы. Перепишем выражение для расчета вейвлет преобразования с учетом введенного обозначения:

$$WT_{\chi}^{\Psi}(k, s) = \sqrt{s} \int \chi(k') k'^n \Psi_{r_{opt}}^{FM*}[2s(k' - k)] dk'. \quad (2.22)$$

Для принятия решения об истинности гипотезы предложено анализировать значение энергии:

$$\Phi_s = \int_{k_{min}}^{k_{max}} [WT_{\chi}^{\Psi}(k, s)]^2 dk. \quad (2.23)$$

Для определения состава атомов на второй и третьей металлических сферах были рассчитаны 4 вейвлет-преобразования с использованием *FEFF – Morlet* материнских вейвлетов, построенных для путей Zn–Zn при $r = 6.0 \text{ \AA}$, Zn–Al при $r = 6.0 \text{ \AA}$, Zn–Zn при $r = 5.2 \text{ \AA}$ и Zn–Al при $r = 5.2 \text{ \AA}$ (рис. 2.21). Для $r = 6.0 \text{ \AA}$ карты показывает максимумы в районе $s = 1$ как для Zn, так и для Al, подтверждая, что оба атома присутствуют на данной координационной сфере. Для $r = 5.2 \text{ \AA}$ максимум присутствует только для Zn. После проведенного анализа полученных результатов в качестве финальной модели атомного строения изучаемого Zn–Al слоистого гидроксида была выбрана модель Бриндли и Киккавы [79]. Модель предполагает равномерное распределение металла в слое

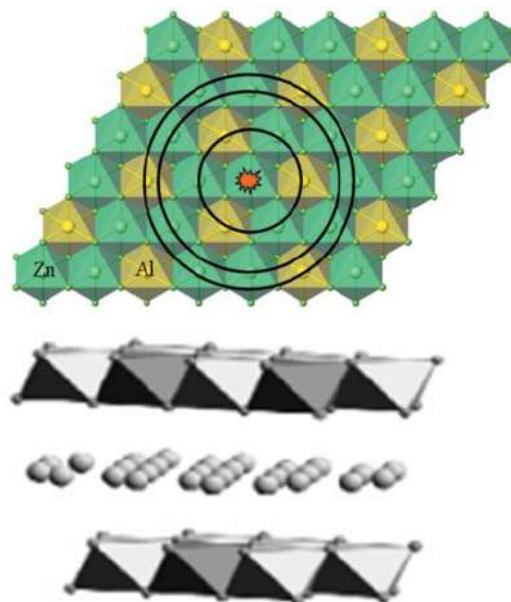


Рисунок 2.22 — Атомная структура двойного слоистого гидроксида, спектр которого изучался.

двойного гидроксида. Согласно модели первая металлическая сфера $r = 3.1 \text{ \AA}$ содержит три атома Zn и три атома Al, вторая металлическая сфера $r = 5.2 \text{ \AA}$ содержит шесть атомов Zn, на третьей металлической оболочке $r = 6.0 \text{ \AA}$ три атома Zn и три атома Al. Финальная модель изучаемого слоистого гидроксида представлена на рисунке 2.22.

Предложенный метод с использованием *FEFF – Morlet* материнских вейвлетов для анализа EXAFS спектров (рис. 2.23) был использован в задаче изучения процессов поглощения йода в гидротальцитоподобных минералах [80]. Необходимо было определить распределение Al^{3+} в катионном слое (см. рис. 2.24). Исследование локализации заряженных центров в $(Mg/Zn)_\gamma Al - I$ слоях двойных гидроксидов с использованием метода порошковой рентгеновской дифракции и метода EXAFS, чувствительного как к ближнему, так и к дальнему порядку, показало отсутствие какой-либо пространственной корреляции между катионами Al^{3+} из гидроксидных слоев и иодид-анионами из межслоевого пространства, независимо от распределения заряда катионов. Было показано, что Al^{3+} и Zn^{2+} распределены в регулярном порядке в $Zn_2Al - I$ слое двойного гидроксида, образуя сотовую конфигурацию на дальних расстояниях и уникальную гексагональную суперячейку. Локальный порядок Al^{3+} с орторомбической суперячейкой (рис. 2.25) для Zn_3Al слоя двойного гидроксида был обнаружен впервые.

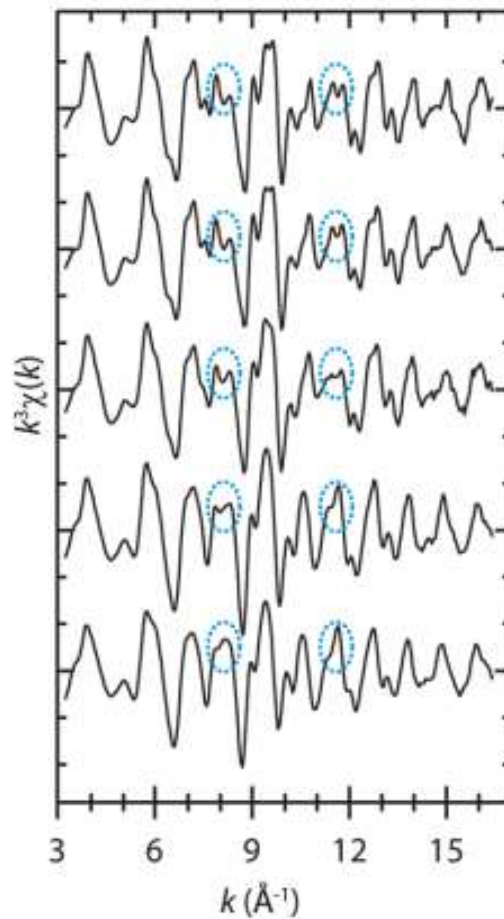


Рисунок 2.23 — Анализируемые спектры EXAFS [80].

2.5 Заключение

Потребность в быстром и эффективном управлении информацией стимулирует исследования материалов, которые могут переключаться в масштабах нанометровых длин и субнаносекундных временных масштабах. Материалы с фазовым переходом (PCM) (раздел 2.3) обладают уникальным набором свойств, который идеально подходит для приложений запоминающих устройств. PCM идентифицируется по своей способности быстро и обратимо переключаться между кристаллическим и аморфным состоянием, где аморфное состояние получается путем плавления кристаллического состояния с последующим быстрым закаливанием. Эти два состояния существенно различаются по своим свойствам, таким как оптическая отражательная способность, а также электропроводность. Фазовое превращение, как правило, вызывается термическим нагревом или электрическими и оптическими импульсами различной длительности и амплитуды. Большой контраст в отражательной способности между

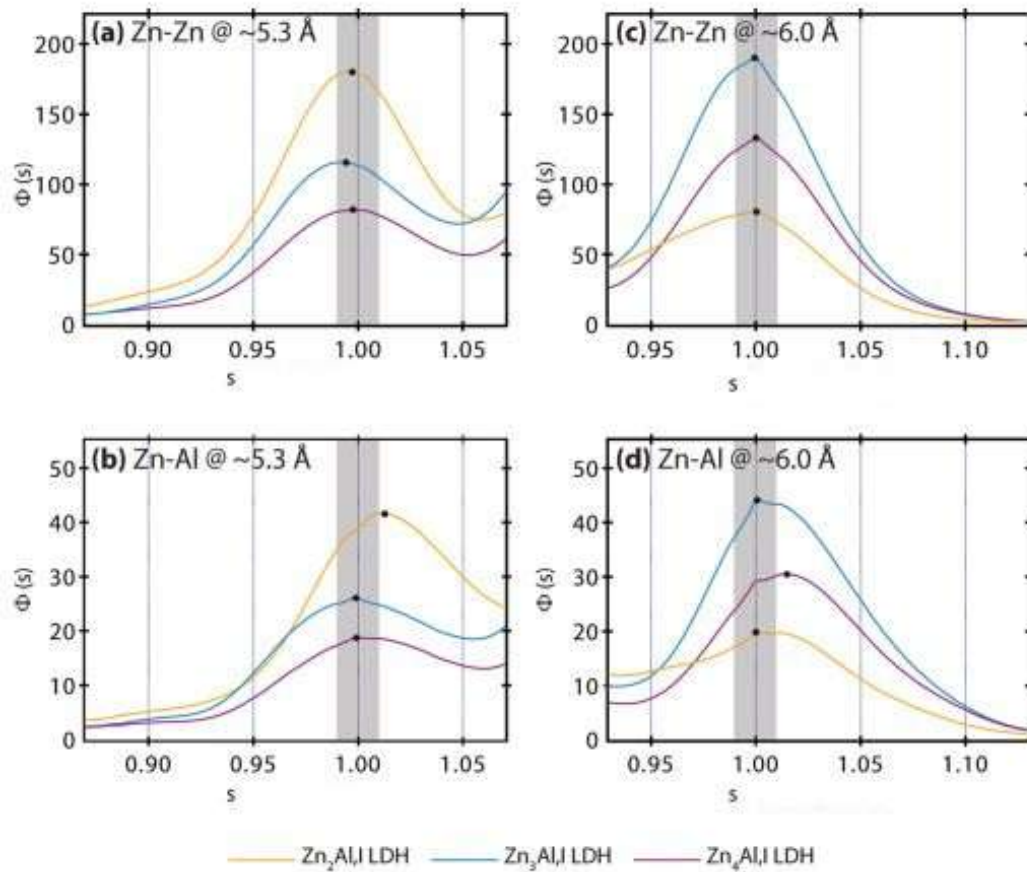


Рисунок 2.24 — Результат анализа вейвлет-карт с использованием FEF-Морле материнских вейвлетов для путей Zn–Zn при $r = 6.0 \text{ \AA}$, Zn–Al при $r = 6.0 \text{ \AA}$, Zn–Zn при $r = 5.2 \text{ \AA}$ и Zn–Al при $r = 5.2 \text{ \AA}$ [80].

этими двумя состояниями лежит в основе уже работающих оптических перезаписываемых носителей на основе PCM, таких как DVD или Blu-Ray Disc, где информация кодируется в виде аморфных меток на кристаллическом фоне. Контраст в сопротивлении может быть использован в следующем поколении электронных твердотельных запоминающих устройств на основе PCM (Phase-change memory), которые могут заменить ведущие современные технологии хранения данных, а именно FLASH и магнитные диски. Кроме того, эти материалы могут быть использованы в дисплеях или приложениях визуализации данных путем объединения как их оптических, так и электронных модулирующих свойств. Поэтому в настоящее время много внимания и усилий уделяется раскрытию сложного физического происхождения высокого контраста между двумя фазами, а также атомистического представления механизма переключения. Метод EXAFS сегодня стал важнейшим инструментом в изучении структуры новых материалов. Предложенный ранее метод Фурье анализа EXAFS спектров [19] позволяет определить расстояние от поглощающего атома

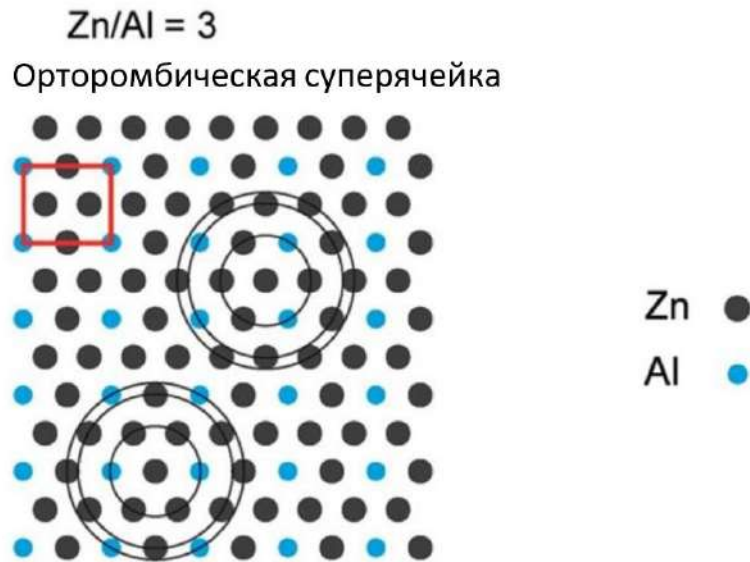


Рисунок 2.25 — Орторомбическая суперячейка [80].

до ближайшей координационной сферы с точностью до $0.01 \text{ \AA}$, а до двух-четырех последующих — с точностью $0.1 \text{ \AA}$. Предложенный в ходе исследований метод анализа EXAFS спектров с применением вейвлет-преобразования (WT) позволяет, сохранив точность, не только определить радиусы ближайших координационных сфер, но и идентифицировать элементный состав каждой сферы. Предложенный метод исключает этап подгонки параметров геометрической модели методом полного перебора, необходимый при использовании для анализа спектров метода Фурье. Это сокращает в десятки раз время проведения исследования атомной структуры новых материалов. Поскольку процедура синтеза нового материала выполняется путем плановой оптимизации параметров технологических процессов, проводимой с учетом анализа результатов синтеза на очередном этапе маршрута синтеза, то сокращение времени анализа дает пропорциональный выигрыш, позволяя перейти от метода проб и ошибок к рациональному проектированию процедуры синтеза.

В заключении хотелось бы отметить, что пока при измерении EXAFS спектров используются не сфокусированные рентгеновские пучки. Проблемой остается синхронизация перемещения положения образца и положения фокусного пятна рентгеновского пучка. Как только технология сканирующей EXAFS спектроскопии будет готова, следует ожидать скачка прогресса в создании микрорелектромеханических систем.

Глава 3. Методы определения профилей протонного и рентгеновского микропучков, используемых в сканирующих системах

Использование фокусирующих систем между источником и образцом в оптическом тракте сканирующего устройства позволяет локализовать исследуемый объем. Постоянная оптимизация источников протонов [81] и источников рентгеновского излучения [82], модификация конструкций фокусирующих систем [83] приводят к тому, что формы микрозондов не только уменьшаются в размерах, но и пространственно трансформируются под условия применения. В данном разделе описываются методы, предложенные автором для определения 2D формы протонных и рентгеновских микрозондов. Методы базируются на математической обработке флуоресцентных карт, сформированных при сканировании тестовых ортотропных структур протонными [30] и рентгеновскими [84] микрозондами. Задачи определения формы протонного микропучка и формы рентгеновского микропучка с использованием карт флуоресцентных сигналов рассматриваются в Разделах 3.1 и 3.2, соответственно. Учет информации о форме зонде позволяет повысить точность сканирующих диагностических методов, в которых зонд используется, помочь в оптимизации параметров систем фокусировки микропучков, помочь в оптимизации технологических процессов микроструктурирования, реализуемых с их применением .

3.1 Метод определения профиля протонного микропучка с использованием карты флуоресцентных сигналов

Карта флуоресцентных сигналов, используемая в предложенном методе, формируется при сканировании участка референсной структуры. Пример такой структуры приведен на рисунке 3.1. Для создания структуры UV литография использовалась для нанесения полос на термически окисленную монокристаллическую кремниевую пластину [85]. Профиль края приведен на рисунке [fig:struc]. Размер зерна пермаллоя (рис. 3.3) менее 0.1 мкм. Ширина полос пермаллоя – 4 микрона. Толщина полос – 0.5 мкм. Состав полос пермал-

лоя: 81%Ni, 19%Fe. Ниже описана последовательность шагов предложенного

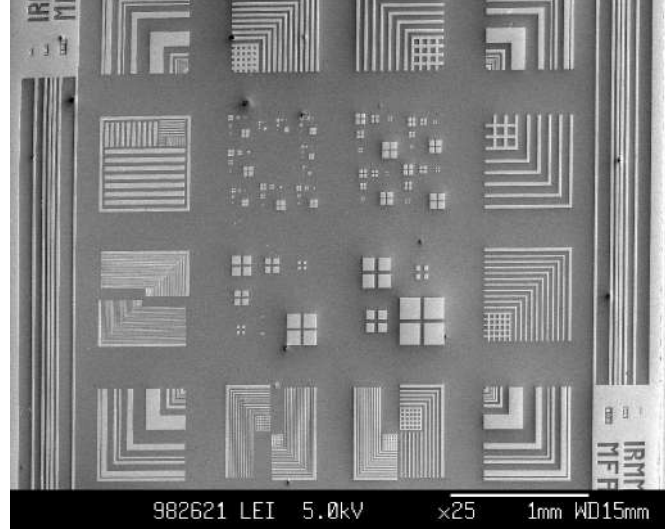


Рисунок 3.1 — Модульный чип референсной сертифицированной структуры.

метода.

1. Определим положение центра микрозонда на поверхности референсной структуры координатой вектора $\mathbf{x}$ и введем функцию объекта $O(x)$:

$$O(x_i) = N_z(x_i) \mathcal{E}_d \int_{E_p^0}^{E_p^f} \frac{\omega(Z, E_p) \sigma(Z, E_p, x_i) T(Z, E_p, x_i, Det_{E_p})}{S(Z, E_p, x_i)} dE_p, \quad (3.1)$$

2. Определим модель микрозонда функцией распределения числа протонов, т.е. функцией пространственной координаты:

$$N_p(x_i) = N_p^0 B(x_i), \quad (3.2)$$

где N_p^0 определяется свойствами источника протонов и фокусирующей системы. B принимает значения в интервале от 0 до 1.

3. С учетом введенных функций модель формирования сигнала примет вид [30]:

$$I_z(x_0) = N_p^0 \int O(x) B(x_0 - x) dx. \quad (3.3)$$

Для верификации модели были рассчитаны модельные сигналы. На рисунке 3.2 приведены измеренная и рассчитанная кривые. Модельный сигнал, рассчитанный с использованием параметров эксперимента, проведенного на микрозондовом комплексе в Оксфорде [86], представлен на рисунке 3.2 тонкой серой линией. Результаты измерения на микрозондовом комплексе представлены на рисунке 3.2 черной кривой. Описание сканируемого чипа (состав и

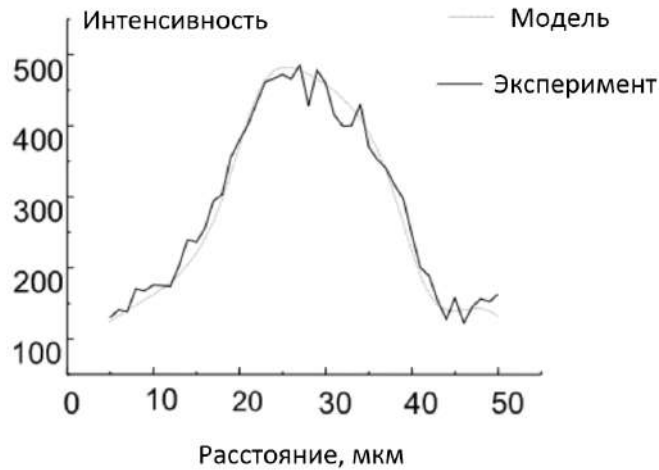


Рисунок 3.2 — Сравнение результатов моделирования с результатами измерения PIXE [30].

размеры ортотропного профиля) микроструктурированного эталонного материала дано в работе [87]. В конце 90-х годов прошлого столетия в сообществе научных групп, занимающихся развитием сканирующих методов, было принято решение о создании специализированных референсных (эталонных) структур для разных целей, и в частности для тестирования микрозондов [88].

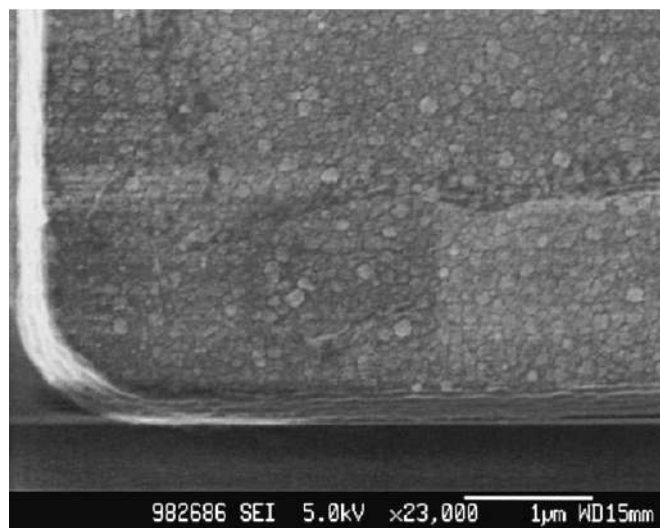


Рисунок 3.3 — Профиль края. Результат травления. Размер зерна пермаллоя < 0.1 мкм [85].

Форма использованного для сканирования протонного микрозонда энергии 3 МэВ при расчетах модельного сигнала была аппроксимирована функцией Гаусса. Параметры функции для расчетов были переданы участниками измерений в Окфорде. Визуальное сравнение двух кривых показывает, что выражение (3.12) с приемлемой точностью описывает процесс формирования флуоресцент-

ного сигнала и может быть использовано для решения задачи определения формы протонного микрозонда при сканировании эталонных микроструктур.

4. Каждое положение зонда на поверхности задает одно уравнение

$$I_z(x_0) = Sig(x_0) \quad (3.4)$$

Количество пикселей N измеренной флуоресцентной карты определяет число уравнений. Размер пиксела на карте равен шагу скарирования. В обратной задаче определения формы микрозонда неизвестной считается функция, описывающая пространственное распределение количества протонов на поверхности, все параметры зондируемой структуры, источника, детектора и используемой геометрии измерения считаются известными.

Тогда будем решать задачу в следующей постановке. Необходимо найти приближенное решение системы уравнений, каждое из которых определяется положением зонда (3.4), при наличии ошибки в правой части $\mathbf{S}$. Здесь $\mathbf{S}$ - вектор измеренных флуоресцентных сигналов. Введем сквозную нумерацию пикселей измеренной флуоресцентной карты (рис. 3.4). Запишем значения сигналов $Sig(x_i)$ в вектор с нумерацией компонент $i = 1, \dots, N$. Для вектора $\mathbf{I}_z$ (левая часть уравнений (3.4)) будем использовать ту же самую нумерацию компонент $i = 1, \dots, N$. Будем решать задачу условной оптимизации с ограничениями в виде равенств, т.е. искать минимум функционала:

$$\|\mathbf{Sig} - \mathbf{I}_z\|_2 \xrightarrow{\mathbf{B}} \min \quad (3.5)$$

при условии, что

$$S_i - I_z^i = 0, i = 1, \dots, N. \quad (3.6)$$

Здесь S_i - i -я компонента вектора измерений, $I_z^i = O * B^i$ - нормированные значения свертки функции описания объекта с функцией, описывающей распределение нормированных значений числа протонов, для положения центра микрозонда в i -ом пикселе карты. Необходимо восстановить функцию B описывающую 2D пространственное распределение нормированных значений числа протонов. Покроем восстанавливаемое пространство двумерной сеткой. Размер пиксела равен шагу сканирования. Полное число пикселей равно N . Введем вектор $\mathbf{B}$, компоненты которого - это значения восстанавливаемой функции $b_i, i = 1, \dots, N$. Для поиска условного минимума целевой функции (3.5) будем

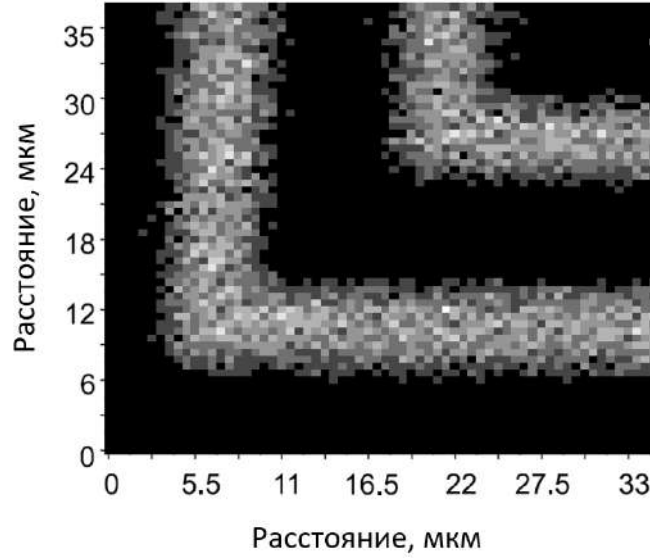


Рисунок 3.4 — Карта флуоресцентных сигналов Ni . Ширина полосы пермаллоя 4 мкм.

использовать метод множителей Лагранжа. Будем искать решение на множестве функций, для которых $0 \leq b_i \leq 1$, и удовлетворяющих условиям:

$$\begin{cases} \varphi_1(b_1, \dots, b_N) = O * B^1 - S_1 = 0, \\ \dots, \\ \varphi_N(b_1, \dots, b_N) = O * B^N - S_N = 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

Составим функцию Лагранжа:

$$L(b_1, \dots, b_N, \lambda_1, \dots, \lambda_N) = \Phi(b_1, \dots, b_N) + \sum_i \lambda_i \varphi_i(b_1, \dots, b_N). \quad (3.8)$$

Равенство частных производных нулю является необходимым условием экстремума функции. Запишем систему уравнений, решение которой позволяет определить компоненты вектор функции $\mathbf{B}$:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial b_1} = \frac{\delta \Phi}{\delta b_1} + \sum \lambda_i \frac{\delta \varphi_i}{\delta b_1} = 0, \\ \dots, \\ \frac{\partial L}{\partial b_N} = \frac{\delta \Phi}{\delta b_N} + \sum \lambda_i \frac{\delta \varphi_i}{\delta b_N} = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_1} = \varphi_1(b_1, \dots, b_N) = 0, \\ \dots \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_N} = \varphi_N(b_1, \dots, b_N) = 0. \end{cases} \quad (3.9)$$

Результат применения предложенного метода для обработки данных эксперимента, проведенного в институте референсных материалов и измерений

(The Institute for Reference Materials and Measurements (IRMM)), Гель, Бельгия) приведен на рисунке 3.5. Используемая карта флуоресцентных сигналов

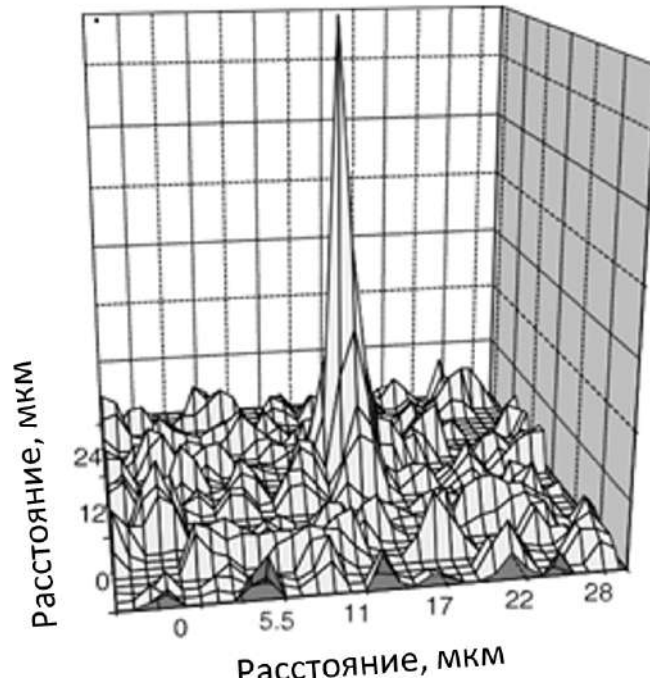


Рисунок 3.5 — Результат восстановления 2D профиля микрозонда.

Ni, полученная при сканировании участка микроструктурированного эталонного материала IRMM-301, произведенного в институте референсных материалов и измерений (The Institute for Reference Materials and Measurements (IRMM)), Гель, Бельгия) дана на рисунке 3.1. Габаритные размеры чипа составляют около 5×5 мм². Измерения проводились с использованием протонного микрозонда энергии 2 МэВ. Шаг сканирования по *X* – 0.55 мкм, по *Y* – 0.59 мкм. Чтобы продемонстрировать уровень шума, содержащегося в сигналах, на рисунке 3.6 сплошной линией представлен участок горизонтального сечения флуоресцентной карты *Ni* с рисунка 3.4. Функция, использованная в модели для описания геометрии вертикального края полоски пермаллоя, приведена штриховой линией.

Впервые метод определения формы протонных микрозондов (пространственного 2D распределения количества протонов на поверхности зондируемого образца) с использованием карты флуоресцентных сигналов от референсной структуры был предложен автором в работе [30]. В отличие от ранее предлагавшихся ножевых технологий он позволяет получать не линейную оценку размера, а реальное пространственное распределение протонов в фокальной плоскости. Это уточняет получаемые количественные оценки

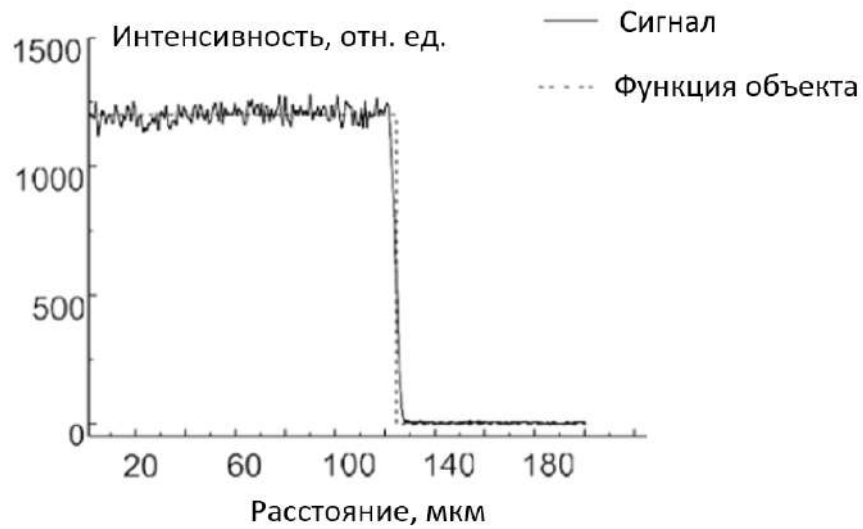


Рисунок 3.6 — Участок горизонтального сечения карты распределения никеля.

при использовании протонных микронзондов для анализа локального состава объектов и позволяет оптимизировать параметры тех технологий микроструктурирования, в которых микронзонды применяются.

3.2 Метод определения профиля рентгеновского микропучка с использованием карты флуоресцентных сигналов

Задача определения формы зонда актуальна и для рентгеновских микрозондов. Для оценки линейных размеров микрозондов традиционно

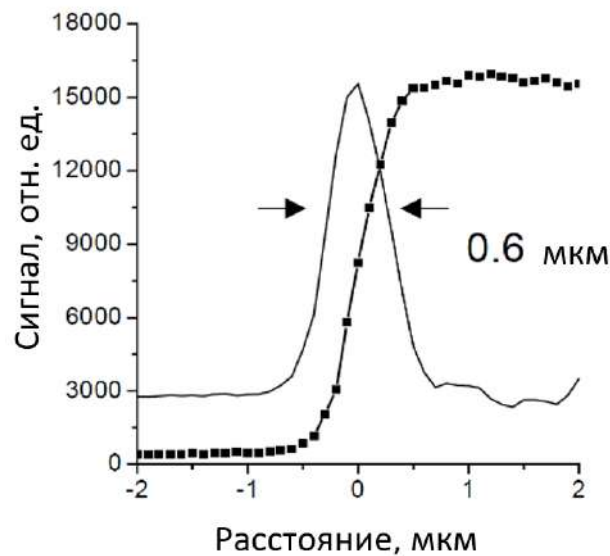


Рисунок 3.7 — Вертикальный скан. Флуоресцентный сигнал $Si_{k\alpha}$.

применяется ножевая технология. Она заключается в последовательном перекрытии фокального пятна ножом (тонкой металлической пластиной) в плоскости, перпендикулярной направлению распространения пучка. Регистрируемый флуоресцентный сигнал от ножа, как функцию положения ножа, можно интерпретировать как свертку функции, описывающей профиль пучка, с полубесконечной ступенчатой функцией. Первая производная от сигнала по координате сканирования даст линейный профиль пучка (3.7). В методе используются предположения о том, что флуоресцентный сигнал пропорционален интенсивности микрозонда, динамический диапазон детектора таков, что при каждом положении ножа детектор не достигает насыщения, влияние геометрических эффектов съемки во время сканирования отсутствует. Т.е. при смещении положения ножа пучок и детектор не меняют своего положения. Результаты исследования фокального пятна, формируемого интегральной линзовой системой из кремния с фокусным расстоянием 0.5 метра [89], проведенного на станции ID18 источника синхротронного излучения ESRF в Гренобле (Франция) представлены на рис. 3.7. Энергия фокусируемого пучка составляла

14 кэВ. Измерения проводились с шагом сканирования 0.1 мкм. Подгонка

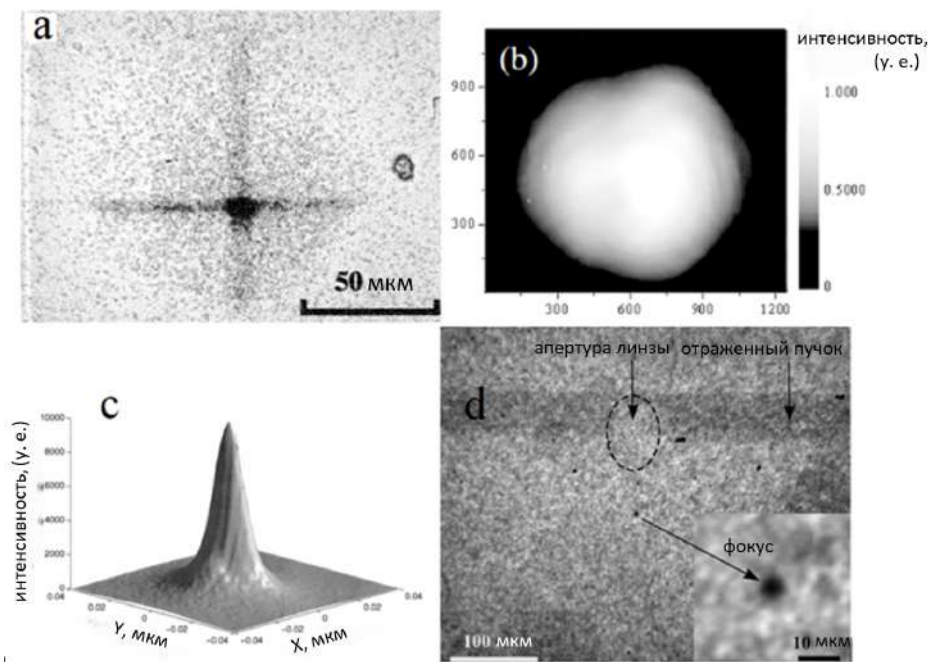


Рисунок 3.8 — Результаты двумерной фокусировки, полученные в разных научных группах. (a) [90], (b) [91], (c) [92], (d) [93]

функцией Гаусса позволила определить значение линейного размера, как значение полуширины на полувывсоте пика, которое составило 0.6 микрон. Сегодня метод применяется и в лабораторных условиях [94]. В работе представлены результаты исследования зависимости линейного размера рентгеновского пучка, сфокусированного поликапиллярной оптикой, от энергии излучения.

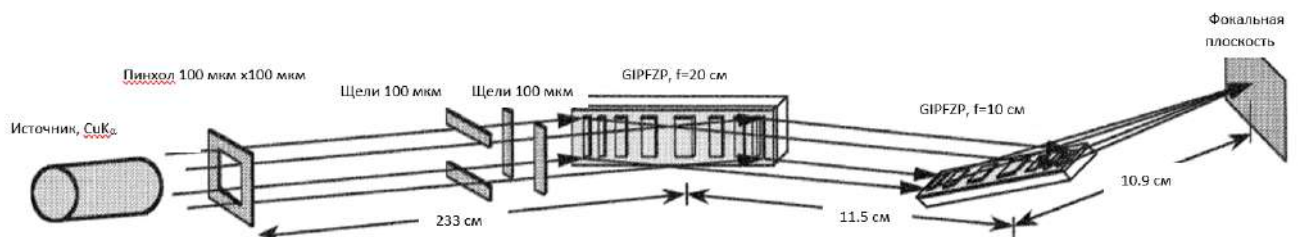


Рисунок 3.9 — Геометрия Киркпатрика-Байеза с двумя линейными оптическими элементами в схеме [90].

Размеры пучков составляли несколько десятков микрон. Данное оборудование готовится к использованию в космосе и проходило предполетный контроль. Чувствительности метода хватало, чтобы пронаблюдать зависимость линейного размера фокуса от энергии. Т.е. техника ножевого сканирования доказала свою устойчивую работоспособность и ее используют как скрининговую методику для оценки качества фокусирующих систем. Однако определение

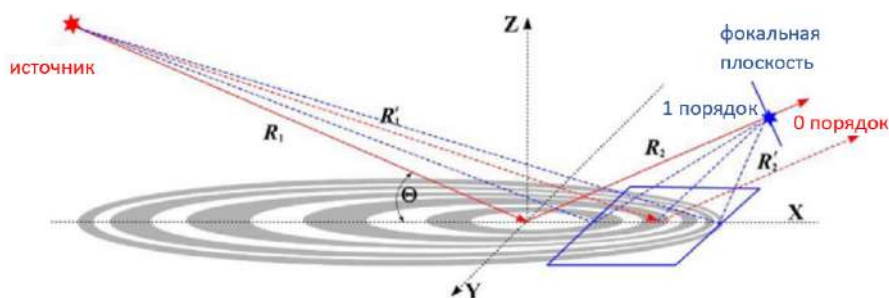


Рисунок 3.10 — Принципиальная схема формирования сфокусированного рентгеновского микрозонда с использованием внеосевой фазовой зонной пластинки Френеля со скользящим падением [93]

линейного размера становится недостаточным, если проводится полноценная двумерная фокусировка излучения. Существующие методы двумерной фоку-

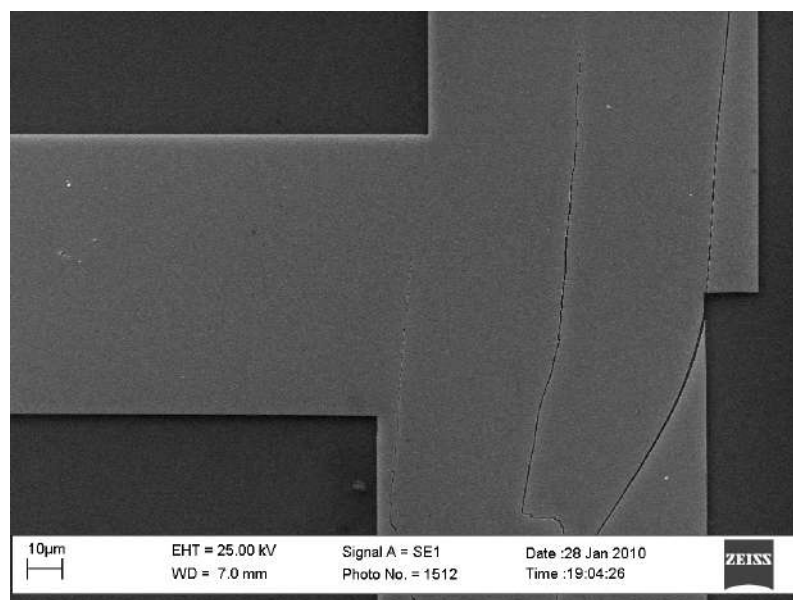


Рисунок 3.11 — Пример референсной структуры

сировки рентгеновского излучения позволяют получать фокальные пятна, размеры которых составляют уже доли микрон, но не известно какова реальная форма микрозонда. Публикации, в которых представлены результаты измерений с применением рентгеновских зондов субмикронных размеров ([95—98]) не содержат описания методик тестирования 2D формы рентгеновских зондов. Чтобы продемонстрировать многообразие распределений фотонов в фокальной плоскости, на рисунке 3.8 представлены экспериментальные результаты 4 научных групп. Результат фокусировки рентгеновского излучения лабораторного источника ($Cu_{k\alpha}$) в геометрии Киркпатрика-Байеза с двумя френелевскими зонными пластинками скользящего падения [90] приведен на рисунке 3.8а.

Принципиальная схема формирования сфокусированного рентгеновского микронзонда дана на рисунке 3.9. Результат двумерной субмикронной фокусировки монохроматического излучения 12.5 кэВ и использованием зеркал в схеме Киркпатрика – Байеза, дополненной волноводом [91], полученный на источнике синхротронного излучения в Гренобле (Франция), представлен на рисунке 3.8в. По осям отложены номера пикселей. На рисунке 3.8с приведены экспериментальные результаты по фокусировке рентгеновского излучения энергии 30 кэВ алюминиевой составной линзой. Эксперимент был проведен на источнике синхротронного излучения в Гренобле (Франция) [92]. На последнем рисунке 3.8d представлен результат фокусировки рентгеновского излучения лабораторного источника. Энергия излучения 9,7 кэВ. В схеме использована внеосевая фазовая зонная пластинка Френеля со скользящим падением (GIPFZP) (рис. 3.10), впервые предложенная и произведенная в ИПТМ РАН, [93].

Построить параметрическое описание распределения фотонов в фокальном пятне, для каждого из распределений, представленных на рисунке 3.8, легко не удастся. Чтобы восстановить пространственное распределение фотонов в фокальной плоскости необходимо разделять два случая. Первый случай, когда в распоряжении есть ортотропная референсная сертифицированная структура, подходящая для тестирования, и второй случай – такой структуры нет. Рассмотрим последовательно оба случая.

Первый случай. Пусть нам необходимо определить форму рентгеновского монохроматического микронзонда энергии E и в нашем распоряжении есть ортотропная референсная сертифицированная структура, способная сформировать флуоресцентный сигнал при латеральном сканировании. Т.е. контраст флуоресцентного сигнала от элементов структуры достаточен для математической обработки сигнала. Тогда можно воспользоваться методом, описанным в разделе 3.1, заменив функцию описания объекта. Для этого из модели формирования флуоресцентного сигнала выделить соответствующую функцию описания объекта:

$$O(t) = \int_{s_{min}}^{s_{max}} p_z(s^*, t) \exp - \left(\int_{s_{min}}^{s^*} \mu_0^E(t, s') ds' \right) \times \exp - \left(\int_{L(s^*, t, Det)} \mu_F(l) dl \right) ds^*. \quad (3.10)$$

Здесь s_{max} – толщина слоя, содержащего элемент, для которого будет строиться необходимая в методу флуоресцентная карта. Реальный профиль микронзонда

опишем функцией распределения числа квантов на поверхности образца, т.е. функцией пространственной координаты:

$$I(t) = I_0 B(t), \quad (3.11)$$

где I_0 определяется свойствами источника и фокусирующей системы, а B принимает значения от 0 до 1. Перепишем модель формирования сигнала с учетом введенных обозначений:

$$I_z(t_0) = I_0 \mathcal{E}_d \int O(t) B(t_0 - t) dt \quad (3.12)$$

и можно применять метод, описанный в предыдущем разделе.

Второй случай. Отсутствует ортотропная референсная сертифицированная структура с требуемыми свойствами. Но есть некоторая ортотропная структура на поверхности (референсный объект), способная формировать требуемый контраст [99]. Например, пластинка с нанесенным по некоторому шаблону слоем с ортотропными границами (рис. 3.11. В ходе диссертационных исследований для такого случая был предложен вычислительный метод, базирующийся на анализе рентгенофлуоресцентных карт, полученных в ходе сканирования референсного объекта [84]. Рентгеновский пучок падает на референсную структуру перпендикулярно поверхности. Проводятся 4 сканирования. Выбор ортотропных границ шаблона в предлагаемом подходе обусловлен требованием на вырожденность ядра в уравнении:

$$\mathbf{S} = \mathbf{O} * \mathbf{I}, \quad (3.13)$$

описывающем процесс формирования рентгенофлуоресцентного сигнала при зондировании объекта не бесконечно тонким пучком, а пучком, имеющим некоторую форму. Здесь $\mathbf{S}$ – измеряемый сигнал, $\mathbf{O}$ – функция описания объекта (‘3.10), $\mathbf{I}$ – функция, описывающая распределение фотонов в фокальной плоскости, $*$ – знак свертки. Интегральные уравнения с вырожденным ядром легко сводятся к системам алгебраических уравнений, имеющим решение даже при наличии высокого уровня шума. Покроем фокальную плоскость сеткой квадратных пикселей. Пиксел (i, j) – пиксел на пересечении i – ой строки и j – столбца. Размер пикселя сетки выбран равным шагу сканирования. Уголок референсной структуры вдвигается под пучок с заданным шагом сканирования. Шаг определяется из ожидаемого полного размера фокусного пятна (радиусом

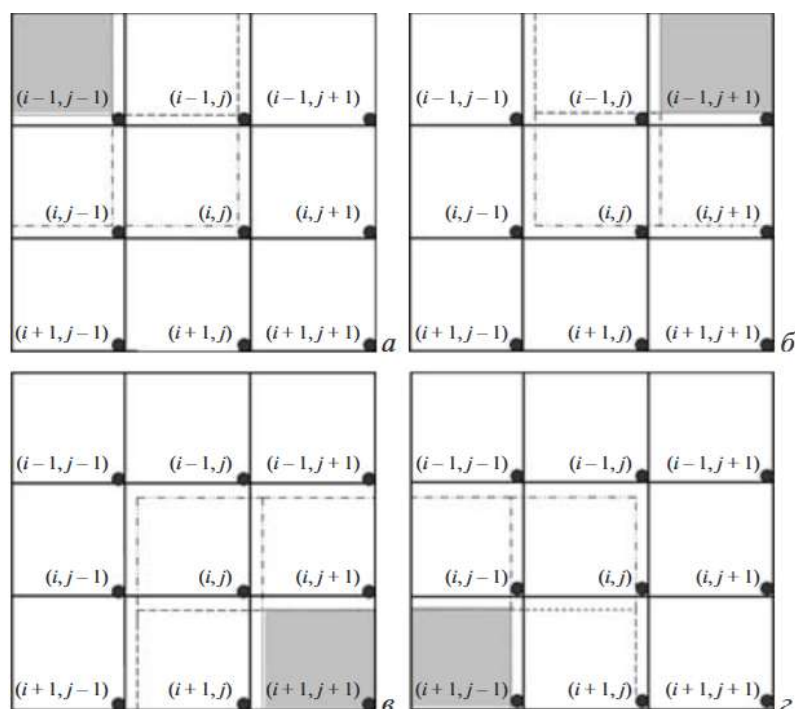


Рисунок 3.12 — Иллюстрация к 4 этапам процедуры сканирования фокальной плоскости референсным объектом

виртуальной окружности, покрывающей область пучка) и требуемым пространственным разрешением при дальнейшем использовании рентгеновского пучка. На рисунке 3.12 серыми пикселями отмечены начальные положения уголка

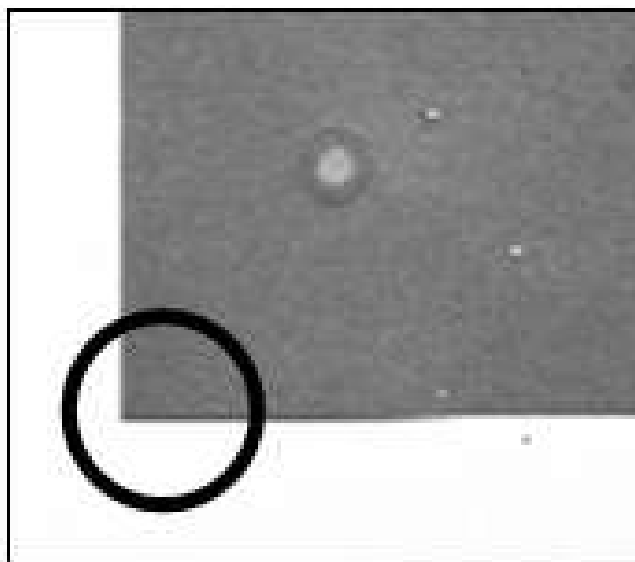


Рисунок 3.13 — Увеличенное изображение части референсного объекта. Положение, соответствующее 2-му этапу сканирования (рис. 3.12, б). Изображение получено со сканирующего электронного микроскопа, размер участка 150×150 мкм.

референсной структуры, соответствующие каждому из 4 необходимых сканирований, назовем их этапами полной процедуры сканирования. Т.е. первый этап сканирования начинается с верхнего левого положения уголка, второй - с верхнего правого, третий - с нижнего правого и последний четвертый - с нижнего левого уголка. По результатам сканирования формируются четыре флуоресцентные карты. Положение пиксела на флуоресцентной карте соответствует положению уголка референсной структуры в фокальной плоскости, значение пиксела каждой карты есть величина флуоресцентного сигнала, измеренного в момент, когда уголок референсной структуры находится в соответствующем пикселе. Индексы, введенные на рисунке 3.12, используются далее в выражениях, описывающих работу алгоритма расчета значений интенсивности рентгеновского пучка в пикселах сетки фокальной плоскости. Штриховыми линиями отмечены те положения референсного объекта, значения флуоресцентного сигнала в которых задействованы в определении значения $I(i,j)$. Положения приведены для каждого из этапов сканирования. Таких этапов, как уже упоминалось выше, 4. На рисунке 3.12а показано положение уголка

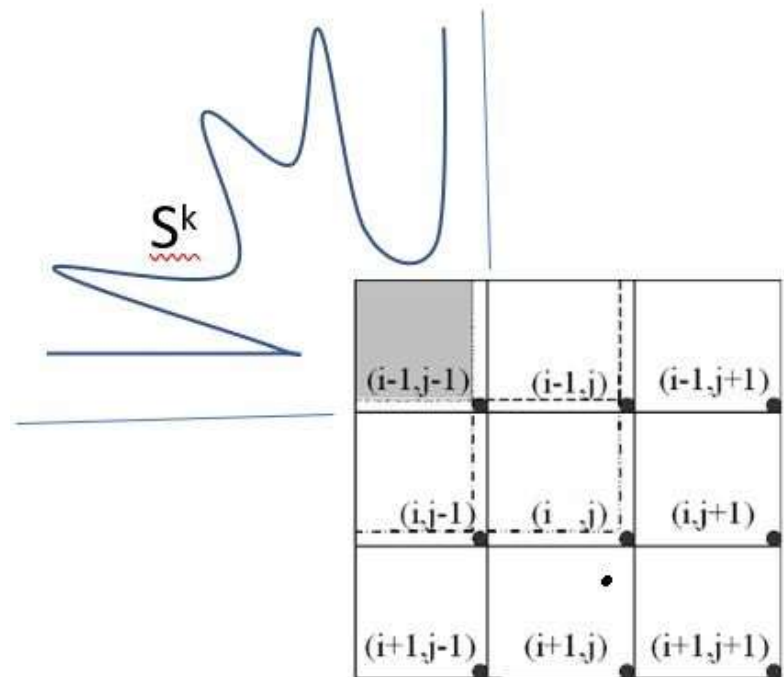


Рисунок 3.14 — Схема положения уголка референсной структуры в пикселе $(i-1), (j-1)$ для первого этапа сканирования.

в пикселе $(i-1), (j-1)$ в левом верхнем углу и задействованные в расчетах пиксели для первого этапа сканирования. На втором этапе сканирование проводится с правого верхнего угла. На рисунке 3.12б показаны задействованные

в расчетах пиксели. Далее последовательно идут этапы 3 и 4 для нижних углов, представленных серыми пикселями на нижних рисунках 3.12в и 3.12г, и также, соответственно, задействованные пиксели. Пусть верхний индекс, используемый в выражениях далее, указывает этап сканирования (от 1 до 4) в соответствие с рис. 3.12. Запишем выражение для сигнала S^1 (рис. 3.12а), отнормированного на произведение линейного коэффициента ослабления зондирующего излучения элементом – источником характеристического излучения на квантовый выход, при положении угла референсной структуры в пикселе $(i - 1, j - 1)$:

$$S^1(i - 1, j - 1) = S^k + I^1(i - 1, j - 1). \quad (3.14)$$

Здесь S^k это часть сигнала, формируемого при положении уголка референсной структуры в пикселе $(i - 1, j - 1)$ фокальной плоскости (рис. 3.14). Верхний индекс k подчеркивает, что это текущее, а не только начальное положение. Сместим положение уголка, согласно рисунку 3.15 и запишем выражение, которое

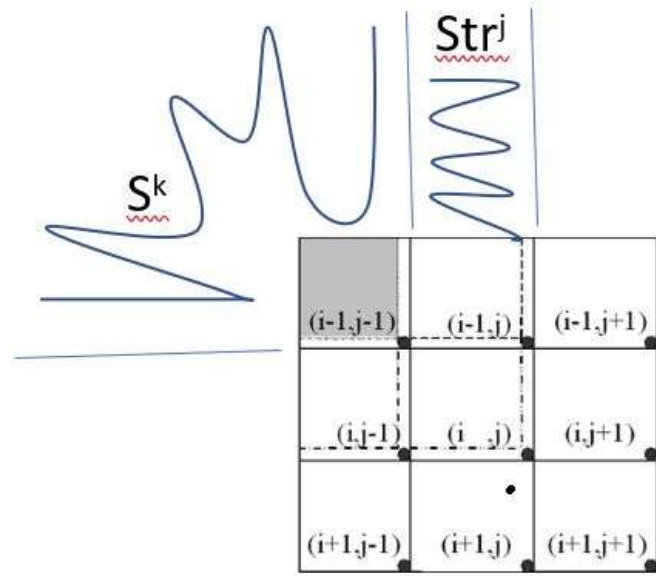


Рисунок 3.15 — Сместенное вдоль строки вправо положения уголка референсной структуры из положения $(i - 1, j - 1)$ для первого этапа сканирования.

связывает значение сигнала с положением референсной структуры:

$$S^1(i - 1, j) = S^k + I^1(i - 1, j - 1) + Str^j + I^1(i - 1, j). \quad (3.15)$$

Обратим внимание, что первые два слагаемых суммы повторяют значение сигнала $S^1(i - 1, j - 1)$ с точностью до шума. Рассмотрим сигнал, формируемый

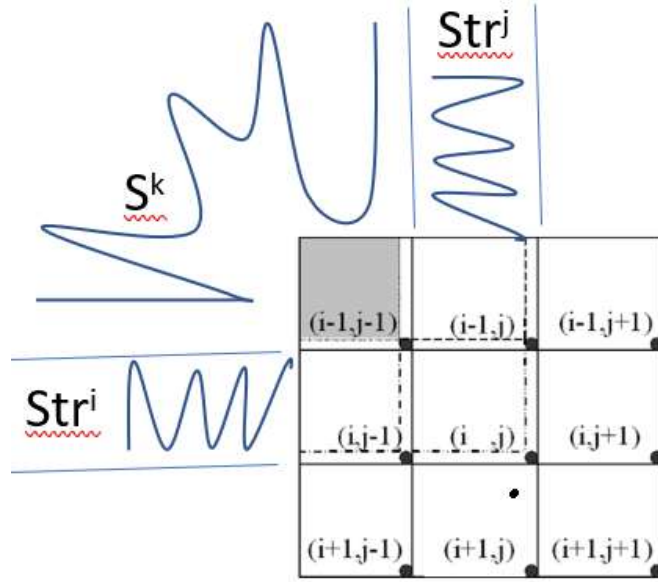


Рисунок 3.16 — Смещенное положения уголка референсной структуры вниз на одну строку из положения $(i - 1, j - 1)$ для первого этапа сканирования.

смещенным положением уголка на 1 строку вниз из положения $(i - 1, j - 1)$ (рис. 3.16):

$$S^1(i, j - 1) = S^k + I^1(i - 1, j - 1) + Str^i + I^1(i, j - 1). \quad (3.16)$$

Сместим положение уголка вправо и запишем выражение для расчета значения сигнала при положении уголка референсной структуры в пикселе (i, j) :

$$\begin{aligned} S^1(i, j) &= S^k + I^1(i - 1, j - 1) + Str^j + I^1(i - 1, j) + \\ &+ Str^i + I^1(i, j - 1) + I^1(i, j) = \\ &= S^1(i - 1, j) + (S^1(i, j - 1) - S^1(i - 1, j - 1)) + I^1(i, j). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Отсюда легко рассчитать значение интенсивности в пикселе (i, j) :

$$I^1(i, j) \approx S^1(i, j) - S^1(i - 1, j) - S^1(i, j - 1) + S^1(i - 1, j - 1). \quad (3.18)$$

Применив аналогичную последовательность действий на каждом из этапов, рассчитаем $I^2(i, j)$, $I^3(i, j)$, $I^4(i, j)$. После выполнения всех четырех этапов сканирования референсной структурой типа (рис. 3.13) фокальной плоскости и расчета значений $I^1(i, j)$, $I^2(i, j)$, $I^3(i, j)$, $I^4(i, j)$ для кадого из этапов сканирования, финальные значения интенсивности в каждом пикселе фокальной плоскости $I(i, j)$ рассчитываются следующим образом:

$$I(i, j) = (I^1(i, j) + I^2(i, j) + I^3(i, j) + I^4(i, j))/4. \quad (3.19)$$

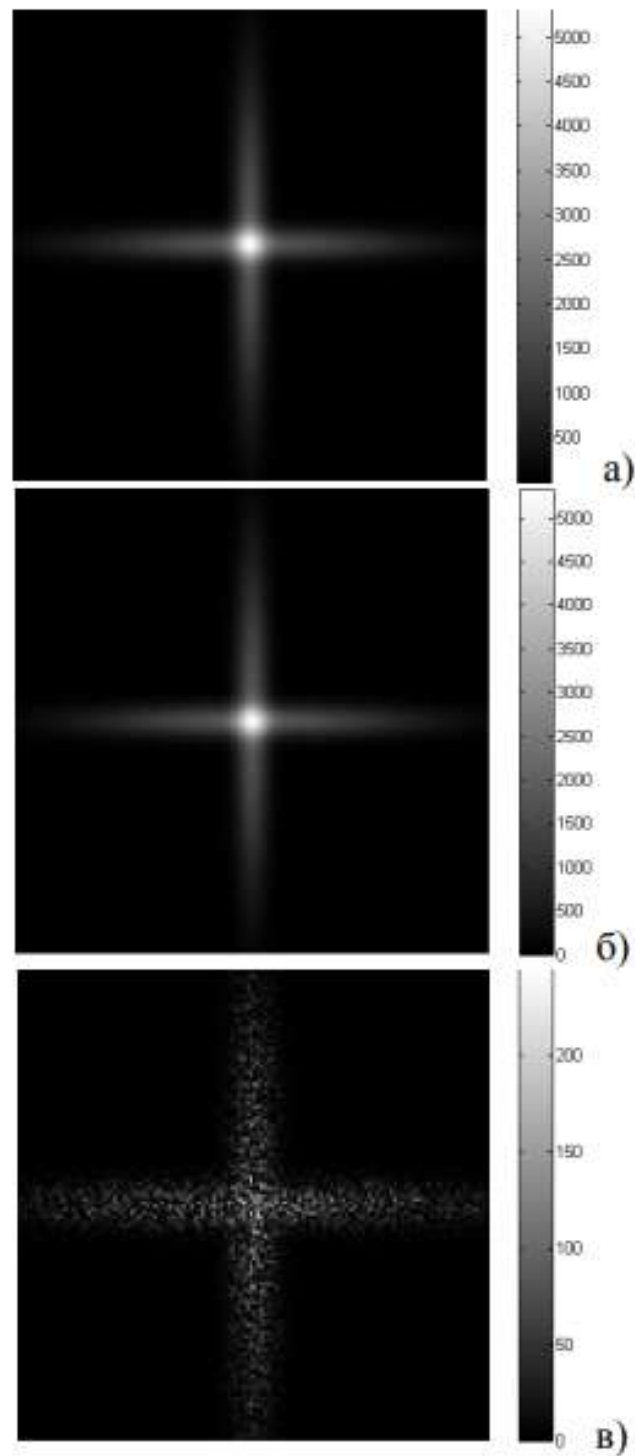


Рисунок 3.17 — (а): Функция распределения фотонов в фокальной плоскости. (б): Реализация модели с пуассоновским шумом. (в): Оценка шума по двум реализациям.

Предложенный метод был протестирован на модельных данных [84]. Зададим распределение фотонов функцией $I(i,j)$, представленной на рисунке 3.17а. Размер изображения 256×256 пикселей. Реализация модельного изображения с пуассоновским шумом $P(i,j) = \text{Poisson}(I(i,j))$ предстала на рисунке 3.17б.

На рисунке 3.17b приведена оценка шума, как разница двух реализаций. На рисунке 3.18 приведен результат расчета сигнала при реализации первого этапа сканирования. Для расчета использовано выражение 3.13. На верхнем рисун-

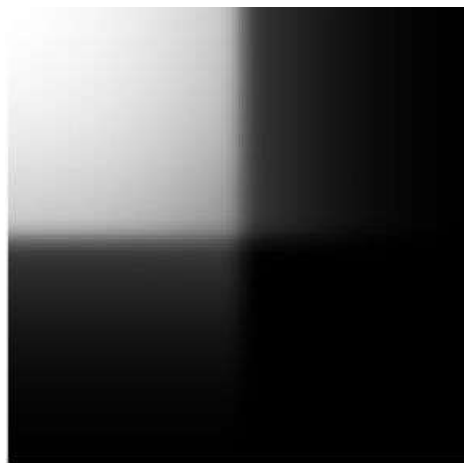


Рисунок 3.18 — Модельный сигнал для первого этапа сканирования.

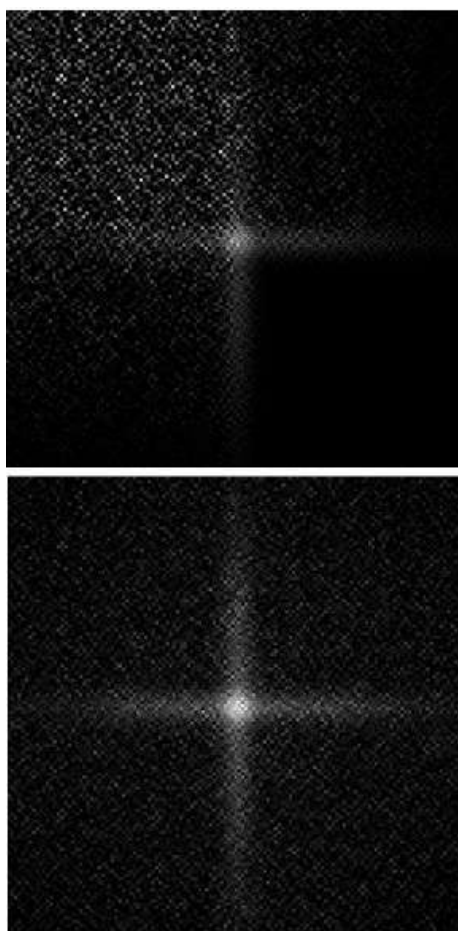


Рисунок 3.19 — Верхний рисунок: восстановление по результатам только первого этапа сканирования. Нижний рисунок: восстановление по результатам 4 этапов сканирования.

ке 3.19 приведено восстановленное распределение интенсивности в фокальной

плоскости при использовании результатов только первого этапа сканирования. Результат работы предложенного метода восстановления распределения интенсивности в фокальной плоскости по 4 модельным флуоресцентным картам представлен на нижнем рисунке 3.19.

3.3 Заключение

Использование фокусирующих систем между источником и образцом в оптическом тракте сканирующего устройства позволяет локализовать области исследуемых объемов. Предложенные в ходе диссертационного исследования и представленные в данной главе методы определения формы протонного и рентгеновского микрозондов позволяют проводить локализацию контролируемым образом. Если в начале текущего столетия размеры микрозондов составляли десятки микрон, то сегодня протонные пучки, используемые в сканирующих методах, фокусируются в единицы микрон, а размеры рентгеновских пучков уходят в субмикронную область. Зонды не только уменьшаются в размерах, но и пространственно трансформируются под условия применения. Применение методов характеристики формы микрозондов дает возможность оптимизировать системы их формирования, оптимизировать параметры технологических процессов микроструктурирования, проводимых с использованием микрозондов, а также применять микрозонды в качестве точных микрорезцов. Знание формы микрозонда позволяет повысить точность диагностических сканирующих методов, используемых для анализа чистоты поверхностей, для изучения локального состава поверхностей, пленок и внутренних областей изделий.

Глава 4. Рентгеновская томография. Алгебраический подход к томографической реконструкции в условиях низкой дозовой нагрузки

4.1 Томограф как аппаратно-программный комплекс. Задачи реконструктора

Рентгеновская томография - метод построения цифрового изображения объекта при зондировании объекта рентгеновским излучением с разных ракурсов. Как правило, цифровое изображение используется с целью изучения 3D внутренней локальной структуры физического объекта. Описания структуры объекта (модели объекта) различается в зависимости от типа регистрируемых сигналов. Если объект зондируется монохроматическим рентгеновским излучением и регистрируются рентгеновские проекции в схеме «на про-свет», то объект описывается пространственным распределением линейных коэффициентов ослабления рентгеновского излучения. Если зондирование полихроматическое, то результатом реконструкции является пространственное распределение величин, характеризующих способность каждого локального объема (воксела) ослаблять рентгеновский спектр. Это некоторые усредненные по спектру коэффициенты ослабления. В случае регистрации рентгено-флуоресцентных сигналов объект описывается пространственным распределением источников флуоресценции. Пространственное распределение коэффициентов ослабления или источников флуоресценции является решением обратной задачи, входными данными для которой является набор рентгеновских изображений объекта, снятых с разных ракурсов (томографических проекций) [100; 101].

Качество реконструируемого цифрового изображения зависит от способности объекта ослаблять рентгеновское излучение и условий съемки проекций. Поэтому для получения реконструированного изображения высокого качества следует рассматривать методы томографической реконструкции одновременно со свойствами томографируемого объекта и условиями съемки проекций. Начнем с ответа на вопрос: что же такое томограф? Томограф - это аппаратно-программный комплекс (АПК). Его аппаратная часть ответственна за организацию съемки томографических проекций (рентгенограмм) с раз-

ных ракурсов и передачу их в вычислительный комплекс. На программную часть ложится управление и контроль за съемкой и передачей проекций в вычислитель для выполнения реконструкции, расчет цифрового изображения объекта и анализ результатов реконструкции. С 1971 года, когда на рынке появился первый промышленный ЕМІ сканер, работы по оптимизации аппаратной части рентгеновских томографических комплексов не прекращались ни на один день. Постоянно совершенствуются источники рентгеновского излучения, регистрирующие устройства, предлагаются новые геометрические схемы и режимы регистрации проекций. Источники становятся стабильнее, ярче и т.п. Регистрирующие устройства становятся чувствительнее, размеры пикселей уменьшаются. Последнее приводит к увеличению объема данных, передаваемых в реконструктор. В схемах устанавливается несколько движущихся по разным траекториям источников, экспозиция становится контролируемой и т.д. С появлением технологии «томография под контролем реконструкции» [102] контроль и управление геометрией съемки (расчет текущего ракурса и времени экспозиции) опирается на результаты реконструкции по измерениям, завершенным к текущему моменту. Т.е. реконструкция выполняется несколько раз в течение одного измерения и должна выполняться в режиме реального времени. Строже становятся ограничения на время реконструкции.

Поскольку томографы предназначены для решения разнотипных задач (проведение научных исследований, выполнение дефектоскопии или метрологического контроля, изучение динамических процессов образования дефектов и т.п.) для реконструкции изображений из проекций используются разные группы методов. Методы различаются по быстродействию [103; 104], по требованиям к используемым вычислительным ресурсам [105], устойчивостью к наличию шума в проекциях [106] или к малому числу проекций и т.д. Работа над созданием методов томографической реконструкции началась более 60 лет назад, исследования в этой области продолжаются и сегодня. Непрерывная оптимизация аппаратной части требует новых методов реконструкции. При работе с томографическими проекциями, собранными в разных измерительных схемах, применяются различающиеся методы реконструкции. «В разных измерительных схемах» означает разные режимы зондирования (монохроматическое или полихроматическое рентгеновское излучение используется), тип регистрируемого сигнала (абсорбционный или флуоресцентный), установлена в тракт АПК оптика или нет (см. рис. 4.1). Организация съемки объекта под раз-

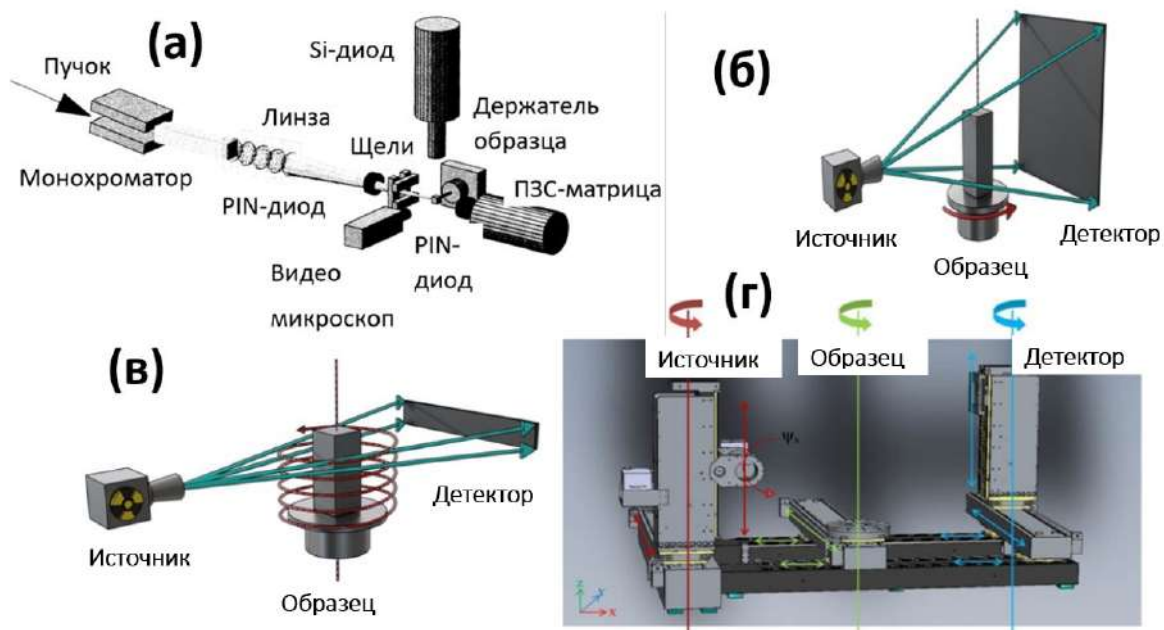


Рисунок 4.1 — Принципиальные схемы сбора проекций. Примеры. а) Использование микрозонда для сканирования. б) Круговая схема сканирования с коническим пучком. в) Спиральная схема сканирования с ограничением ширины поля вида. г) Все узлы измерительного тракта перемещаются и вращаются.

ными ракурсами (геометрия измерения) определяется траекторией движения пары излучатель-регистратор относительно неподвижного объекта или траекторией движения объекта относительно неподвижной пары источник-излучатель. При использовании микрозондов (рис. 4.1(а)), как правило, держатель образца имеет множество степеней свободы, перемещая, наклоняя и вращая закрепленный на нем объект. При круговой геометрии (рис. 4.1(б)) 1 вариант, когда пара источник-детектор вращается вокруг неподвижного образца. Второй вариант – пара источник-детектор остается неподвижной, вращается укрепленный на держателе образец. Аналогичные два способа реализуются в спиральной геометрии (рис. 4.1(в)). Сегодня реализованы оптические тракты, в которых не только держатель образца имеет много степеней свободы, но и узлы с источником и детектором (рис. 4.1(г)). Для зондирования образца могут использоваться параллельный, веерный или конусный пучки. Если томографические проекции собраны в трансмиссионной монохроматической моде (абсорбционный сигнал), то после выполнения коррекции измеренных проекций с учетом реального положения узлов томографа и коррекции на неравномерный отклик ячеек регистратора, задача томографической реконструкции сводится к задаче обращения преобразования Радона [42]. Решением данной задачи яв-

ляется пространственное распределение линейного коэффициента ослабления зондирующего рентгеновского излучения материалами зондируемого объекта. При использовании алгебраических методов реконструкции [107], коррекции на неидеальность узлов оптического тракта АПК могут уточняться в ходе текущей итерации. Если монохроматическое зондирование считается штатным на станциях источников синхротронного излучения, то в лабораторных условиях в силу невысокой яркости лабораторных источников рентгеновского излучения, использование монохроматоров в оптическом тракте томографа в десятки раз увеличивает время сбора проекций. В связи с этим монохроматический режим реализуется в основном на исследовательских лабораторных томографических установках. В промышленных томографических комплексах организовано зондирование конусными полихроматическими пучками.

Идеальная линейаризованная модель формирования сигнала 1.15 (преобразование Радона) лежит в основе классических методов реконструкции. Идеальные условия - сканирования монохроматическим параллельным пучком, количество проекционных углов не меньше числа пикселей линейки детектора, узла источник-держатель образца-детектор идеальны, юстировка АПК идеальна, нет ограничения на время вычислений и на требуемый для вычислений объем памяти, динамический диапазон сигнала согласован с динамическим диапазоном детектора. Использование классических методов для работы с проекциями, собранными не в идеальных условиях, приводит к возникновению искажений на реконструированном изображении. Классическими сегодня считаются методы свертки и обратного проецирования (FBP – Filtered Back Projection method [108], FDK – Feldkamp Davis Kress method [109]) и алгебраические методы без регуляризации (ART – Algebraic Reconstruction Technique [107], SIRT – Simultaneous Iterative Reconstruction Technique [110], SART – Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique [111]). Методы свертки и обратного проецирования считаются самыми быстрыми методами, но требуют большого числа равномерно распределенных проекций с высоким отношением сигнал-шум. Алгебраические методы, являясь итерационными, проигрывают по времени, но на требуют равномерного распределения углов и способны работать с неполными данными. В данной главе описаны предложенные в ходе проведенного исследования методы томографической реконструкции. Все они используют алгебраический подход к реконструкции. В алгебраическом подходе дискретизация выполняется на самом первом этапе решения, когда

интегральные уравнения заменяются на алгебраические. Далее для решения систем алгебраических уравнений применяются оптимизационные методы. Разделы идут в следующем порядке. Первым (раздел 4.2) представлен алгебраический метод реконструкции с использованием рентгено-флуоресцентных проекций. Он позволяет восстанавливать пространственное распределение источников флуоресценции без каких-либо ограничений на их распределение. Необходимым условием работы метода является требование к наличию контраста на томографических проекциях. Далее в разделе 4.3 описывается алгебраический метод реконструкции с регуляризацией текущего решения, позволяющий восстанавливать цифровое изображение объекта из сильно зашумленных абсорбционных проекций. Описанный в разделе 4.4 алгебраический метод реконструкции, учитывающий гетероскедастичность измеряемых сигналов, позволяет работать с абсорбционными проекциями, собираемыми в условиях нестационарной экспозиции. Такие условия съемки могут быть запланированы, чтобы уменьшить дозовую нагрузку на отдельные локальные объемы, или могут возникнуть случайно в связи со сбоем в работе оборудования. При полихроматическом зондировании результат реконструкции трудно количественно интерпретировать, поскольку восстанавливается пространственное распределение усредненного коэффициента ослабления. В разделе 4.5 представлен алгебраический метод, позволяющий восстанавливать распределения двух элементов при сканировании полихроматическим излучением. В условиях полихроматического зондирования проводить послойную реконструкцию с использованием стандартных алгоритмов не удастся. Если измерения проведены с высоким разрешением для большого объекта, то для выполнения реконструкции с высокой точностью требуется большой объем памяти. В разделе 4.6 представлен алгебраический метод реконструкции объема, позволяющий восстанавливать цифровое изображение объекта в условиях ограниченного объема памяти. Среди ограничений, предъявляемых к томографической реконструкции, немаловажным является ограничение на время выполнения реконструкции. Это ограничение бывает обусловлено объективными причинами, например, быстрая реконструкция - основное требование технологии «томография под контролем реконструкции». В разделе 4.7 проанализированы методы повышения быстройдействия при выполнении реконструкции и описан метод автоматического определения минимального размера значимой области

на томографических проекциях. Уменьшение размера проекций автоматически сокращает время вычислений.

4.2 Рентгеновская флуоресцентная томография. Алгебраический метод реконструкции

В задаче рентгено-флуоресцентной томографии объект описывается пространственным распределением источников флуоресценции. На вход программе реконструкции подаются рентгеновские флуоресцентные проекции. Первые измерения рентгеновских флуоресцентных проекций были выполнены на станции источника синхротронного излучения National Synchrotron Light Source (NSLS) в Брукхэйвене, США [43] в 1986 году. Принципиальная схема измерений представлена на рисунке 4.2. Коллимированный пучок рентгеновского излучения 7.2 кэВ был использован для зондирования тестового объекта, представленного на верхнем изображении рисунка 4.3. Это был кусочек натриево-боросиликатного стекла, содержащего следовые количества железа и титана. Энергодисперсионный детектор помещался перпендикулярно направлению зондирования. Размер пучка 250×1000 микрон. При сканировании пучок смещался параллельно направлению зондирования. Шаг сканирования был равен 250 мкм. После завершения сканирования с текущего ракурса объект поворачивался на заданный угол и сканирование начиналось вновь. Для томографической реконструкции распределения источников флуоресценции авторы использовали метод, предложенный Кормаком [112]. Значение сигнала аппроксимировалось суммой вкладов от всех источников флуоресценции, расположенных на пути зондирования. Для восстановления их распределения применялась операция обратного проецирования. На рис. 4.3 представлен полученный авторами результат. Размер изображения 50×50 пикселей. Реконструкция распределения элементов для каждого из элементов проводилась независимо. Ослаблением зондирующего и характеристического излучений в объекте пренебрегалось. Позднее в работе [113] авторы предложили в измерительную схему добавить детектор излучения «на просвет». Процедура реконструкция стала двухэтапной. На первом этапе выполнялась реконструкция распределения коэффициентов ослабления рентгеновского зонда с использованием абсорбционных проекций. На втором этапе выполнялась операция обратного проецирования. Значения вдоль отрезка при обратном проецировании распределялись неравномерно. Каждое значение взвешивалось на величину оптического пути, определяемую как экспоненциальное ослабление зонда.

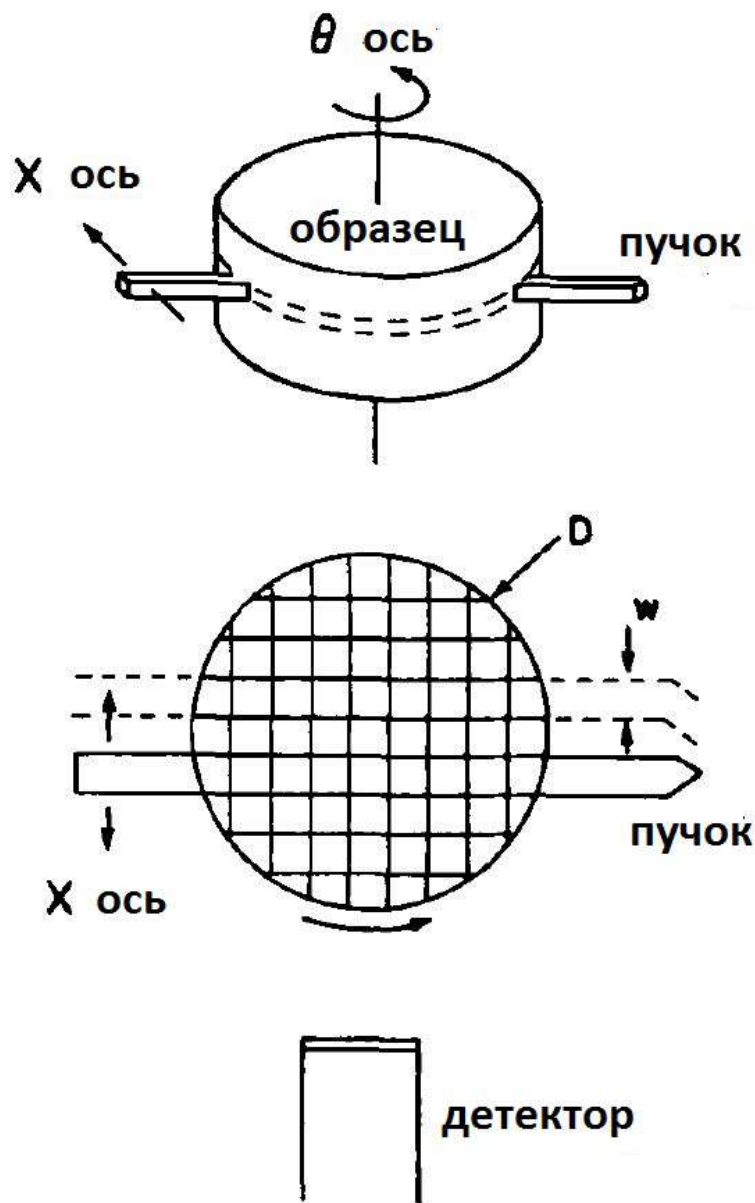


Рисунок 4.2 — Принципиальная схема первого эксперимента по рентгено-флуоресцентной томографии [43].

В диссертационном исследовании задача рентгенофлуоресцентной томографии, как реконструкции пространственного распределения источников флуоресценции решается в следующей постановке. Пусть на распределение элементов – источников флуоресценции не наложено ограничение, что в одной локальной области объема может находиться элемент одного типа. Покроем сеткой вокселей $N \times N \times N$ пространство восстанавливаемого объема. N – число положений микрозонда при текущем ракурсе (проекционном угле), N – число проекционных углов, N – число горизонтальных зондируемых слоев, используемых для построения 3D цифрового объекта. Размер вокселя, соот-

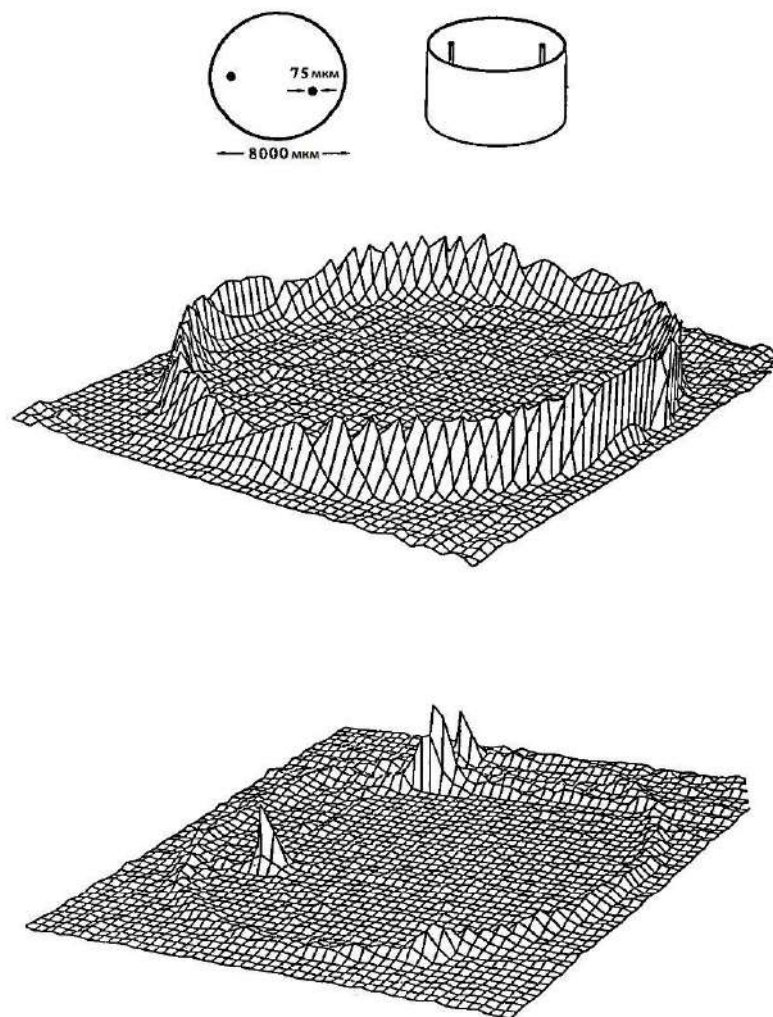


Рисунок 4.3 — Результаты эксперимента [43]. Модель объекта (верхний рисунок). Реконструкция распределения железа (центральный рисунок). Реконструкция распределения титана (нижний рисунок).

несенный с размером рентгеновского микрозонда, будем считать единичным объемом. Внутри вокселя источники флуоресценции распределены равномерно, т.е. каждый воксел описывается фракциями C_i флуоресцирующих элементов и $\sum_i C_i = 1$. Сканирование ведется сфокусированным пучком энергии E . Размер объекта таков, что при прохождении через объект рентгеновский пучок своего размера не меняет. Размер томографируемого объекта ограничим минимальной из длин ослабления наблюдаемых характеристических линий. При каждом положении рентгеновского микропучка засвечивается локальный объем, покрываемый микропучком. Пусть на поверхности образца распределение интенсивности в пучке равномерное, сечение пучка - круг, т.е. засвечивается цилиндрический локальный объем. При смещении положения пучка вдоль поверхности образца засвечивается следующий цилиндрический объем. Пусть

последовательно зондируемые локальные объемы не перекрываются. Если эксперимент построен так, что объемы перекрываются, то предобработка проекций перед подачей их в блок реконструкции должна включать дополнительно этап дифференцирования. Все источники флуоресценции, находящиеся в цилиндрическом засвечиваемом объеме, дают вклад в регистрируемый флуоресцентный сигнал. Телесный угол детектора с энергетическим разрешением определяет часть локального объема томографируемого объекта, которая участвует в ослаблении флуоресцентного сигнала на пути его выхода из объекта. Принципиальная схема сбора флуоресцентных проекций представлена на рисунке 4.4. Опишем процесс формирования рентгеновского флуоресцентного сигнала с уче-

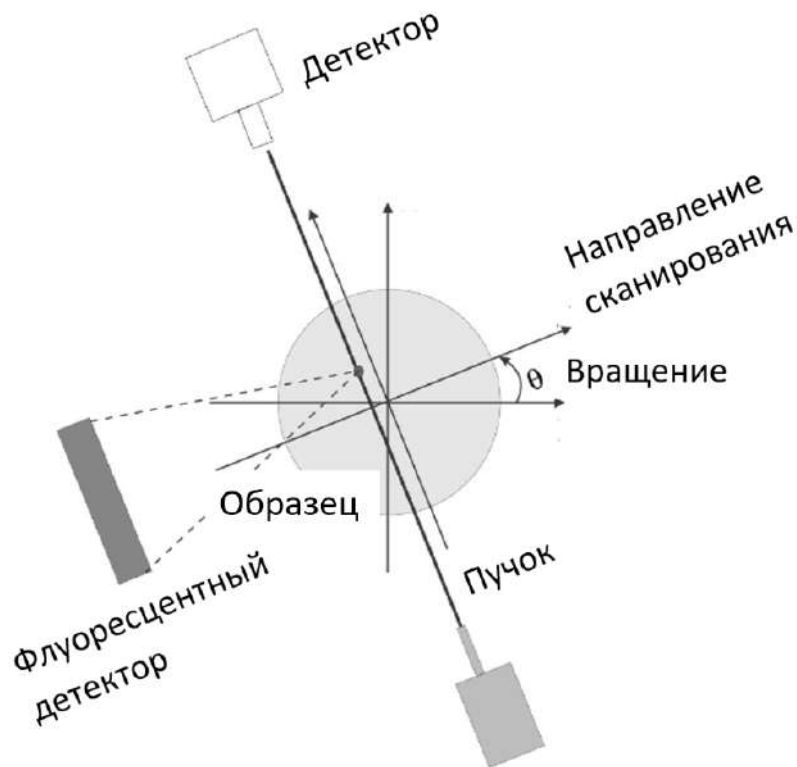


Рисунок 4.4 — Принципиальная схема измерений в методе рентгеновской флуоресцентной томографии [114].

том введенной дискретизации:

1. Падающий на поверхность объекта рентгеновский монохроматический сфокусированный микронд интенсивности $I_0(E)$ энергии E ослабляется на пути L_1 от точки входа в образец (точки на поверхности образца) до «анализируемой» точки объема (воксела) согласно закону Бугера-Ламберта-Бера $Tr(E) = \exp(-\sum_0^{L_1} \mu(E, l) \Delta_l)$. Здесь Δ_l - вклад l -го воксела.

2. Линейный коэффициент ослабления зондирующего рентгеновского излучения $\mu(E)$ есть линейная комбинация вкладов атомов всех типов i , входящих в состав воксела $\mu(E) = \sum_i C_i N_A \frac{\rho_i}{A_i} \sigma_i^{ab}(E)$, где N_A - число Авогадро, ρ_i - оценка плотности, A_i - атомная масса i -го элемента, $\sigma_i^{ab}(E)$ - сечение поглощения (absorption) [115] для конкретного типа атомов.
3. Генерируемое вокселом флуоресцентное излучение атомов типа i описывается как $N_A \frac{\rho_i}{A_i} \sigma_i^{em}(E)$, где σ_i^{em} - сечение эмиссии (emission) [115].
4. Интенсивность излучения j -ой характеристической линии атома i -го типа характеризуется значением квантового флуоресцентного выхода конкретной оболочки (или оболочек) ω_i^j . Вклад линий можно различить, если спектральное разрешение используемого детектора велико. Здесь в дальнейших рассуждениях будет участвовать только тип атомов и флуоресцентный выход будет иметь только один индекс, соответствующий типу атома.
5. Ослабление флуоресцентного излучения E_i на пути L_2 от места его генерации к детектору рассчитывается согласно закону Бугера-Ламберта-Бера $Fl(E_i) = \exp(-\sum_0^{L_2} \mu(E_i, l) \Delta l)$.
6. Значения линейного коэффициента ослабления $\mu(E_i)$, рассчитываются как линейная комбинация вкладов всех типов атомов (см. п.2) с использованием значений ρ_i , рассчитанных на предыдущей итерации и табличного значения $\sigma_i^{ab}(E^i)$.
7. Пространственное распределение линейного коэффициента ослабления $\mu(E)$ зондирующего пучка материалами, входящими в состав объекта, рассчитывается до начала итерационного процесса реконструкции распределения элементов.

Наличия коллимирующих систем для сбора флуоресценции [116] не предусматривается. Пусть положение рентгеновского микрозонда на поверхности объекта, повернутого вокруг оси вращения на угол Θ , задается координатой t (translation, рис. 4.4). Пусть индекс k определяет текущий воксел на отрезке, соединяющем точку входа микрозонда в образец и точку выхода микрозонда из образца. Каждый воксел на пути зондирования может стать (или не стать) источником i -го сигнала (i -ой компоненты флуоресцентного спектра). Источник флуоресценции светит в телесный угол 4π . Для учета излучения из единицы телесного угла введено деление на 4π . Величину рожденного в цилиндре, огра-

ниченном рентгеновском микронзондом, и ослабленного на пути к детектору характеристического излучения i -го элемента запишем в виде:

$$I_i(\Theta, t) = \sum_{\Theta, t: k} p_i^k(E) Tr^k Fl^k(E_i) \Delta_k, \quad (4.1)$$

где

$$p_i(E) = I_0 \frac{1}{4\pi} N_A \frac{\rho_i}{A_i} \sigma_i^{em}(E), \quad (4.2)$$

описывает источник сигнала,

$$Fl^k(E_i) = \sum_{\Theta, t: \gamma} \sum_{\Theta, t: l} Fl_l^k(E_i) \Delta_l \Delta_\gamma, \quad (4.3)$$

характеризует ослабление сгенерированной флуоресценции на пути к детектору, Δ_k - пересечение зондирующего пучка с текущим вокселем, шаг дискретизации Δ_γ определяется размером входного окна детектора и расстоянием объект-детектор, дискретизация при суммировании вдоль направления на детектор Δ_l выполняется по аналогии с суммированием вдоль направления зондирования. Иллюстрация учета телесного угла в модели формирования сигнала представлена на рисунке 4.5.

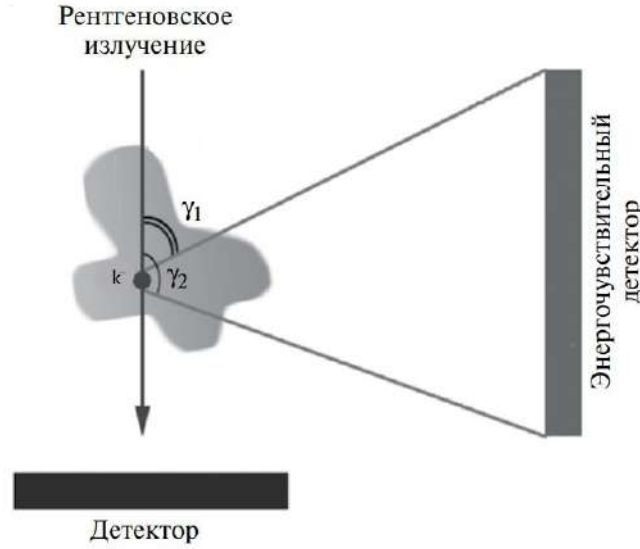


Рисунок 4.5 — Схема регистрации флуоресцентных квантов.

Пусть энергия используемого микронзонда превышает энергии характеристических линий всех элементов, входящих в состав зондируемого материала. Число неизвестных в задаче рентгеновской флуоресцентной томографии увеличивается по сравнению с задачей рентгеновской томографии, поскольку фракции элементов в каждом единичном объеме могут быть различны и каждый элемент при достаточной величине зондирующего излучения генерирует

флуоресцентные кванты. Запишем минимизируемый функционал [117] для всех измеренных интервалов спектра характеристического излучения, положений микрозонда для всех проекционных углов:

$$\sum_i \sum_{\Theta} \sum_t (I_i^{exp}(\Theta, t) - I_i(\Theta, t))^2 \longrightarrow \min, \quad (4.4)$$

где $N \times N$ – общее число положений микрозонда в ракурсе, умноженное на число проекционных углов, M – общее число измеренных энергетических интервалов характеристического излучения. В данном методе возможно выполнить послойную реконструкцию, поскольку толщина слоя определяется линейным размером микрозонда. Для решения поставленной оптимизационной задачи воспользуемся методом градиентного спуска с постоянным шагом λ (Nocedal, Wright, 1999). Алгоритм реконструкции стартует с начального предположения о распределениях элементов, сделанного на основе результата реконструкции без коррекции на поглощение [43]. Одна итерация алгоритма завершается после того, как коррекция пространственного распределения фракций выполнена для всех проекционных углов и положений микрозонда [118].

Исследование свойств предложенного метода реконструкции проводилось на модельных и на экспериментальных данных. Моделирование было выполнено с использованием программного обеспечения [119; 120]. Поскольку условия модельного эксперимента, включая геометрию съемки и состав образца известны, производительность алгоритма реконструкции оценивалась количественно. На рисунке 4.6 представлено описание тестового объекта. 4 локальные области разного состава включены в объект. Сигналы рассчитаны для энергии рентгеновского излучения 20 кэВ. Размер пучка 2×2 микрон. В модельном эксперименте детектор, окно которого имело диаметр 2.4 мм, был помещен под углом 90° к падающему на образец излучению на расстоянии 1.6 см от образца. Расчет проведен для 120 проекционных углов. Угловой шаг 3° . Расчеты проводились для 80 положений микрозонда. Шаг сканирования 2 микрона. Интенсивность зондирующего пучка составляет 10^{10} фотонов/сек. Время измерения для каждого положения микрозонда 1 секунда. На рисунке 4.7 приведены карты распределения фракций железа и кальция, выполненные тремя разными методами реконструкции.

На рис. 4.7a и 4.7d приведены результаты реконструкции по рентгеновским флуоресцентным проекциям методом свертки и обратной проекции, т.е. без учета процессов поглощения. Неучет поглощения приводит к заниженным

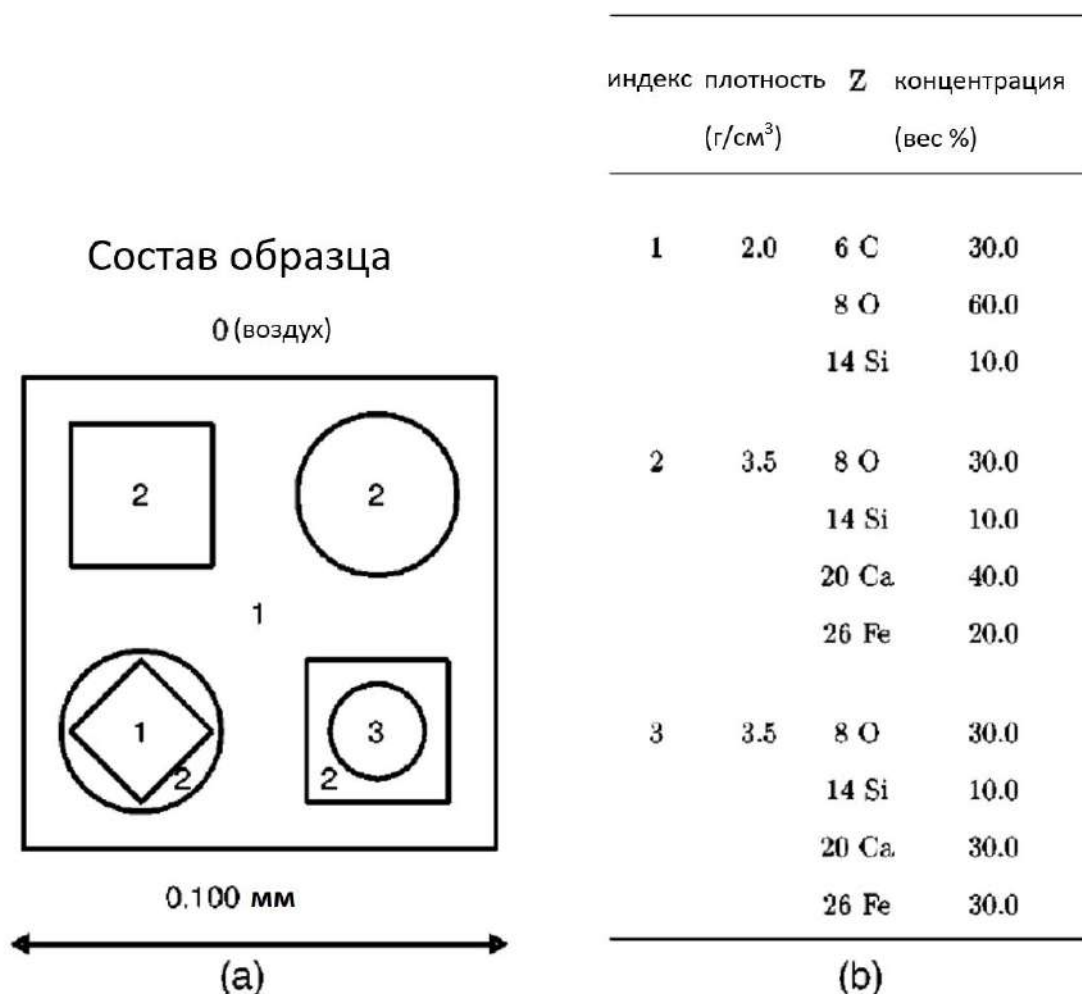


Рисунок 4.6 — Форма и химический состав образца, использованного для проведения модельных расчетов.

значениям в центральной части изображения. В частности, из-за разницы энергий характеристических линий, для кальция этот эффект выражен сильнее, чем для железа. На рис. 4.7b и 4.7e поглощение характеристических линий учитывалось, согласно аппроксимации E^{-3} [121]:

$$\frac{\mu(E_i)}{\mu(E)} = \left(\frac{E}{E_i}\right)^3. \quad (4.5)$$

Необходимо отметить, что коррекция с учетом E^{-3} дает изображения более низкой точности, чем восстановленные без коррекции. Это можно объяснить, обратившись к рисунку 4.8. Чтобы оценить точность реконструкции распределения железа и кальция, следует оценить значения коэффициента поглощения при соответствующих энергиях флуоресцентных линий $E_{Fe,K\alpha} = 6.4$ кэВ и $E_{Ca,K\alpha} = 3.69$ кэВ. Большое расхождение между оценкой с использованием аппроксимации E^{-3} (штрихпунктирная линия на рис. 4.8) и теоретическим

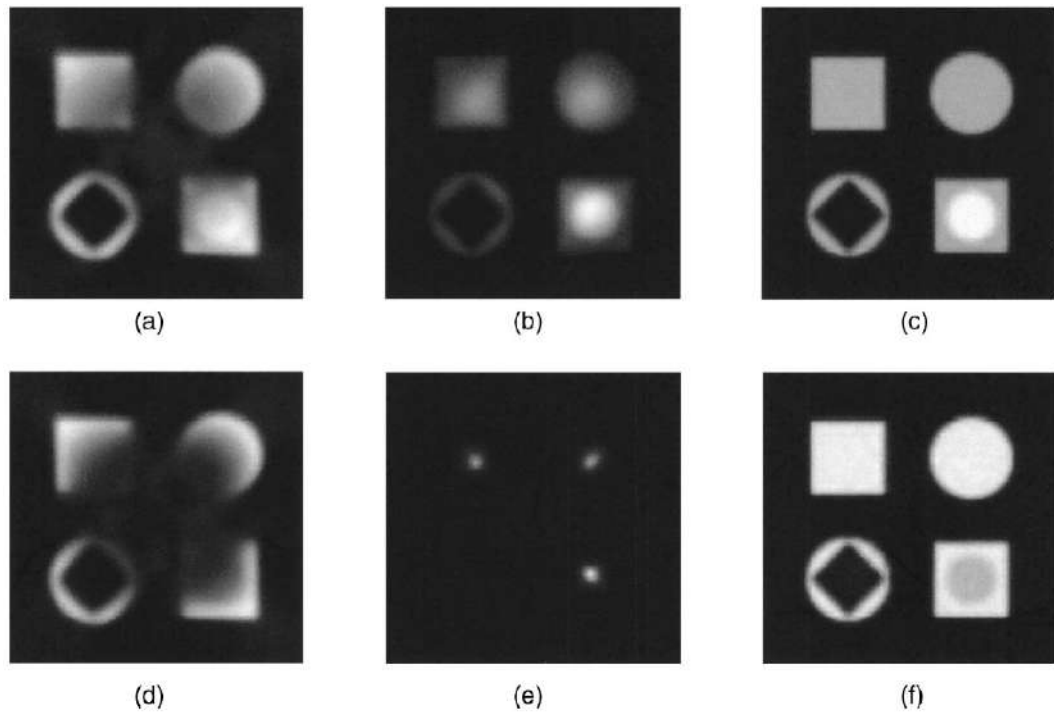


Рисунок 4.7 — Реконструкция распределения железа и кальция в моделируемом образце. (а) Распределение железа без поправок на поглощение. (б) Распределение железа с учетом поглощения (аппроксимация E^{-3}). (с) Распределение железа предложенным методом. (д) Распределение кальция без поправок на поглощение. (е) Распределение кальция с учетом поглощения (аппроксимация E^{-3}) (ф) Распределение кальция предложенным методом.

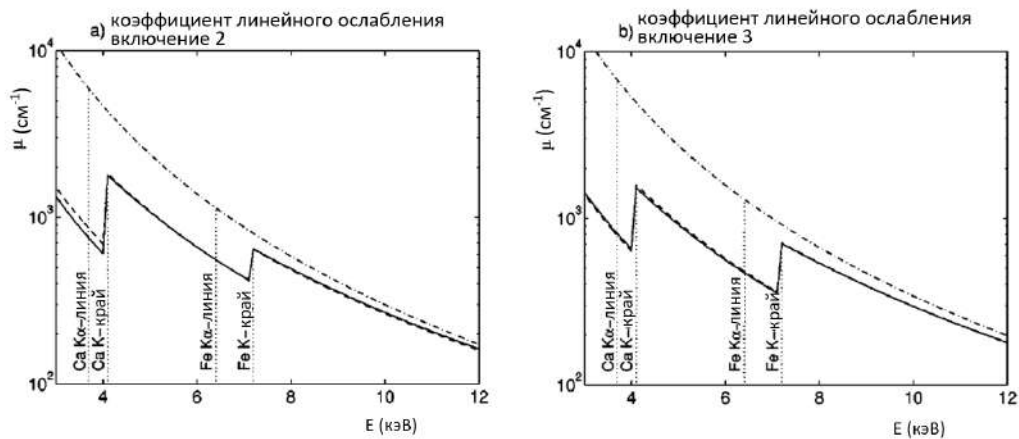


Рисунок 4.8 — Оценка линейных коэффициентов поглощения. Аппроксимация E^{-3} (штрихпунктирная линия), с использованием предложенного метода (пунктирная линия) и теоретические значения (сплошная линия): (а) усреднение по включению 2; (б) усреднение по включению 3 (рис. 4.6).

значением (сплошная линия на рис. 4.8) обусловлено тем, что энергетический интервал включает края поглощения. В случае железа интервал включает

край поглощения железа ($E_{Fe,K-edge} = 7.11$ КэВ), поэтому значение $\mu(E_{Fe,Ka})$ завышено. Неверная оценка поглощения приводит к неверной оценке реконструированных значений фракций во внутренних областях фигур, которые ярче, чем границы (рис. 4.7b). Этот эффект более выражен на реконструкции распределения кальция (рис. 4.7e), где визуализировались только центры фигур. Для кальция энергетический интервал включает край поглощения железа, и край поглощения самого кальция ($E_{Ca,K-edge} = 4.04$ КэВ). Реконструкции рис. 4.7c и 4.7f были получены с использованием предложенного метода. 8 итераций были рассчитаны для каждого элемента. Реконструированные и теоретические значения для железа во включении 2 $\rho_{Fe}^{rec,2} = 0.69$ г/см³, $\rho_{Fe}^{Ph,2} = 0.70$ г/см³ и во включении 3 $\rho_{Fe}^{rec,3} = 1.038$ г/см³, $\rho_{Fe}^{Ph,3} = 1.050$ г/см³ отличаются на 1.4% и 1.1%, соответственно. Для кальция во включении 2 реконструированные и теоретические значения $\rho_{Ca}^{rec,2} = 1.34$ г/см³, $\rho_{Ca}^{Ph,2} = 1.40$ г/см³ и во включении 3 $\rho_{Ca}^{rec,3} = 1.07$ г/см³, $\rho_{Ca}^{Ph,3} = 1.05$ г/см³ отличаются на 4% и 2% во включении 2 и включении 3, соответственно.

Томографический эксперимент с тестовым образцом [122] выполнялся на линии μ FID22 источника синхротронного излучения ESRF в Гренобле. Тестовый образец – кварцевый капилляр диаметром около 160 мкм и толщиной стенок 10 мкм, заполненный кварцевыми зернами (диаметром ≤ 10 мкм), пропитанными 0,1-1 % солевыми растворами K, Fe, Cu, As и Y , был установлен в держатель образца. Образец сканировался монохроматическим пучком 20 кэВ. В качестве фокусирующего элемента был использован набор из 120 алюминиевых параболических линз [123]. Интенсивность микрозонда, используемого в эксперименте, 9×10^8 фотонов/сек. Размер фокусного пятна 1×7 мкм². PIN-диод располагался перед образцом для контроля интенсивности сфокусированного излучения. Si дрейфовый диод был установлен в вертикальной плоскости под углом 90° по отношению к падающему излучению с целью минимизации вклада от рассеяния. Образец сканировался с шагом 1.2 мкм. После завершения сканирования в одной плоскости образец поворачивался на угол приблизительно $1,58^\circ$ и сканирование начиналось сначала. Время экспозиции составляло 1 секунда.

На рисунке 4.9 приведен результат томографической реконструкции по проекциям в схеме «на просвет». Томография «на просвет» не позволяет построить оценки пространственного распределения включений, поскольку восстанавливаемые значения линейного коэффициента ослабления рентгеновского

излучения представляют собой линейные комбинации вкладов каждого элемента, входящего в состав поглотителя. Весовые коэффициенты линейной комбинации пропорциональны фракциям компонент.

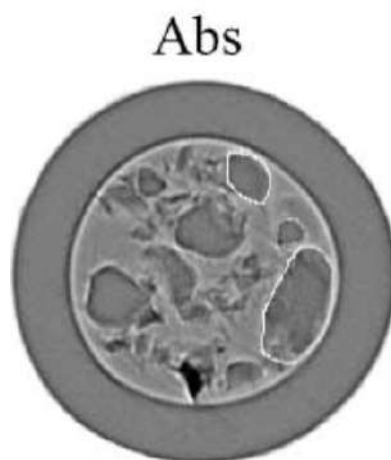


Рисунок 4.9 — Горизонтальное сечение восстановленного цифрового 3D изображения тестового капилляра.

Результат реконструкции карт распределения элементов, выполненной алгебраическим методом, представлен на рисунке 4.10.



Рисунок 4.10 — Карты пространственного распределения элементов в тестовом капилляре. Горизонтальные сечения цифрового 3D изображения.

В ходе второго эксперимента исследовалось микрофлюидное включение кристалла кварца [124]. Кристалл был синтезирован при высокой температуре и давлении (900°C и 0.7 ГПа). Предложенный метод реконструкции был использован для восстановления карт распределения фракций железа, меди, цинка и золота (рис. 4.11) во включении. Одиночное флюидное включение было изолировано в кварцевом параллелепипеде, отполированном со всех сторон. Размер параллелепипеда составил несколько сотен микрон (рис. 4.12).

Эксперимент проводился на линии μ FID22 источника синхротронного излучения ESRF в Гренобле. Кварцевый чип с помощью микроманипулятора был закреплен на кончике кварцевого капилляра и размещен на подложке высокоточного XYZ шагового двигателя. Рентгеновский пучок энергии 15 кэВ

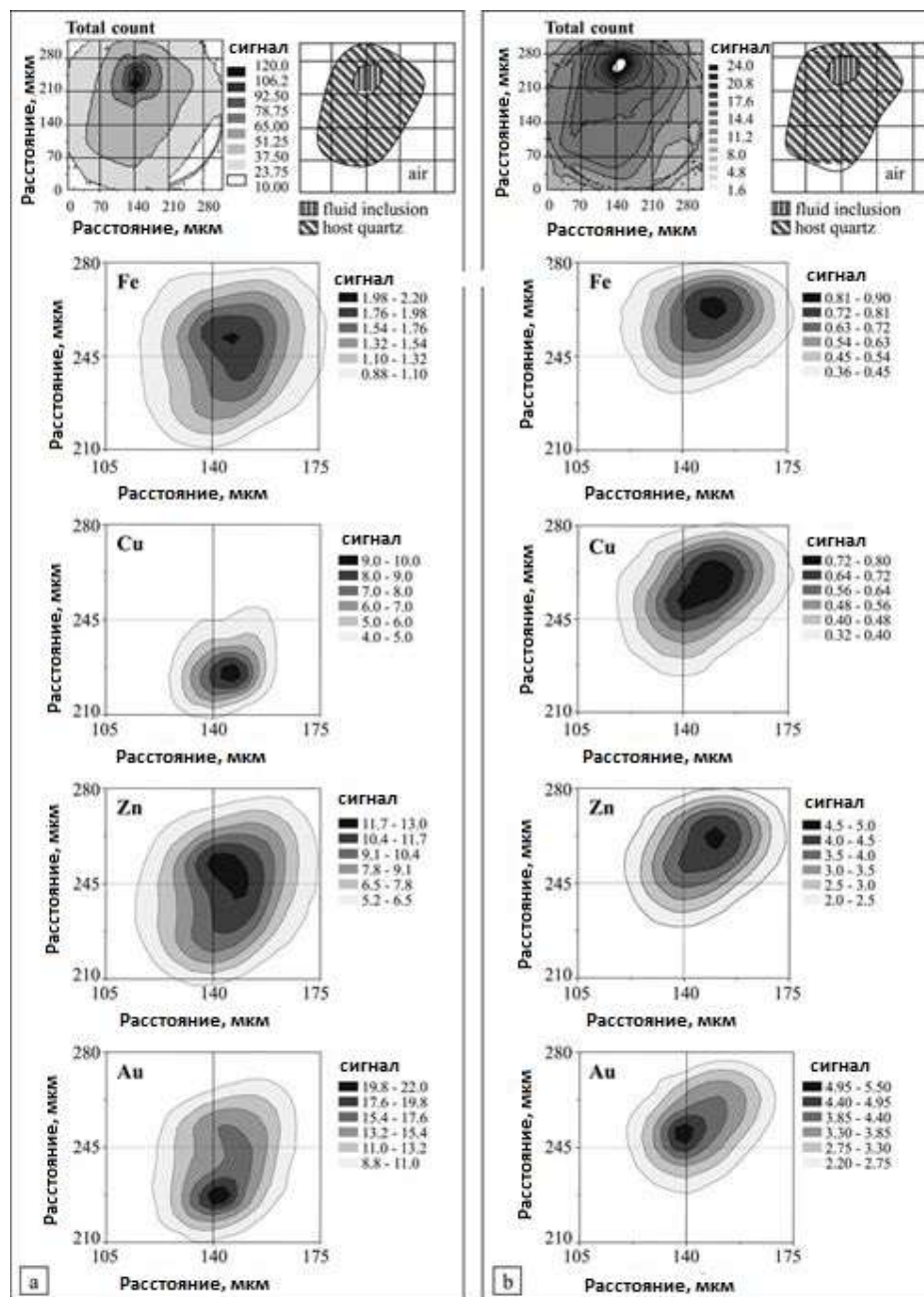


Рисунок 4.11 — Карты (горизонтальные сечения цифрового 3D изображения) пространственного распределения фракций элементов в микрофлюидном включении синтезированного кварцевого кристалла.

после прохождения двухкристального монохроматора фокусировался набором из 50 параболических рефракционных алюминиевых линз [123]. Область образца размером 350 мкм образец последовательно сканировалась вертикально с шагом 3 мкм. Время сбора сигнала составляло 1 секунду. После завершения сканирования в текущем ракурсе образец поворачивался на угол 2°. Число проекционных углов 180. Продолжительность полного скана составила порядка 5 часов. Платиновый пинхол диаметром 5 мкм был установлен перед образцом. Для контроля интенсивности до и после образца располагались PIN-диоды.

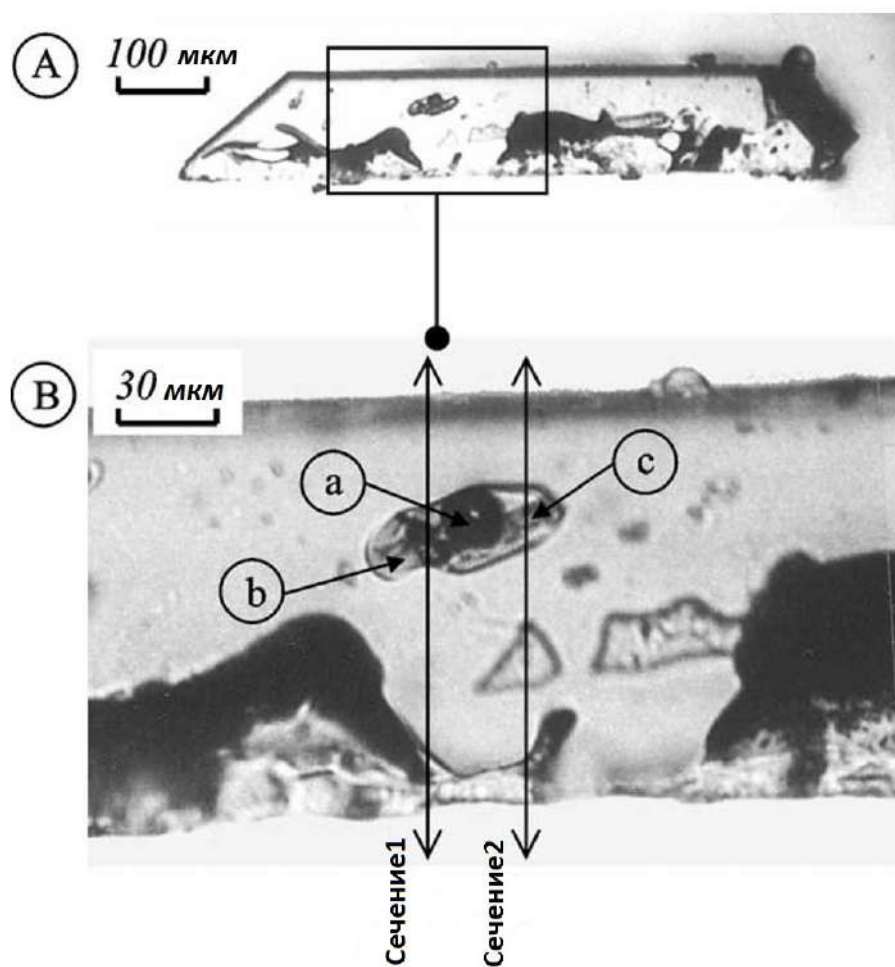


Рисунок 4.12 — А) Расположение исследуемого флюидного включения в синтетическом кварцевом сколе. В) Увеличенный объем, представленный на А. Состав включения при комнатной температуре: газообразная фаза воды (а), жидкая фаза (b) и твердые фазы, включая дочерний кристалл галита и непрозрачные минералы (с).

Интенсивность микрозонда размером $1 \times 5 \text{ мкм}^2$ составила 2×10^{10} фотонов/сек. Рентгеновская ПЗС-камера, установленная за образцом, использовалась для юстировки. Флуоресцентные спектры были собраны с помощью кремниевого дрейфового детектора, установленного под углом 90° к падающему пучку в вертикальной плоскости. Энергетическое разрешение детектора 170 эВ для 5.9 кэВ. На рис. 4.13 представлен рентгеновский спектр, измеренный от образца до начала томографического сканирования. Флуоресцентный сигнал был собран от K линий Fe , Cu , Zn и L линии Au , присутствующих во флюидном включении.

В рамках изучения процесса повторного осаждение на краях абляционного отверстия участки вулканического стекла до и после лазерной абляции исследованы на станции ID22 источника синхротронного излучения в Гренобле,

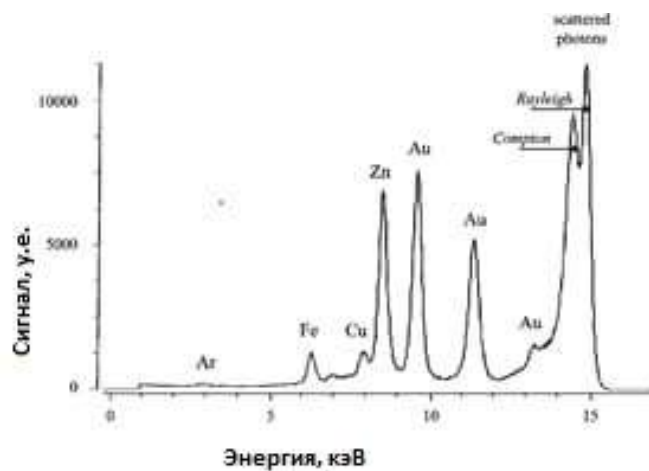


Рисунок 4.13 — Рентгеновский флуоресцентный спектр включения, полученный при зондировании пучком 15 кэВ. Время сбора сигнала составило 50 секунд. Пики Рэля и Комптона представляют упругое и неупругое рассеяние фотонов, соответственно. Наблюдаются пики *Fe*, *Cu*, *Zn* и *Au*. Пик *Ar* — из воздуха.

Франция. Образцы подвергались лазерным выстрелам с длинами волн 266 нм и 1064 нм. Ширина импульсов варьировалась в диапазоне нескольких нс. Сканирование проводилось сфокусированным рентгеновским пучком 22.5 кэВ. Размер фокального пятна составлял 4 микрона. Проекционный угол 2° . Число проекционных углов 180. Результат реконструкции распределения трех элементов *Pb*, *Rb* и *Th*, выполненной с использованием предложенного метода реконструкции, приведен на рисунке 4.14. Сканирование проводилось близко ко дну

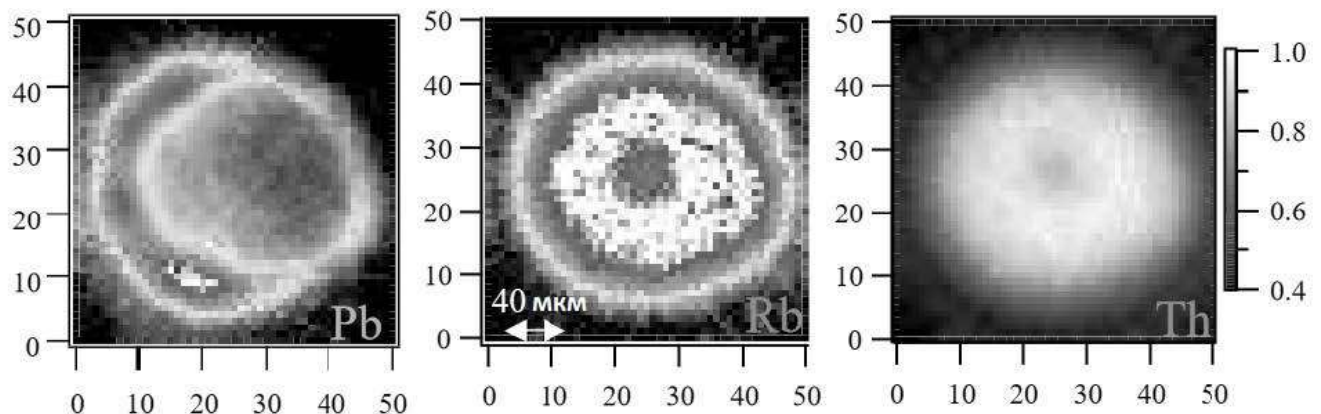


Рисунок 4.14 — Виртуальное сечение. Результат томографической реконструкции. Пространственное распределение *Pb*, *Rb* и *Th* [125].

абляционного отверстия. Выбранные 3 элемента являются представителями трех различных классов. К первому относятся элементы, склонные к лазерно-индуцированному фракционированию. Это элементы халькофильной группы

Pb, Zn, As, Cu, Ga. Во вторую группу входят сидерофильные элементы с умеренной степенью фракционирования Co, Fe и Ni и литофильные элементы Rb, Cr, Ti и Mn. К последней принадлежат летофильные элементы, не демонстрирующие фракционирования Ca, Sr, Y, Ce, Zr и Th. Проведенные исследования показали, что абляция происходила из расплава. Чем выше степень плавления, тем выше степень фракционирования подвижных/летучих элементов. Для предотвращения предварительной абляции и, таким образом, формирования градиента концентраций, потребуется пикосекундный лазер, поскольку при использовании 4-10 нс лазеров наступила предварительная абляция. Результаты проведенных исследований подтвердили верный выбор метода рентгеновской флуоресцентной томографии в качестве диагностического инструмента.

Предложенный метод реконструкции по рентгеновским флуоресцентным проекциям был применен в эксперименте по изучению участка микрометеорита Татауин [125]. Анализируемое зерно было извлечено из почвы в конце 90-х годов прошлого столетия в месте падения метеорита в выветренном состоянии и проводилось его сравнение с первозданными зернами, извлеченными в 1931 году, хранящимися в Музее естественной истории в Париже. Результаты исследования признаков биологической активности в метеорите Татауин методами TEM и SEM показывали два типа бактериоподобных форм [126] размером от 0.1 до 0.6 мкм. Было высказано предположение, что эти бактерии появились в местах разломов зерна вследствие циркуляции флюидов карбонатов из почвы в результате земного выветривания. С помощью абсорбционной томографии были выявлены местоположения и размеры трещин, а также места расположения фаз, более плотных, чем основная масса зерна. Целью рентгеновского флуоресцентного исследования являлось неинвазивное выявление и определение местоположения карбонатных фаз, пироксенов и хромитов, характерных для зерна. Зерно изучалось через кварцевые стенки капилляра, что не создавало проблем для визуализации элементов, за исключением Si, который является основным компонентом стенок капилляра. На рисунке 4.15 представлено распределение Fe, Cr и Ca, характерное для фаз, с пространственным разрешением 2 мкм, реконструированное с использованием предложенного метода. Для измерения рентгеновских флуоресцентных проекций монохроматический пучок 14 кэВ был сфокусирован с использованием линз CRL [92]. Размер фокального пятна $2 \times 10 \text{ мкм}^2$. Зерно было помещено в герметичный тонкий (толщиной $< 10 \text{ мкм}$) кварцевый капилляр для установки на головку гониометра. Сканирование

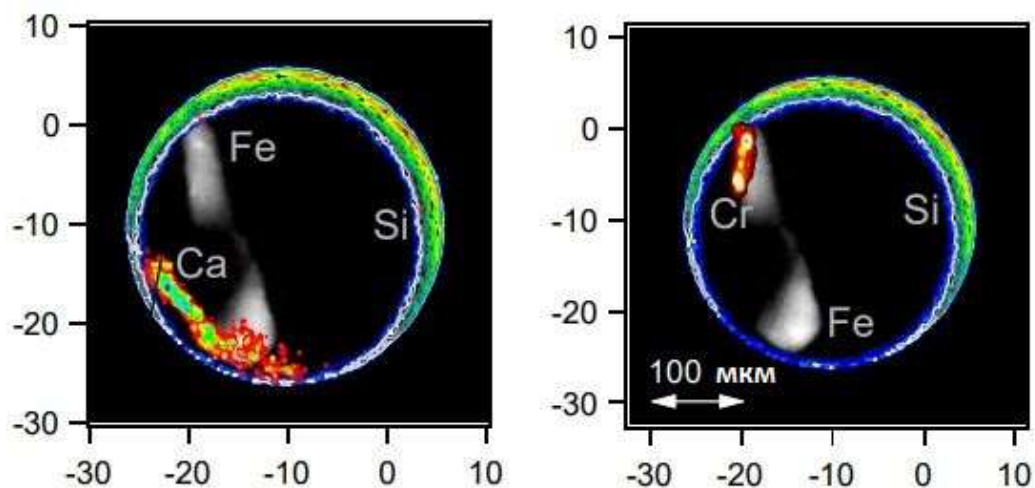


Рисунок 4.15 — Результат реконструкции. Слева: взаимное распределение Si, Ca и Fe. Справа: взаимное распределение Si, Cr и Fe.

проводилась в вертикальной геометрии. Следы рассеяния наблюдались в измеренных спектрах, где низкоэнергетические хвосты пиков Рэлея и Комптона при 14 и 13.6 кэВ соответственно создавали существенный фон. К-линии Fe при 6.4 и 7.06 кэВ, соответственно, давали интенсивные низкоэнергетические хвосты. Следовательно, все элементы с более низким Z имели К-линии с незначительным фоном от линий Fe и рассеяния. Стандартный метод получения данных MCA (Multi Channel Analyzer) выполнялся с использованием интегрирования в областях интереса линий флуоресценции. При этой процедуре интегрирование включает как интересующие линии, так и фоновые отсчёты или отсчёты, исходящие от соседних перекрывающихся линий, неразрешаемых SSD-детектором (150 эВ для Si(Li), 190 эВ для дрейфового диода при 5.9 кэВ). Такой подход даёт искажённые результаты для элементов ниже линии Fe. На рисунке 3 показаны результаты для Si, присутствующего в кварцевом капилляре. Обработка линий спектра проводилась с помощью онлайн-версии программы Axil [127]. После проведенной обработки Si остался видимым только на стенках капилляра, как и предполагалось. Это демонстрирует необходимость дополнительной обработки спектров, особенно низкоэнергетических линий. Данное исследование является частью разработки эталонного теста по установлению возможности проведения детальных анализов марсианских метеоритов в фазе карантина через стенки держателя образца mini-P4.

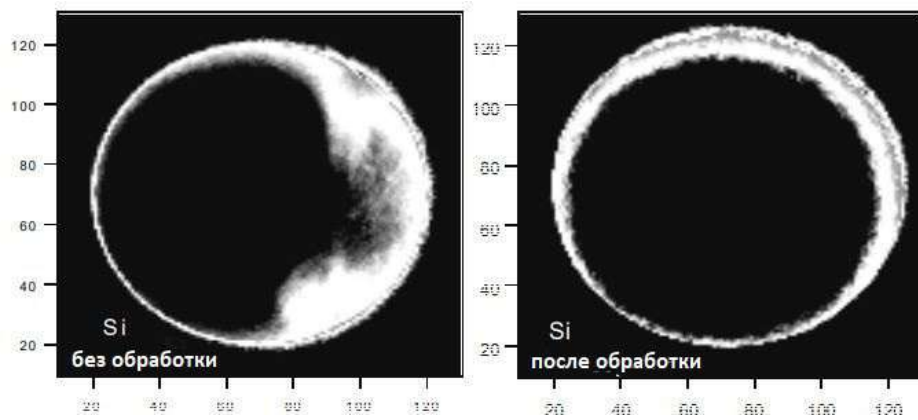


Рисунок 4.16 — Результаты реконструкции распределения Si до и после обработки спектров. Слева: до обработки, справа: после обработки программой AXIL.

4.3 Алгебраический метод реконструкции с нелинейной регуляризацией

Рассмотрим задачу трансмиссионной рентгеновской томографии. Пусть абсорбционные томографические проекции собраны в лабораторных условиях при установленном в тракт монохроматоре между источником рентгеновского излучения и образцом. В этом случае зондирование проводится параллельным пучком рентгеновских лучей. Тогда реконструкцию можно выполнять послойно. Описание предложенного метода начнем с рассмотрения данного случая. Принципиальная схема измерения представлена на рисунке 4.17.

Постановка задачи. Пусть f - определенная в R^n функция, описывающая распределение линейного коэффициента ослабления рентгеновского излучения объектом. Объект поворачивается вокруг оси вращения на угол $\varphi_h, h \in SO(n), h = 1, \dots, M_\varphi$ и проецируется вдоль некоторого направления x_n на гиперплоскость $x_n = 0$. Необходимо восстановить функцию f по измеренным томографическим проекциям $p(\varphi, \xi)$ (см. рис. 4.18).

Обозначим M_φ - полное число проекционных углов (ракурсов), участвующих в измерении, а M_s - число ячеек (пикселей) позиционно-чувствительного детектора. Поскольку мы рассматриваем реконструкцию одного слоя объекта, речь идет об одной линейке ячеек детектора. С учетом того, что нам известны только дискретные значения линеаризованного сигнала p_j , где $j = 1, \dots, M, M =$

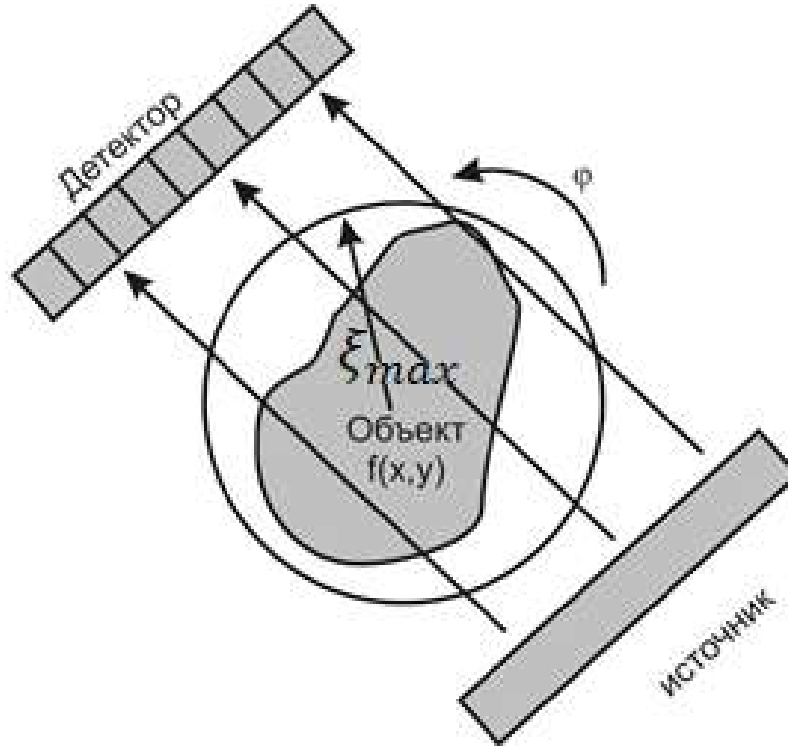


Рисунок 4.17 — Принципиальная схема измерения проекции при использовании параллельного пучка для зондирования в круговой схеме сбора проекций.

$M_\varphi \times M_s$, перепишем 1.15 в виде

$$p_j = \ln \frac{I_0(\varphi, \xi)}{I(\varphi, \xi)} = \iint f(x, y) \delta(-x \cos \varphi + y \sin \varphi - \xi) dx dy, \quad (4.6)$$

где $\delta(-x \cos \varphi + y \sin \varphi - \xi)$ описывает прямые L_j , относительно f с носителем в некоторой области Ω^2 (поле, включающее рассматриваемое сечение объекта целиком) (рис. 4.17). $\mathbf{p}$ - вектор линейаризованных значений сигнала с координатами p_j . Покроем Ω^2 квадратной сеткой (рис. 4.18) с пикселями Pix_i , $i = 1, \dots, N$. Будем считать f постоянной в каждом пикселе. Заменяем f вектором $\mathbf{f}$, i -ая координата которого равна значению f в i -ом пикселе

$$\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_N). \quad (4.7)$$

Введем

$$w_{ji} = L_j \cap Pix_i \quad (4.8)$$

как пересечение зондирующего луча j с пикселем i , согласно одной из трех моделей луча. Введем три модели луча, пересекающего пиксел Pix_i (рис. 4.19). Пусть ширина полосы (рис. 4.19) равна линейному размеру ячейки детектора. В первой и второй моделях луч аппроксимируется не полосой, а отрезком АВ, который проходит через середину полосы. В первой модели вклад пиксела в лучевую сумму (1.12) учитывается как бинарный. w_{ji} присваивается значение 1,

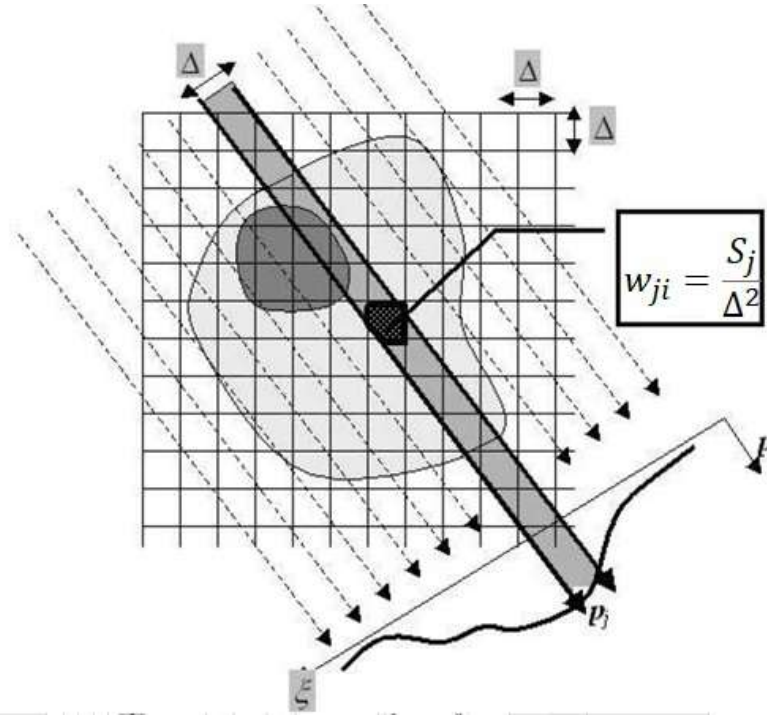


Рисунок 4.18 — Дискретизация пространства изображения объекта.

если пересечен пиксел i , и присваивается 0, если пиксел не пересечен отрезком. Во второй (линейной модели) вклад пиксела учитывается как отношение длины отрезка, пересекающего пиксел, к длине диагонали или длине стороны пиксела в зависимости от диапазона, к которому принадлежит угол, под которым луч пересекает пиксел. В третьей (площадной) модели вклад пиксела рассчитывается как отношение площади пиксела, покрытой полосой, к общей площади пиксела (рис. 4.18). При численной реализации методов реконструкции Модель луча выбирается в зависимости от требований к алгоритму по времени или по точности. Первая модель дает выигрыш по времени, третья модель является самой точной. С учетом введенного обозначения 4.8

$$\mathbf{w}_j = (w_{j1}, \dots, w_{jN})^T \quad (4.9)$$

операция прямого проецирования представима в виде

$$\mathbf{w}_j^T \mathbf{f} = p_j, \quad j = 1, \dots, M. \quad (4.10)$$

Запишем систему в виде:

$$W\mathbf{f} = \mathbf{p}, \quad (4.11)$$

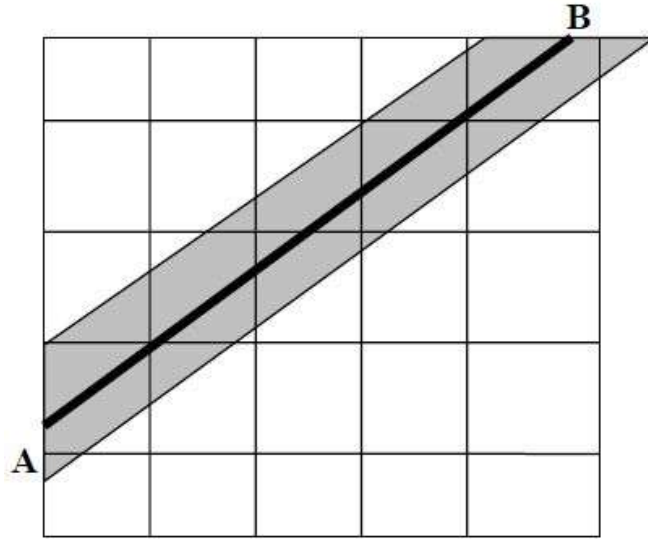


Рисунок 4.19 — Иллюстрация к трем моделям пучка.

где проекционная матрица:

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & \dots & w_{iN} \\ \dots & \dots & \dots \\ w_{M1} & \dots & w_{MN} \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Для решения системы предложено использовать следующий оптимизационный метод [128]. Будем минимизировать функционал:

$$\|W\mathbf{x} - \mathbf{p}\|_2 + \alpha\|R\mathbf{x}\|^2 \rightarrow \min, \quad (4.13)$$

где R - регуляризирующий оператор. Распишем в выражении 4.13 регуляризирующий член:

$$\|W\mathbf{x} - \mathbf{p}\|_2 + \alpha\mathbf{x}^T(R^T R)\mathbf{x} \rightarrow \min. \quad (4.14)$$

Воспользуемся методом градиентного спуска для поиска минимума. Обозначим через $\Phi(\mathbf{x}) = \|W\mathbf{x} - \mathbf{p}\|^2$. Стартуя с начального приближения $\mathbf{x}_0$ запишем итерационную последовательность решений:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \lambda_n(\nabla\Phi(\mathbf{x}) + 2\alpha R^T R\mathbf{x}), \quad (4.15)$$

где λ_n задает скорость градиентного спуска. Перегруппировав слагаемые, запишем:

$$\mathbf{x}_{n+1} = (I - 2\alpha\lambda_n R^T R)\mathbf{x}_n - \lambda_n(\nabla\Phi(\mathbf{x})). \quad (4.16)$$

Тогда шаг градиентного спуска разбивается на два полушага. Первый полушаг по антиградиенту невязки:

$$\mathbf{x}_{n+1}^\nabla = \mathbf{x}_n - \lambda_n(\nabla\Phi(\mathbf{x})), \quad (4.17)$$

и второй шаг выполняет регуляризацию полученного на предыдущем полушаге решения:

$$\mathbf{x}_{n+1} = (I - 2\alpha\lambda_n R^T R)\mathbf{x}_{n+1}^\nabla. \quad (4.18)$$

В рамках диссертационного исследования описанный метод реконструкции был численно реализован в программном комплексе *RegART*. На ри-

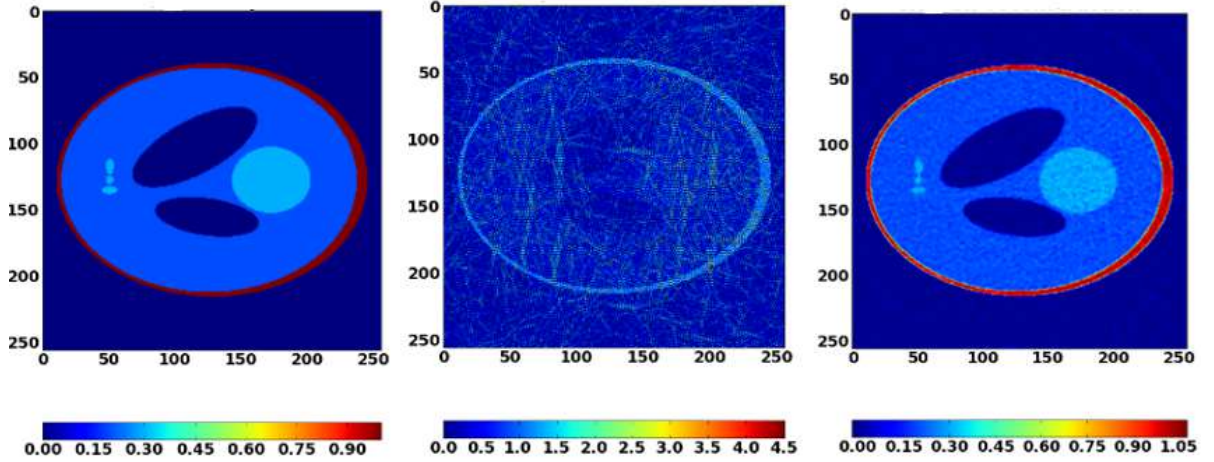


Рисунок 4.20 — Слева - фантом Шеппа-Логана. Справа - реконструкция, выполненная программой *RegART*. По центру - попиксельная разница левого и правого изображений.

сунке 4.21 приведены результаты численного эксперимента по реконструкции описанным методом фантома Шеппа - Логана [108] с использованием набора модельных зашумленных проекций. Линейный размер изображения фантома (рис. 4.20 (слева)) – 200 пикселей. Были рассчитаны проекции для 200 проекционных углов. Линеаризованные проекции рассчитывались согласно (1.15). К линеаризованным проекциям был добавлен 20% аддитивный нормальный шум. На рисунке 4.20 (справа) приведен результат применения предложенного метода. Было рассчитано 30 итераций. Медианный фильтр был использован в качестве нелинейного регуляризатора. Медианная фильтрация, предложенная в 1971 году Дж. Тьюки, в отличие от Гауссовской, обладает важным свойством сохранения границ. Размер окна фильтра 3×3 пиксела, шаг градиентного спуска 0.2. На центральном изображении 4.20 представлена попиксельная разница левого и правого изображений. На рисунке 4.21 на изображении фантома Шеппа-Логана тремя отрезками выделены участки, для которых на рисунке 4.22 на трех последовательных изображениях (*Redcut*, *Blackcut*, *Whitecut*) представлены результаты сравнения двух реконструкций. Красный отрезок

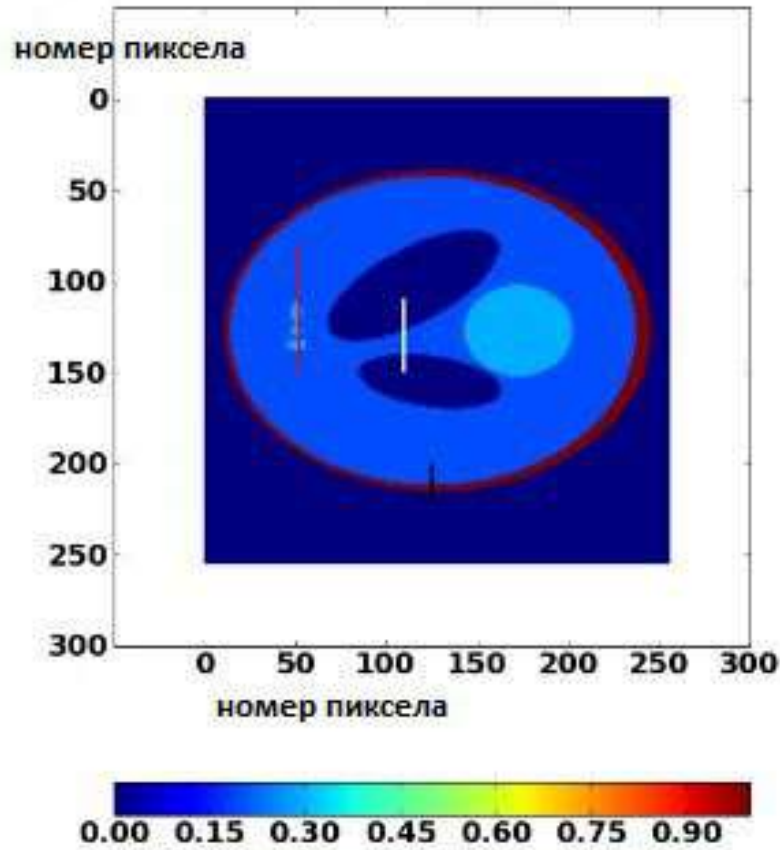


Рисунок 4.21 — Фантом Шеппа-Логана с выбранными для сравнения участками.

пересекает три области малого объема. Размер областей соизмерим с расстояниями между областями. Для этой области на левом рисунке 4.22 с названием *Redcut* участки трех профилей. Черной линией показан участок профиля фантома Шеппа-Логана, использованного в модельном эксперименте. Контраст k , рассчитываемый согласно выражению:

$$k = \frac{s_{max} - s_{min}}{s_{max}}, \quad (4.19)$$

равен 0.33. Зеленая кривая – результат реконструкции алгебраическим методом без регуляризации. Синяя кривая – результат реконструкции предложенным методом. Хорошо видно, что в отсутствии регуляризации в случае, когда размеры локальных областей и контраст сигнала в области интереса не велики, восстановленные значения сильно отличаются от ожидаемых. Используемая регуляризация значительно повышает точность реконструкции.

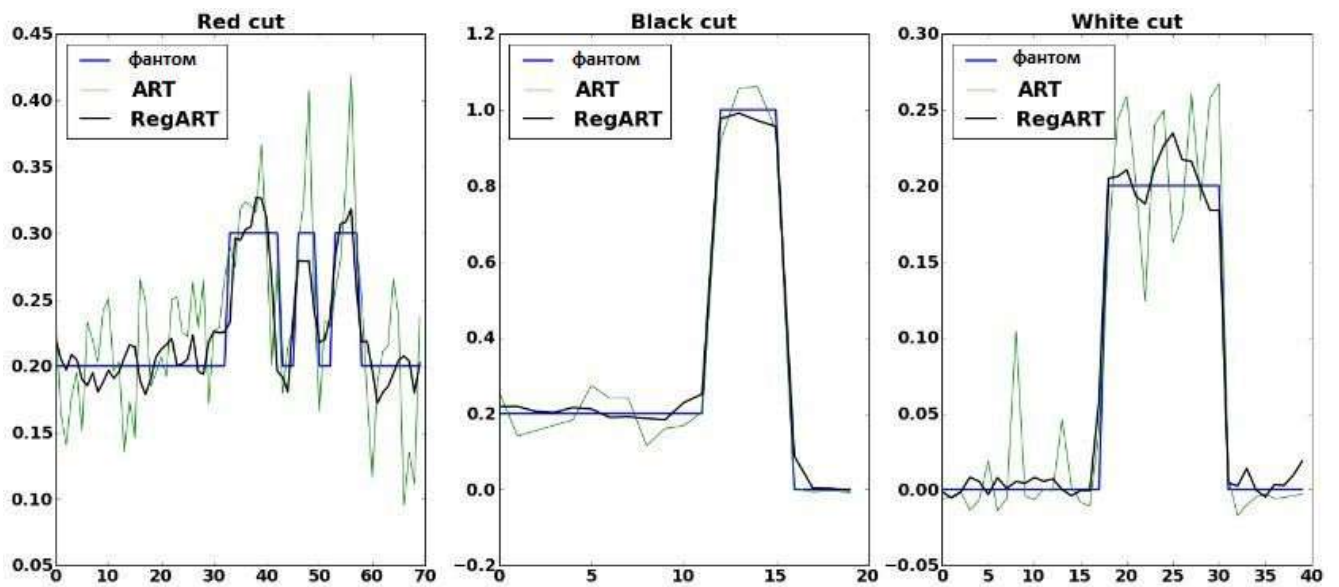


Рисунок 4.22 — Три области интереса фантома Шеппа-Логана для сравнения реконструкций.

Черный отрезок на рисунке 4.22 пересекает границу объект-воздух. Контраст сигнала возрос до 1, хотя размер локальной области включения сохранился. Оба метода реконструкции (центральное изображение *Blackcut* 4.22) показали сопоставимые результаты. Кривые зеленая и синяя различаются не значительно. Белый отрезок на рисунке 4.22 пересекает три области. Контраст сигнала не большой и равен 0.2, но увеличился размер пространственной неоднородности. Вновь предложенный метод (синяя кривая) продемонстрировал более точное решение. Можно сделать следующий вывод. Используемая нелинейная регуляризации повышает точность реконструкции особенно для областей с малым контрастом измеряемых сигналов.

Был проведен тестовый эксперимент с использованием проекций, собранных в монохроматическом режиме зондирования на лабораторном микротомографе, созданном и функционирующем в институте кристаллографии РАН. Для оптимизации времени экспозиции проводилось математическое моделирование проекций [129]. Малое время экспозиции использовалось для моделирования высоко шума на проекциях. Лимит на время сбора проекций в реальных условиях обусловлен требованиями малой дозовой нагрузки на объект или ограничениями на полное время томографирования. Ограничение дозовой нагрузки связано с требованием не нанести вреда зондируемому объекту. Второе вытекает из условий применения томографического метода на конвейере с целью мониторинга промышленного процесса. Двумерный

позиционно-чувствительный детектор на ПЗС матрице был использован для регистрации прошедшего через объект рентгеновского излучения. Линейный размер ячейки детектора составлял примерно 10 микрон. Тестовый объект - полипропиленовая пробирка, заполненная водой. Внешний диаметр пробирки - 10.5 мм, толщина стенки составляла 1.6 мм. Генерация рентгеновского спектра проводилась с использованием молибденового анода. Монохроматор вырезал линию MoK_{α} 0.07 нм. Поскольку в пределах разрешающей способности томографической установки состав стенок пробирки и область заполнения пробирки водой можно считать однородными, на таком объекте было удобно проводить сравнение результатов реконструкции, полученных разными методами. На рисунке 4.23 представлена измеренная синограмма. Проекции собирались в интервале от 0 до 180 градусов. На рисунке 4.24 приведены результаты ре-



Рисунок 4.23 — Набор собранных томографических проекций.

конструкции цифрового изображения сечения пробирки, заполненной водой. Результат реконструкции предложенным методом (рис. 4.24А) [130], результат реконструкции методом FBP (рис. 4.24В). Для медианной фильтрации использовалось квадратное окно 3×3 пиксела. В качестве критерия останова в итерационной процедуре было использовано заданное значение среднеквадратичного отклонения между двумя последовательными решениями. Здесь необходимо обратить внимание, что в качестве критерия может быть выбрана любая проблемно-ориентированная метрика. Средние значения ослабления рентгеновского излучения, полученные при использовании предложенного метода, составили для воды 0.098 мм^{-1} и при использовании метода FBP 0.094 мм^{-1} , соответственно. Значения рассчитывались по области интереса с использованием круглой маски, наложенной на изображение. Табличное значение равно 0.099 мм^{-1} [131]. Значения среднеквадратичного отклонения для предложенного метода 0.002 мм^{-1} и для метода FBP 0.003 мм^{-1} , соответственно. Следует отметить, что алгебраический метод практически лишён радиальных артефактов, которые неизбежно возникают при использовании метода FBP. В

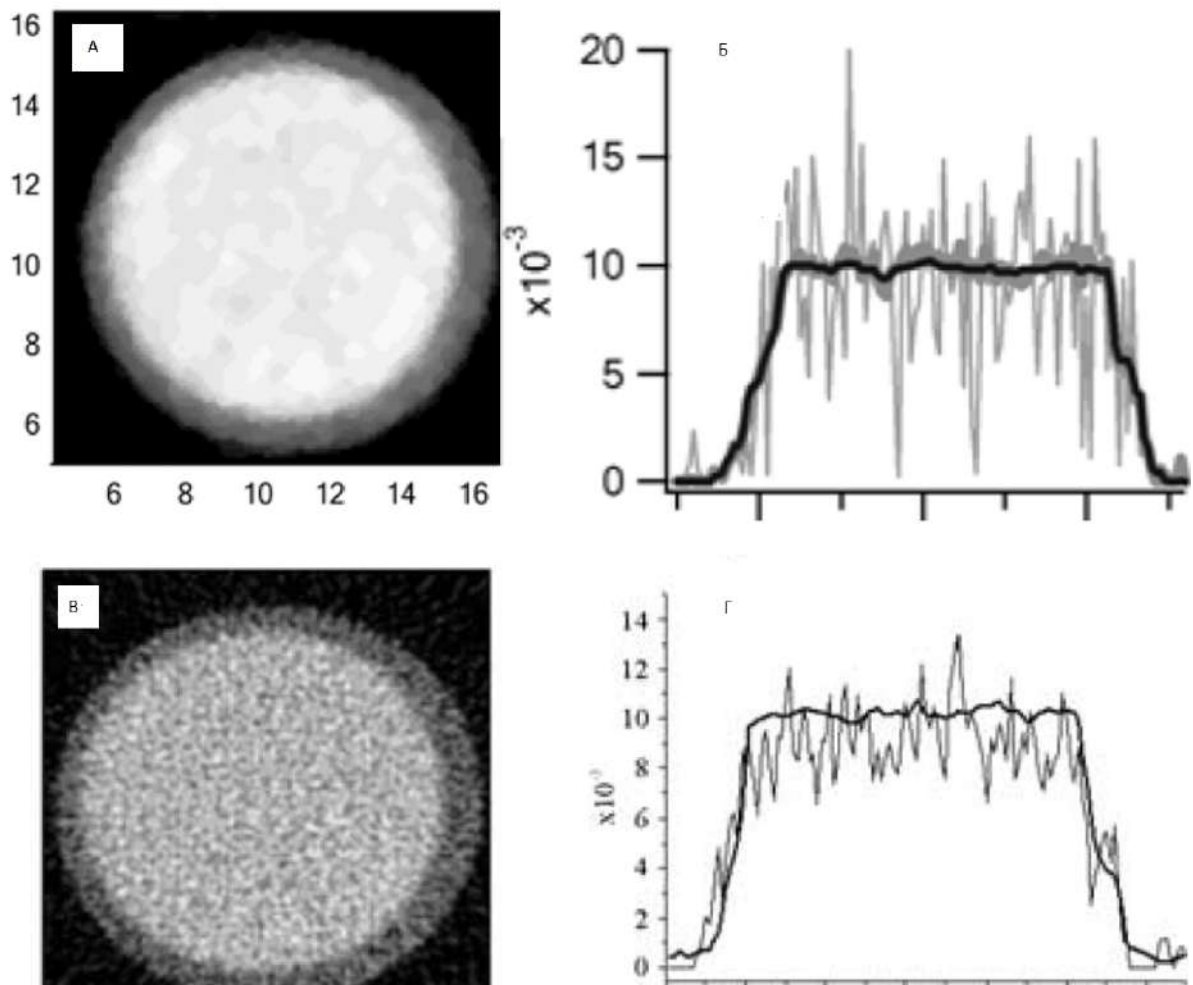


Рисунок 4.24 — Восстановленные цифровые изображения горизонтального сечения пробирки. (А) — результат предложенного метода, (В) — результат метода ГВР. (Б) — центральный профиль сечения (серая кривая — алгебраический метод без регуляризации, черная кривая — предложенный метод. (Г) — центральный профиль сечения (серая кривая — метод ГВР, черная кривая — предложенный метод)

в заключении заметим, что медианная фильтрация является эвристическим методом. Оптимальные параметры фильтра (размеры и форма окна) следует определять опытным путем, поскольку они чувствительны к размеру и формам включений/дефектов. Стратегия каскадной фильтрации может использоваться при настройке технических систем автоматического анализа результатов реконструкции [132]. Также необходимо отметить, что нелинейный регуляризирующий оператор может быть нейросетевым. Причем для дефектоскопии структурированных систем обучение должно проводиться на характерных типах дефектов, в то время как для метрологического контроля потребуется обучение с использованием сертифицированных систем.

Метод RegART является итерационным и поэтому обработка 180 проекций изображений размером 1000 на 1000 пикселей на процессоре AMD Opteron 275 (2.4 ГГц) занимала порядка 5 минут. Для повышения производительности была написана реализация RegART с использованием технологии CUDA. Это позволило на видеокарте Nvidia GeForce GTX280 получить ускорение порядка 300 раз и сократить время реконструкции до 1 сек.

4.4 Алгебраический метод реконструкции, учитывающий гетероскедастичность измеряемых сигналов

Регистрация сигнала в пикселе детектора - стохастический процесс. Событие - регистрация кванта, может наступить, если прилетевший квант зарегистрирован, или - не наступить, если прилетевший квант не зарегистрирован, например, попал в мертвое время регистрирующей аппаратуры. Если проводится ограниченное число n независимых испытаний, то вероятность того, что в серии из n испытаний событие наступит k раз приближенно описывается распределением Пуассона с плотностью вероятности :

$$Pr(I = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}, /, k = 1, \dots, n, \quad (4.20)$$

где I - регистрируемое пикселем детектора значение сигнала, λ - математическое ожидание, равное дисперсии. Тогда линеаризованные значения (компоненты вектора) $\mathbf{p} = \ln(\mathbf{I}_0) - \ln(\mathbf{I})$ в системе (4.11) - случайные величины, $\mathbf{x}$ - вектор оценок линейного коэффициента ослабления или искомое решение. Сведем решение СЛАУ к решению оптимизационной задачи следующего вида:

$$\|W\mathbf{x} - \mathbf{p}\|_2 \xrightarrow{x} \min, \quad (4.21)$$

где W - проекционная матрица (4.12). Поскольку значение $\mathbf{p}$ это результат монотонного преобразования I_1 , то функция распределения дискретных случайных величин не меняется относительно используемой для регистрируемых значений. Тогда математическое ожидание рассчитывается согласно выражению:

$$\mathbb{E} = \sum_{i=1}^{\infty} p_i Pr_i, \quad (4.22)$$

где индекс i - номер реализации случайной величины. Подставляя в явном виде выражение для плотности вероятности, перепишем выражение для математического ожидания

$$\mathbb{E} = \sum_{i=1}^{\infty} (\ln(I_0) - \ln(k_i)) \frac{\lambda^{k_i} e^{-\lambda}}{k_i!} \quad (4.23)$$

и запишем выражение для дисперсии

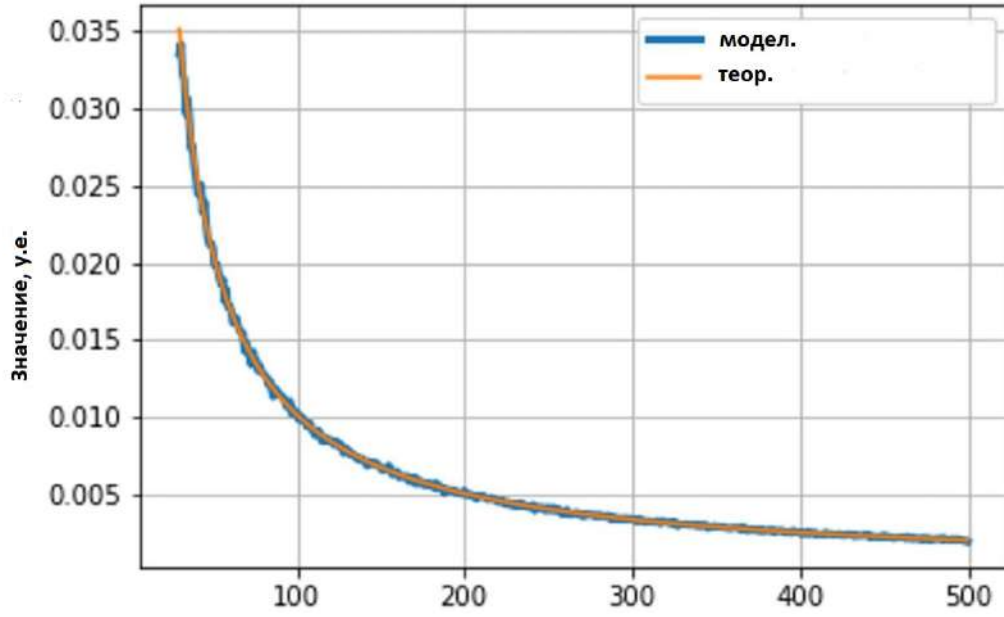


Рисунок 4.25 — Сравнение теоретического результата (оранжевая кривая) с результатом моделирования (синяя кривая).

$$D = \sum_{i=1}^{\infty} (\ln(I_0) - \ln(k_i) - \mathbb{E})^2 \frac{\lambda^{k_i} e^{-\lambda}}{k_i!} \quad (4.24)$$

При проведении измерений значение математического ожидания нам не известно. Заменяв его на среднее арифметическое, воспользуемся значением выборочной дисперсии:

$$S^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y - \bar{Y})^2, \quad (4.25)$$

где Y — измеряемые значения. На рис. 4.25 приведены результаты сравнения значений дисперсии, рассчитанных с использованием выражения (4.25) (оранжевая кривая), со значениями выборочной дисперсии (голубая кривая). В качестве генератора СВ использовался генератор для распределения Пуассона `numpy.random.poisson` ($\lambda = i$, `size=5000`). Модельные расчеты проводились для значений λ в интервале от 30 до 500 с шагом 0.5. Для каждого значения было сгенерировано 5000 значений. Визуальное сравнение кривых позволяет сделать вывод о корректности выбранного приближения выборочной дисперсии.

Чтобы учесть свойство гетероскедастичности наблюдений при решении задачи реконструкции, припишем вес, равный обратному среднеквадратичному отклонению каждому регистрируемому значению сигнала на проекции:

$$\mathbf{p}^* = \mathbf{p} \circ \frac{1}{\sqrt{\mathbf{D}}}. \quad (4.26)$$

Здесь $\circ$ - оператор поэлементного умножения. Перепишем СЛАУ 4.11 с учетом проведенного взвешивания:

$$\frac{1}{\sqrt{D}} \circ W\mathbf{x} = \mathbf{p}^*. \quad (4.27)$$

Было предложено решать оптимизационную задачу в следующей постановке:

$$\Phi = \left\| \frac{1}{\sqrt{D}} \circ W\mathbf{x} - \mathbf{p}^* \right\|_2 \xrightarrow{x} \min. \quad (4.28)$$

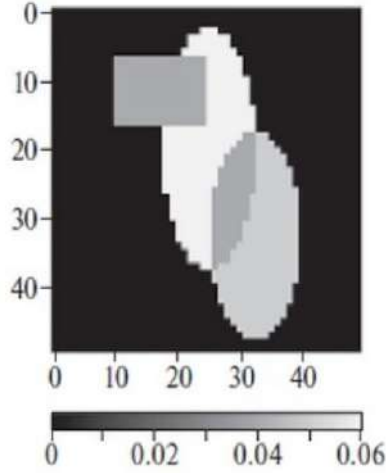


Рисунок 4.26 — Изображение фантома.

Построим итерационный процесс, воспользовавшись методом наискорейшего спуска. Тогда шаг $(n + 1)$ -ой итерации рассчитывается следующим образом:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \gamma_k \nabla \Phi(x_k) \quad (4.29)$$

где γ_k - шаг спуска.

Предложенный метод был протестирован с использованием 4 наборов модельных проекций. Фантом, представленный на рисунке 4.26, был использован для расчета линейаризованных проекций. Размер изображения фантома 50×50 пикселей. Количество проекционных углов – 50. Первый эксперимент моделирует ситуацию не постоянного в течение томографического измерения времени экспозиции. Время экспозиции различалось для первой и второй половины проекционных данных. Ситуацию имитирует сбой в программе управления сбором проекций. На рис. 4.27а приведена линейаризованная синограмма, рассчитанная с использованием модели 1.15 при условии нестационарного времени экспозиции. Карта распределения значений обратного среднеквадратичного отклонения приведена на рисунке 4.27б. На рисунке 4.27в приведены взвешенные значения синограммы, используемые в СЛАУ 4.27.

УЧЕТ ГЕТЕРОСКЕДАСТИЧНОСТИ

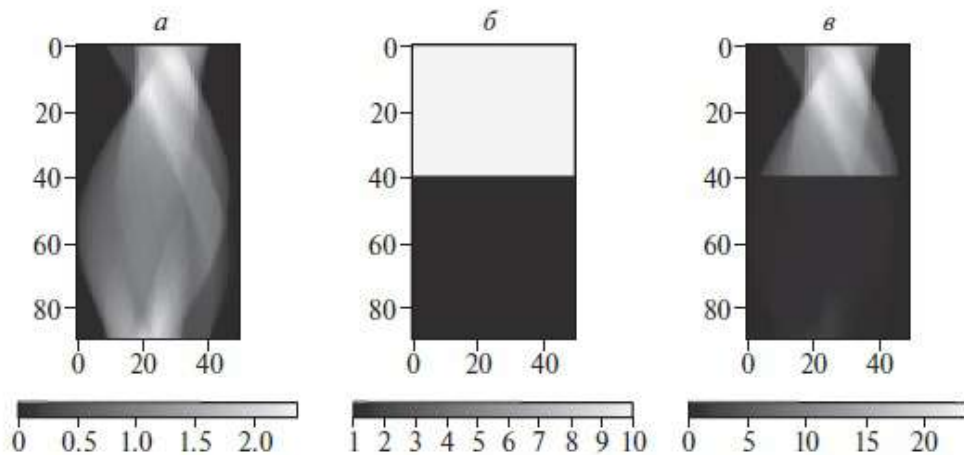


Рисунок 4.27 — *a* - синограмма с переменным временем экспозиции; *б* - представление границы раздела значений времени экспозиции; *в* - взвешенные значения синограммы.

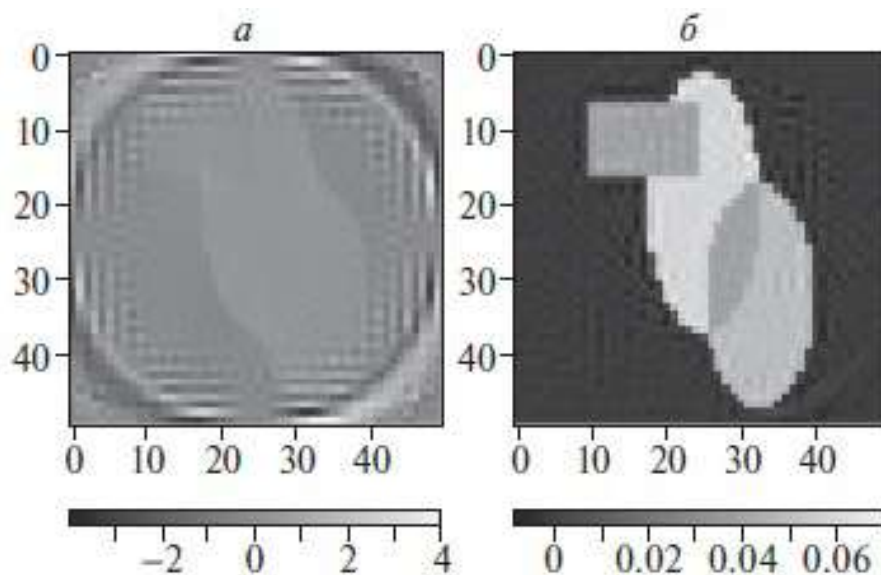


Рисунок 4.28 — Результаты реконструкции: *a* - методом SIRT, *б* - предложенным методом.

На рисунке 4.28 представлены результаты реконструкции, выполненной двумя алгебраическими методами: методом SIRT [133] (рис. 4.28*a*) и предложенным методом (рис. 4.28*б*). Представлен результат для 100 итераций. Величина среднеквадратичного отклонения, рассчитанного для сравнения с фантомом, при реконструкции методом SIRT составила 6.8×10^{-1} (рис. 4.28*a*), при реконструкции описанным методом — 4.4×10^{-6} (рис. 4.28*б*). Значения различаются на три порядка. Предложенный метод демонстрирует высокую точность. Это соответствует визуальному восприятию.

Второй эксперимент моделирует ситуацию сбоя отклика детектора для одного из проекционных углов. На рис. 4.29а представлена модельная линейаризованная синограмма, рассчитанная с использованием модели 1.15 при условии нестационарного времени экспозиции. Карта распределения значений обратного среднеквадратичного отклонения приведена на рисунке 4.29б. На 4.29в представлены взвешенные значения синограммы, используемые при реконструкции предлагаемым методом. Результат реконструкции методом SIRT приведен на рисунке 4.30а. На рисунке 4.30б представлен результат реконструкции предложенным методом. Итерационный процесс был остановлен после 100 итераций. Величина среднеквадратичного отклонения при реконструкции методом SIRT составила 2.4×10^{-4} , при реконструкции предложенным методом - 1.6×10^{-6} . Предложенный метод демонстрирует высокую точность, что соответствует визуальному восприятию.

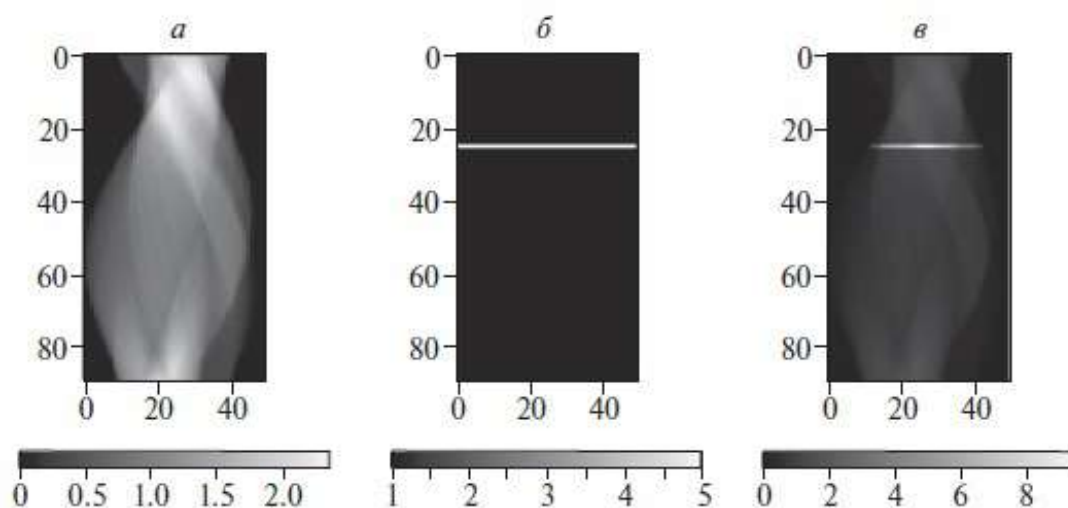


Рисунок 4.29 — а - модельная синограмма; б - иллюстрация процесса сбоя в детектировании; в - использованная в СЛАУ синограмма.

Рассмотрим применение предлагаемого метода в условиях, когда часть проекций имеет плохое отношение сигнал-шум (рис. 4.31а). Сбой в работе источника рентгеновского излучения может привести к такой ситуации. Поскольку томографические измерения могут длиться десятками часов, переснимать проекции будет затратной операций. Карта дисперсии существенно различается для верхней и нижней половин изображения (рис. 4.31б). На рисунке 4.31в представлены значения синограммы, используемые в СЛАУ 4.27. На рисунке 4.32 представлены результаты реконструкции методом SIRT (рис. 4.32а) и предложенным методом (рис. 4.32б).

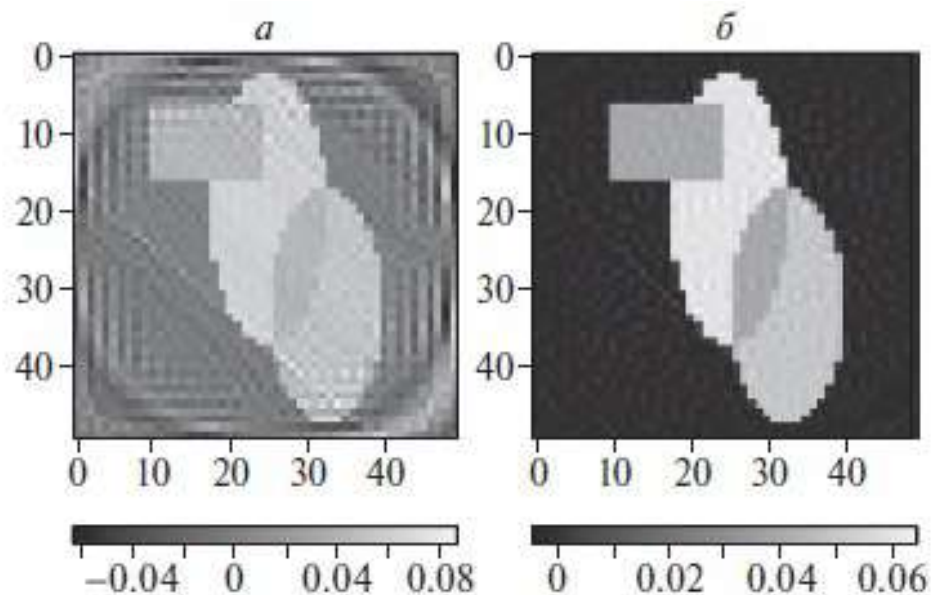


Рисунок 4.30 — Результаты реконструкции: *а* - методом SIRT, *б* - предложенным методом.

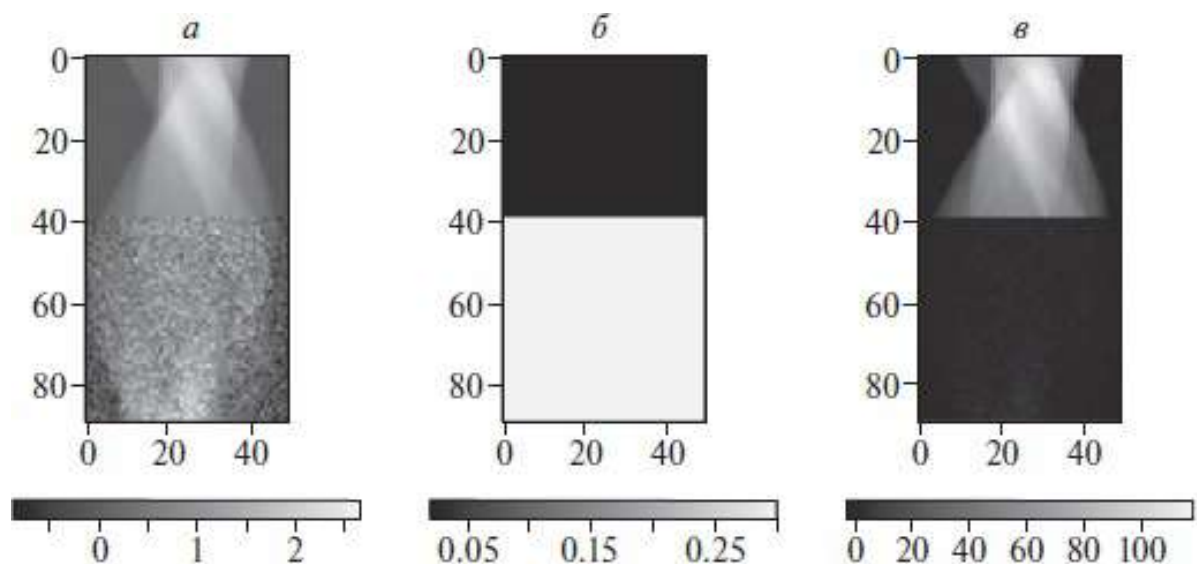


Рисунок 4.31 — *а* - модельная синограмма; *б* - иллюстрация процесса сбоя в детектировании; *в* - использованная в СЛАУ синограмма.

Были рассчитаны 100 итераций. Полученные результаты демонстрируют высокую чувствительность предложенного метода к наличию шума на части проекций.

Описанный выше метод реконструкции, в котором учитывается гетероскедастичность шума на проекциях, позволяет проводить реконструкцию даже в условиях, когда абсолютные значения сигналов различаются на несколько порядков. Природа такого разброса значений сигнала различна. Одной из причин может быть наличие сильнопоглощающих кластеров локальных областей

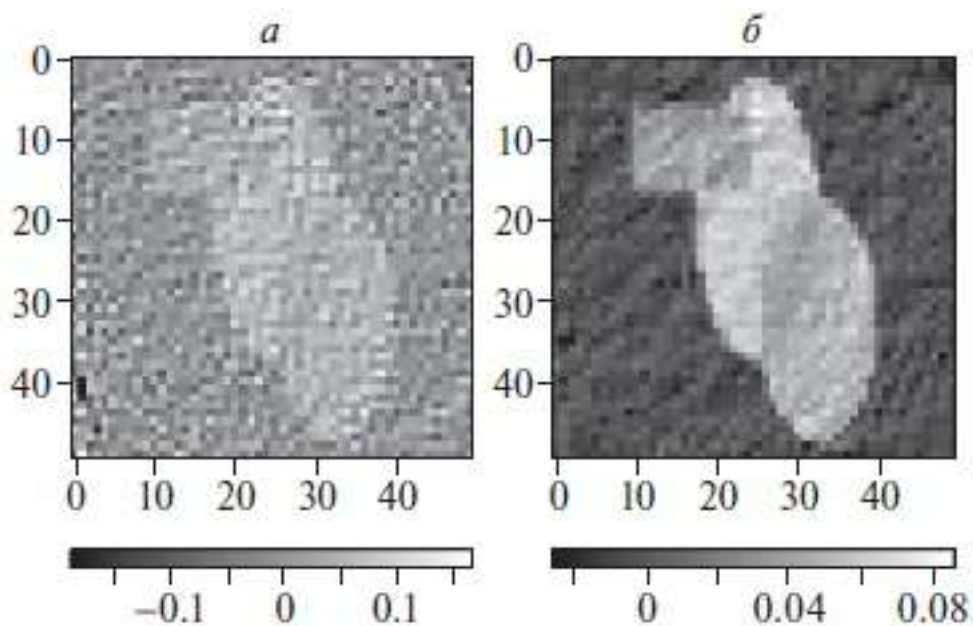


Рисунок 4.32 — Результаты реконструкции: *а* - методом SIRT, *б* - предложенным методом.

в объекте [134]. Тогда для некоторых ракурсов съемки динамический диапазон значений сигналов сужается, располагаясь в области нуля. Это резко ухудшает отношение сигнал-шум. Причина также может скрываться в сбое работы регистрирующего оборудования, который может так возникнуть, так и исправиться спонтанно во время измерения. Поскольку измерения могут длиться в течение десятков часов полная пересъемка может оказаться дорогостоящей или невозможной. Предложенный метод позволяет выполнить реконструкцию в нестационарных условиях съемки.

4.5 Алгебраический метод томографической реконструкции для оценки локального состава с использованием проекций в схеме «на просвет»

При использовании монохроматического излучения энергии E для зондирования объекта результатом реконструкции является пространственное распределение линейного коэффициента ослабления. Пусть $f(x, y, E)$ – восстанавливаемое распределение линейного коэффициента ослабления объекта, $I_0(E)$ – начальная интенсивность рентгеновского луча, φ – проекционный угол, s определяет центр ячейки детектора. Тогда линейаризованные томографические проекции $p(s, \varphi, E)$ представлены дискретным изображением $N \times M_\varphi$. Здесь N – число ячеек детектора, M_φ – число проекционных углов. Искомая функция $f(x, y, E)$, описывающая сечение томографируемого объекта, представлена дискретным изображением $N \times N$. Пусть $f \in R^{N \times N}$ и $p \in R^{N \times M_\varphi}$ – соответственно входные и выходные данные, W – матрица оператора прямого проецирования. Тогда томографическую проекцию можно записать в виде СЛАУ:

$$\mathbf{p} = W\mathbf{f} \quad (4.30)$$

Установка монохроматора в тракт лабораторного томографа увеличивает время съемки проекций в сотни раз. Поэтому измерения часто проводятся не в монохроматическом, а в полихроматическом режиме. Тогда необходимо в модели формирования сигнала учитывать, что коэффициент ослабления объекта меняется в зависимости от энергии $f(x, y, E)$. При переходе к немонахроматическому случаю выражение, которое связывает регистрируемый сигнал с линейными коэффициентами ослабления, принимает следующий вид:

$$I(l) = \int_0^{+\infty} I_0(E) \exp \left(- \int_L f(x, y, E) dl \right) dE. \quad (4.31)$$

Таким образом, оператор проецирования становится нелинейным. Спектр источника рентгеновского излучения при решении обратной задачи будем считать известным. Восстановить $f(x, y, E)$, размер которой при использовании спектра увеличивается до $N \times N \times N_E$, где N_E – число интервалов спектра, из обычного набора проекций без дополнительных знаний о составе объекта невозможно. Предлагается использовать следующую модель объекта [135]. Будем считать,

что зондируемый объект состоит из смеси K известных компонент. Для каждой компоненты известна спектральная функция ослабления $f_k(E)$. Значения функций определяются предварительно в ходе дополнительных измерений. При этом неизвестными считаются пространственные распределения концентрации $c_k(x, y)$ каждой компоненты. Запишем модель объекта в следующем виде:

$$f(x, y, E) = \sum_{k=1}^K c_k(x, y) f_k(E). \quad (4.32)$$

Тогда, принимая во внимание тот факт, что интеграл под экспонентой – это линейный оператор W , запишем значение ослабления интенсивности входного рентгеновского излучения для смеси $c = (c_1, \dots, c_K)^T$ в виде:

$$I(c) = \int_0^{+\infty} I_0(E) \exp\left(-\sum_{k=1}^K f_k(E) H c_k\right) dE. \quad (4.33)$$

Пусть i – индексы пикселей в пространстве изображений распределения концентраций. Изображения имеют размер $N \times N$. Пусть j – индексы пикселей в пространстве измерений. Размер изображения $N \times M_\varphi$. k принимает значения $1..K$ и индексирует компоненты, входящие в состав объекта. Пусть w_{ij} – элементы матрицы W . Чтобы восстановить распределение концентраций c_k , будем минимизировать L2-норму:

$$Q(c) = (I(c) - t)^2 \xrightarrow{C} \min, \quad (4.34)$$

где $t \in R^{N \times M_\varphi}$ – значения, зарегистрированные детектором. В выражении для невязки 4.34 используются результаты измерения, а не линеаризованные значения, это важно. Рассчитаем покомпонентно градиент невязки:

$$\frac{\delta Q_j}{\delta c_k^i} = 2(I(c) - t)_j \frac{\delta I(c)_j}{\delta c_k^i}. \quad (4.35)$$

Вычислим частную производную:

$$\begin{aligned} \frac{\delta I(c)_j}{\delta c_k^i} &= \int_0^{+\infty} dE \left\{ \frac{\delta}{\delta c_k^i} \exp\left(-\sum_s f_s(E) [W c_s]_j\right) \right\} = \\ &= \int_0^{+\infty} dE \left\{ \exp\left(-\sum_s f_s(E) [W c_s]_j\right) \frac{\delta}{\delta c_k^i} (-f_k(E) [W c_k]_j) \right\} = \\ &= \int_0^{+\infty} dE \left\{ -f_k(E) \exp\left(-\sum_s f_s(E) [W c_s]_j\right) \frac{\delta [W c_k]_j}{\delta c_k^i} \right\}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Получаем

$$\frac{\delta I(c)_j}{\delta c_k^i} = \mu_j^k w_{ji}, \text{ где } \mu_j^k = \int_0^{+\infty} \left\{ -f_k(E) \exp \left(- \sum_s f_s(E) [W c_s]_j \right) \right\} dE. \quad (4.37)$$

Подставляя 4.37 в 4.35 получаем выражение для градиента невязки:

$$\nabla_k Q = 2W^T R^k, \text{ где } R_j^k = (I(c) - t)_j \mu_j^k. \quad (4.38)$$

Здесь R^k – взвешенная невязка для компоненты k . Получив компоненты градиента по каждой из составляющих исходный объект, запишем шаг итерации:

$$c_k^\xi = c_k^{\xi-1} - \alpha_k (\xi - 1) W^T R^k (c^{\xi-1}). \quad (4.39)$$

Был проведен модельный эксперимент с двухкомпонентным объектом для иллюстрации применения метода [135]. Распределение концентраций для ком-

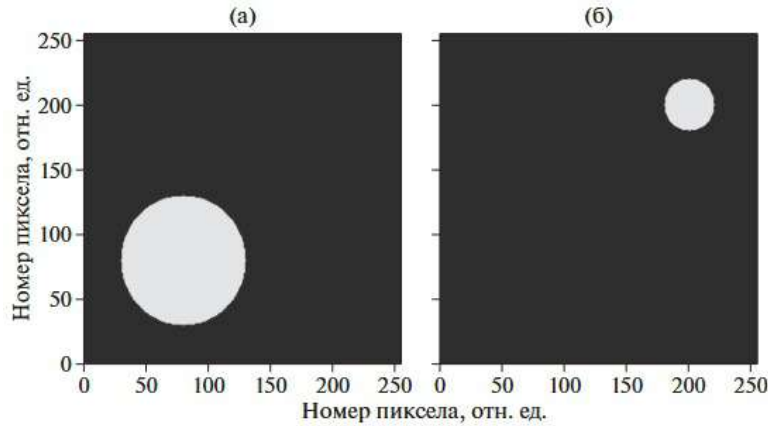


Рисунок 4.33 — Фантом, использованный в модельном эксперименте. распределение первой (а) и второй (б) компоненты. Белый цвет соответствует объекту, черный - фону.

понент объекта. Компоненты пространственно разделены (рис. 4.33), т.е. в одном пикселе одновременно не может быть двух компонент. Левое изображение (рис. 4.33а) – распределение первой компоненты. Правое изображение (рис. 4.33б) – распределение второй компоненты. Ослабляющие свойства компонент рассчитывались с помощью [136]. На рисунке 4.34а представлены распределения линейных коэффициентов первой и второй компонент модельного объекта. Модельный спектр, использованный для расчета сигналов, приведен на рисунке 4.34б. Значения сигналов рассчитывались с использованием выражения 5.28. Будем восстанавливать распределение компонент в одном центральном

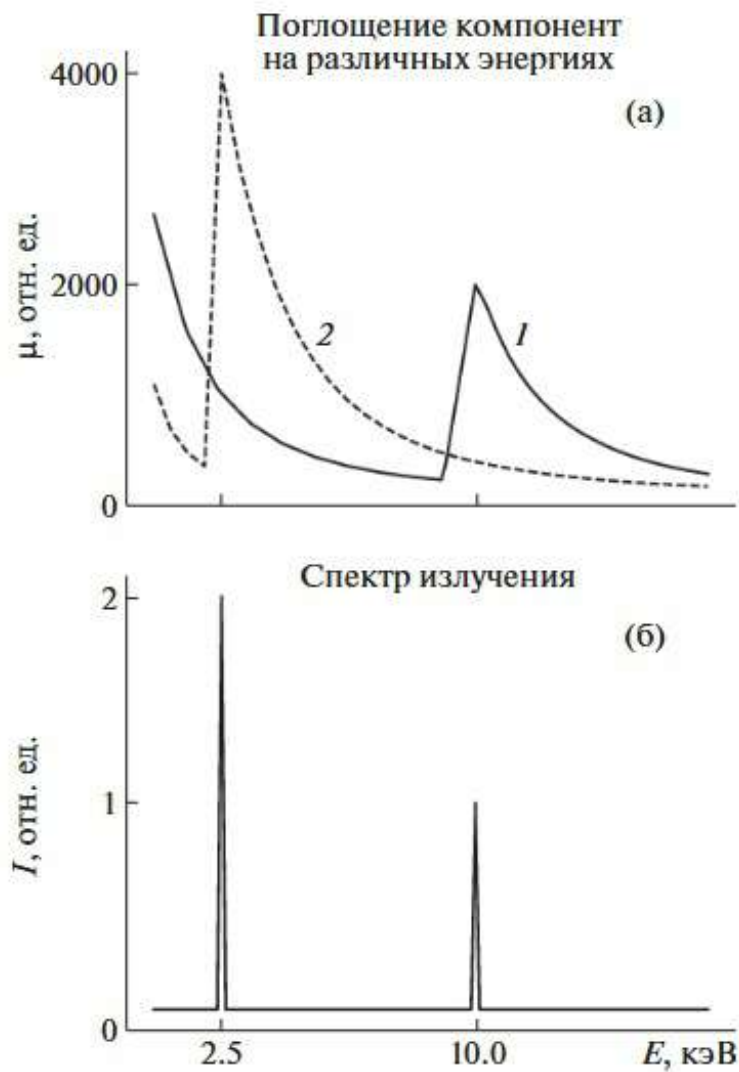


Рисунок 4.34 — Зависимость коэффициентов ослабления рентгеновского излучения компонентами фантома от энергии. Крайя поглощения для первого - 10 кэВ и второго - 2.5 кэВ (а). Спектр, использованный для расчета синограммы (б).

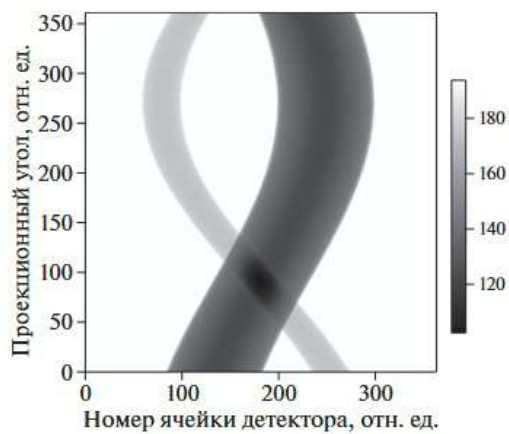


Рисунок 4.35 — Модельная синограмма.

сечении объекта. Система «источник-детектор» неподвижна. Объект вращается вокруг оси. Детектор позиционно-чувствительный. Запишем линейный коэффициент ослабления как линейную комбинацию вкладов $c_1(l)$ и $c_2(l)$ от двух компонент с коэффициентами $\mu_1(E)$ и $\mu_2(E)$, соответственно:

$$\mu(l, E) = c_1(l)\mu_1(E) + c_2(l)\mu_2(E). \quad (4.40)$$

Здесь l определяет положение некоторой точки внутри центрального сечения. Поскольку мы предположили, что в одном пикселе не может находиться сразу две компоненты, оптимизационную задачу можно переформулировать. Будем минимизировать на наборе ограничений:

$$\begin{cases} c_1 \geq 0, \\ c_1 \leq 1, \\ c_2 \geq 0, \\ c_2 \leq 1 \end{cases} \quad (4.41)$$

функционал следующего вида:

$$F(c_1, c_2) = Q(c_1, c_2) + \beta \|c_2 \circ c_2\|_2. \quad (4.42)$$

Регуляризирующий член представляет собой сумму квадратов перемноженных компонент векторов c_1 и c_2 . Параметр β регулирует вклад слагаемых. Для решения использован подход, в котором ограничения учитываются с помощью логарифмических барьеров:

$$F(c_1, c_2) = Q(c_1, c_2) + \beta \|c_2 \circ c_2\|_2 - \frac{1}{s} (\lg(-c_1) + \lg(-c_2) + \lg(1 - c_1) + \lg(1 - c_2)) \quad (4.43)$$

Вдали от границы логарифмические штрафы не влияют на оптимизируемый функционал. При приближении к границе значения быстро растут. Параметр s регулирует степень близости к границам. Метод градиентного спуска использован для решения оптимизационной задачи.

При решении оптимизационной задачи использовались следующие значения параметров: $\beta = 0.05$, $s = 1$. Были рассчитаны 1800 итераций. Стартовое значение функционала – 2011.8, значение на момент останова – 19.2. Использованное для реконструкции число итераций равно 1800. Реконструкция проводилась двумя методами: FBP (рис. 4.36а) и предложенным методом

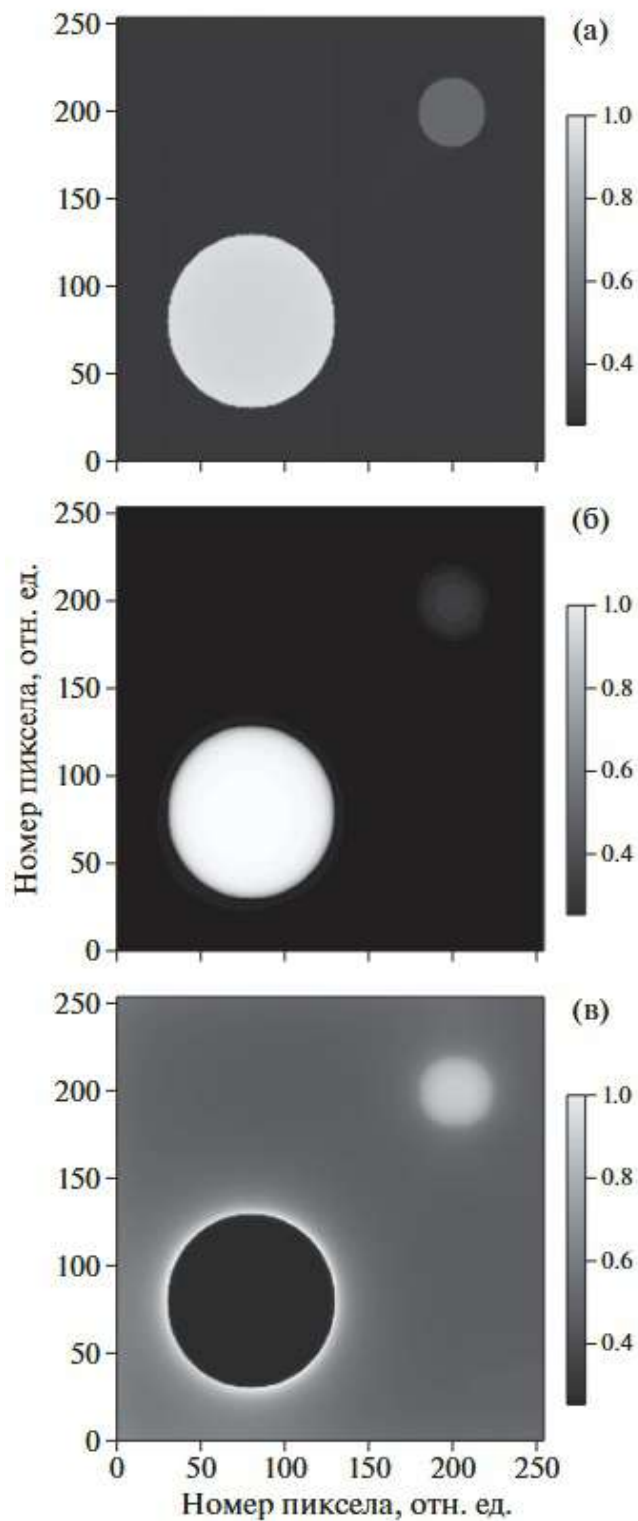


Рисунок 4.36 — Результат реконструкции методом FBP (а). Результат реконструкции распределений первой (б) и второй (в) компонент предложенным методом.

(рис. 4.36б, 4.36в). Три представленные изображения дополняют друг друга. Результат реконструкции методом FBP предъявляет объект целиком, не давая никаких указаний к интерпретации. Это реконструкция распределения усред-

ненного по энергиям значения линейного коэффициента ослабления. Несмотря на то, что термин «усредненный» используется во многих публикациях, его значение точно интерпретировать без учета априорных знаний о составе зондируемого объекта не представляется возможным. Это связано с тем, что каждый химический элемент имеет свою зависимость линейного коэффициента ослабления от энергии и суммарное ослабление не аппроксимируется только линейной комбинацией μ в показателе экспоненты. На рисунке 4.36б представлено распределение концентрации первой компоненты. Распределение c_2 (рис. 4.36в) показывает не только местоположение второй компоненты, но и указывает на полное отсутствие первой в нижнем левом углу. Однако вывод о том, что гало вокруг места отсутствия первой – это артефакт, можно сформулировать только после совместного анализа полученных результатов на рис. 4.36в и 4.36а.

4.6 Метод реконструкции цифрового изображения полного объема в условиях ограничений на используемую память

Как уже было сказано в предыдущих разделах, сегодня большинство томографических измерений выполняется не на станциях синхротронов, как в конце прошлого столетия, а в лабораторных условиях. Чтобы сократить время измерения, монохроматоры в оптический тракт не устанавливаются. Т.е. зондирование ведется конусным полихроматическим пучком. Если раствор конуса широкий (рис. 4.37), то процедура послойной реконструкции цифрового 3D изображения объекта становится неприменимой, т.е. при использовании интегральных методов реконструкции необходим объем памяти для одновременного размещения всех собранных проекций и восстанавливаемого воксельного объема, а при использовании алгебраических потребуется место для хранения, как минимум еще одного воксельного объема, требуемого для расчета градиента. Для повышения пространственного разрешения пользователи томо-

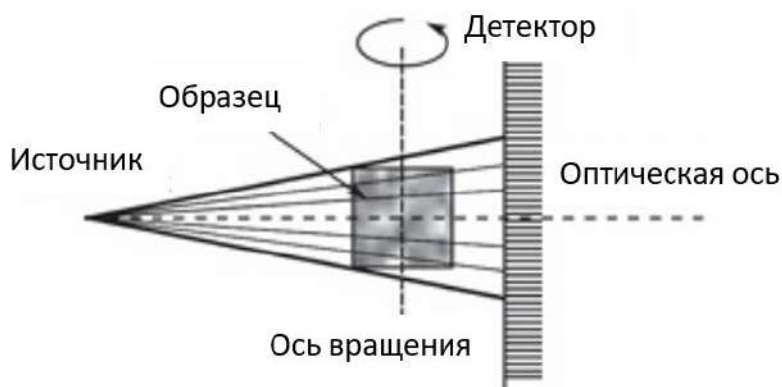


Рисунок 4.37 — Принципиальная схема томографических измерений в конусной схеме.

графов стараются устанавливать детекторы с малыми размерами ячеек. Чтобы построить цифровое изображение большого объекта с высоким разрешением сегодня используются мегапиксельные детекторы с числом пикселей порядка четырех тысяч в одном направлении. Если мы хотим, чтобы число неизвестных в задаче было приблизительно равно числу наблюдаемых значений, т.е. число проекционных углов приблизительно равно числу ячеек детектора в одном из направлений, то речь идет о следующих размерах данных. Число ячеек детектора для регистрации проекции - 1.6×10^7 , а число вокселей вос-

становливаемого объема - 6.4×10^{10} . Уменьшение размера ячейки детектора приводит к уменьшению числа квантов, попадающих в нее, т.е. ухудшается отношение «сигнал-шум». Для улучшения ситуации можно было бы увеличить экспозицию, но тогда возрастет дозовая нагрузка на объект. Т.е. этого делать не желательно. Алгебраические методы, способные работать в условиях плохого отношения «сигнал-шум» являются времязатратными. Один из способов ускорить вычисления – это перенести вычисления на GPU. Однако память графических процессоров ограничена. Разбить объем на субобъемы и восстанавливать каждый субобъем с использованием обычных алгоритмов реконструкции не удастся, поскольку при повороте объекта разные локальные объемы попадают в выделяемый субобъем. Предложено [137] разбивать восстанавливаемый объем на субобъемы и решать задачу в следующей постановке. Пусть $\mathbf{p}$ - вектор линеаризованных измеренных значений, W - проекционная матрица, $\mathbf{x}$ - искомое решение. При отсутствии ограничений на требуемый для вычислений объем памяти, задача поиска решения системы линейных уравнений

$$W\mathbf{x} = \mathbf{p} \quad (4.44)$$

сводится к оптимизационной задаче поиска минимума функционала вида:

$$\Phi(\mathbf{x}) = (1 - \alpha)\|\mathbf{p} - W\mathbf{x}\|^2 + \alpha R(\mathbf{x}). \quad (4.45)$$

Здесь α определяют вклад каждого из слагаемых в оптимизируемое выражение, $R(\mathbf{x})$ - линейная комбинация регуляризирующих операторов, область определения которых - векторное пространство решений. После разбиения объема на субобъемы ограниченного размера необходимо переформулировать оптимизационную задачу. Введем невязку с учетом значений вектора решений на $(i - 1)$ итерации:

$$\Delta = \mathbf{p} - W\mathbf{x}^{i-1}, \quad (4.46)$$

запишем лучевые суммы для пикселей субобъема:

$$SUM_{local}^{i-1} = W^{local}\mathbf{x}^{i-1}. \quad (4.47)$$

Перепишем систему уравнений, которую будем решать, в виде:

$$W^{local}\mathbf{x} = \Delta + SUM_{local}^{i-1}. \quad (4.48)$$

Чтобы найти решение системы, будем минимизировать следующий функционал:

$$(1 - \alpha) \|W^{local} \mathbf{x} - (\Delta + SUM_{local}^{i-1})\|^2 + \alpha R(\mathbf{x}) \rightarrow \min. \quad (4.49)$$

Для выбора метода минимизации построим выражение, которое связывает предоставляемый объем памяти и размер локального объема. Рассмотрим модель измерения. Пусть объект вращается вокруг оси. Пара источник-детектор неподвижна. Источник рентгеновского излучения является точечным. Вектор линеаризованных значений проекций $\mathbf{p}$ имеет размер $N^{dx} \times N^{dz} \times N^\varphi$. Здесь N^{dx} - число пикселей в линейке детектора, N^{dz} - число строк детектора и N^φ - число проекционных углов. Используется воксельное представление реконструируемого объекта. Покроем сеткой вокселей пространство куба, в котором будет формироваться цифровое изображение томографируемого объекта. Линейный размер вокселя h_V свяжем геометрическим соотношением с размером пикселя изображения томографической проекции h_d :

$$h_V = h_d \frac{SO}{SD}. \quad (4.50)$$

Здесь SO – расстояние источник - ось вращения, SD – расстояние источник-плоскость окна детектора. Количество вокселей в восстанавливаемом объеме $N^x \times N^y \times N^z$, где $N^x = N^y = N^{dx}$, а $N^z = N^{dz}$. Размер вектора решения $\mathbf{x}$ составляет $N^x \times N^y \times N^z$. Чтобы реализовать итерацию метода минимизации необходима память для размещения нескольких областей размера вектора измерений и нескольких областей размера вектора решений. Точное количество областей зависит от используемого итерационного метода. В Таблице 2 указано требуемое количество векторов для реализации трех итерационных методов: метода градиентного спуска с постоянным шагом, метода наискорейшего спуска и метода сопряженных градиентов.

№	Название метода	Кол-во векторов $\mathbf{x}$ (S)	Кол-во векторов $\mathbf{p}$ (M)
1	Метод градиентного спуска	3	3
2	Метод градиентного спуска с регуляризацией	3	3
3	Метод наискорейшего спуска	3	5
4	Метод наискорейшего спуска с регуляризацией	3	5
5	Метод сопряженных градиентов	4	5
6	Метод сопряженных градиентов с регуляризацией	4	5

Таблица 2

Будем разбивать восстанавливаемый объем на последовательность локальных объемов (субобъемов), как это показано на рисунке 4.38. Для расчета

количества слоев локального объема N_{local}^z , будем использовать выражение, которое связывает N_{local}^z и доступный для вычислений объем памяти Π в байтах:

$$\sim S \times N^x \times N^y \times N_{local}^z \times 4 + M \times N^{dx} \times N_{local}^{dz} \times N^\varphi \times 4 = \Pi. \quad (4.51)$$

Здесь S и M - величины из таблицы. Предполагается, что переменная занимает

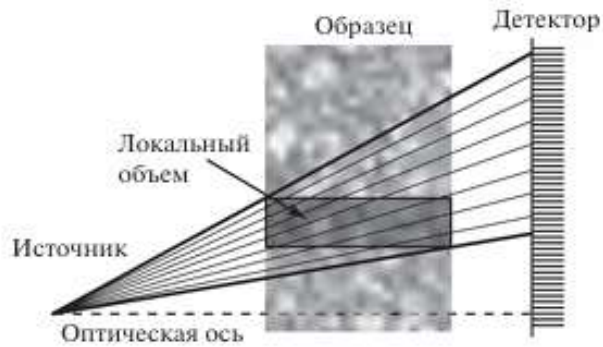


Рисунок 4.38 — Схема разбиения на субобъемы.

4 байта (FLOAT). Если зафиксировать количество слоев субобъема, то в зависимости от их удаленности от оптической оси, количество соответствующих им строк детектора будет разным. Соотношение толщины локального объема и требуемое число строк детектора легко рассчитывается из геометрии измерения. В использованной для расчетов, результаты которых обсуждаются ниже, программной реализации метода наискорейшего спуска взята верхняя граница для данной величины, т.е. оценка для самого верхнего или самого нижнего субобъема. Для модельных расчетов в качестве 3D фантома был использован цилиндр, все горизонтальные сечения которого одинаковы и представляют собой фантом Шеппа-Лога (рис. 4.39). Параметры модельных расчетов: число строк детектора – 100, 525 ячеек детектора, физический размер ячейки детектора – 11 мкм, расстояние источник-объект – 55 мм, расстояние источник-детектор – 225 мм, схема измерения конусная. Проекционные данные рассчитаны для интервала углов 0-180°, величина проекционного угла - 0.2°. Чтобы визуально сравнить точность реконструкции в местах сшивки субобъемов, были проведены три эксперимента. Провели реконструкцию без деления на локальные объемы, провели реконструкцию, разделив объем на два субобъема и на четыре субобъема. Локальные объемы перекрывались на 1/6 толщины. Представлены расчеты для десяти итераций. Следов сшивки субобъемов на вертикальных сечениях реконструированного цифрового изображения из модельных проекций без шума визуально обнаружить не удалось. На рисунке 4.40 представлено гори-

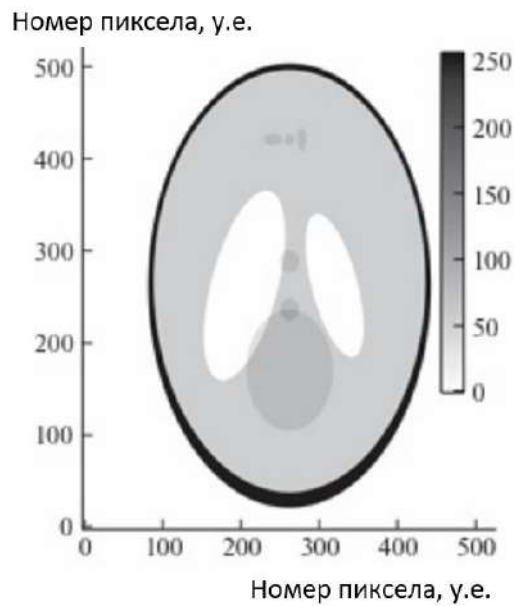


Рисунок 4.39 — Горизонтальное сечение цилиндрического объема.

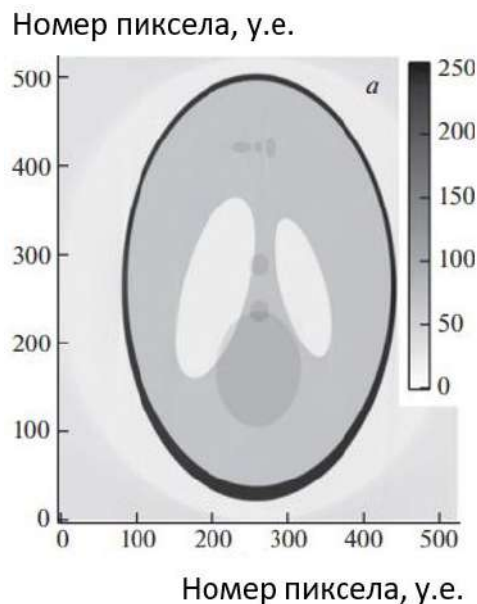


Рисунок 4.40 — Горизонтальное сечение восстановленного цифрового изображения в месте сшивки.

горизонтальное сечение цифрового изображения, восстановленного предложенным методом. Горизонтальное сечение выбрано в месте сшивки локальных объемов (эксперимент с 4 субобъемами). Сравнение центрального профиля того же сечения (серая кривая) и профиля фантома (черная кривая) приведено на рисунке 4.41. Пример использования предложенного метода для реконструкции цифрового изображения из набора реально измеренных проекций представлен на рисунке 4.42. На вертикальном сечении в некоторых областях просматриваются следы сшивки. Создание высокоразрешающих регистрирующих устройств

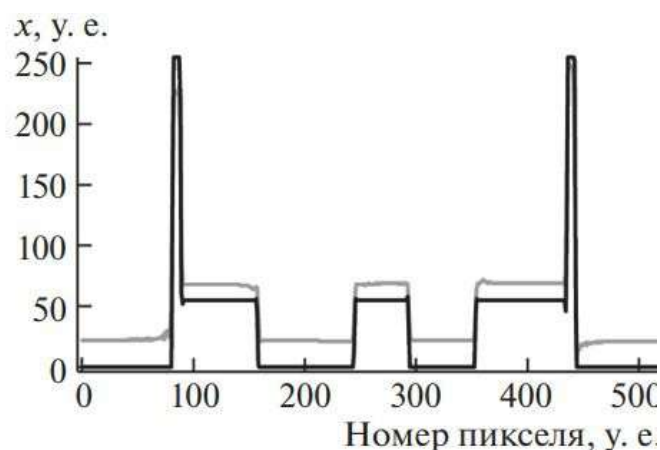


Рисунок 4.41 — Два центральных профиля. Профиль восстановленного сечения – серая линия, профиль фантома – черная линия.

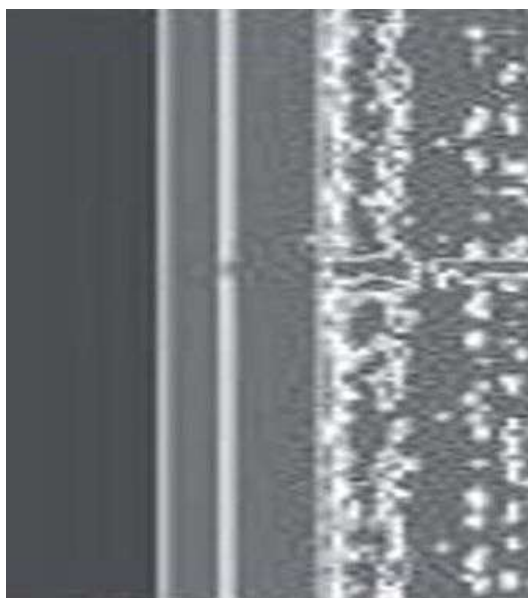


Рисунок 4.42 — Результат реконструкции из измеренных проекций (участок).
Вертикальное сечение восстановленного цифрового изображения.

со спектральным разрешением приведет к дополнительному увеличению объема данных, которые будут загружаться в вычислитель. Предложенный метод скорее всего найдет свое место и при решении задач высокоразрешающей спектральной компьютерной томографии.

4.7 Повышение быстройдействия. Метод автоматического определения минимального размера значимой области на томографических проекциях

Поскольку томографическая реконструкция выполняется из проекций, собранных в разных условиях, то и подходы к ускорению этого процесса могут быть разными. Далее будут рассмотрены 4 предложения по увеличению быстройдействия, рассмотрены их преимущества и недостатки.

1. Предложение – использовать интегральные методы реконструкции, а не алгебраические. Проведен эксперимент по сравнению динамики сходимости к точному решению интегральных и алгебраических методов в условиях увеличивающегося числа проекций [138]. Заключение по итогам эксперимента – интегральные методы сильно уступают алгебраическим по точности, но алгебраические существенно проигрывают по времени исполнения. Вывод – необходимо ускорять алгебраические методы.

2. Предложение – использовать графические карты для ускорения алгебраических методов. Проблема – не возможно использовать стандартные алгебраические методы типа ART, SART, SIRT, поскольку возникают ограничения по памяти. В разделе 4.6 данная проблема рассматривалась. Для выполнения на GPU операций прямого и обратного проецирования для проекций небольшого размера появляются программные пакеты с открытым исходным кодом, эффективно реализованные и поддерживаемые сообществом ученых, работающих в области решения задач реконструкции [139].

3. Предложение – использовать алгоритмическое ускорение операторов прямого и обратного проецирования. Автором диссертационного исследования предложено использовать быстрое преобразование Хафа для расчета операторов.

4. Предложение – сократить объем входных данных, подаваемых на вход реконструктору, за счет автоматического уменьшения площади проекций без потери точности реконструкции.

Рассматривать предложение 1 начнем с описания эксперимента по сравнению динамики сходимости интегрального и алгебраического подходов к реконструкции.

Принципиальное различие между интегральным и алгебраическим подходами [140] к томографической реконструкции состоит в следующем. В интегральных методах восстанавливаемая функция рассматривается как непрерывная во время построения всей последовательности операций, т.е. вплоть до этапа вычислений. Алгебраические методы начинают работать с дискретным изображением (кусочно-постоянной функцией) уже на этапе постановки задачи. Задача томографической реконструкции превращается в задачу решения системы линейных уравнений. Программный комплекс STE, созданный под научным руководством автора, был использован для расчетов [141]. В эксперименте участвовало шесть 2D изображений горизонтальных сечений модельных объектов размером 512x512 пикселей (рис. 4.43). Это цифровые описания горизонтальных сечений реальных физических фантомов, представляющих собой цилиндры. Фантомы используются для калибровки томографических установок. Параметры фантомов CTR401, CTR515, CTR528 описаны в деталях в работе [142]. CTR401 содержит внутри объема, ограниченного толстой стенкой, параллелепипеды и шары разных размеров и разного состава, представленные тонкими прямоугольниками и кругами разной яркости на горизонтальном сечении (рис. 4.43, верхний ряд, левый рисунок). Сечение CTR515 состоит из серии круглых включений различного диаметра, имеющих три уровня яркости (рис. 4.43, верхний ряд, рисунок в центре). В фантоме CTR528 внутри цилиндра с толстыми стенками расположено множество параллелепипедных вставок, ширина которых составляет от 1 до 21 пикселя (рис. 4.43, верхний ряд, правый рисунок). Вставки сгруппированы. Каждая группа имеет свой период. Описание фантома American College of Radiology (ACR) приводится в работе [143] (рис. 4.43, нижний ряд, левый рисунок). Сечение содержит восемь ромбовидных элементов и четыре внешних круга малого диаметра, предназначенных для выравнивания фантома относительно оптической оси. В фантом Jaszczak [144] добавлены шесть шаров равномерно увеличивающихся диаметров. От 36 до 120 пикселей (рис. 4.43, нижний ряд, рисунок в центре). Последний фантом, предложенный в работе Kak and Slaney [145], содержит множество групп многоугольных сеток и шаровых элементов разного размера и состава, включая концентрическое расположение (рис. 4.43, нижний ряд, правый рисунок).

Лучевые суммы были рассчитаны с использованием модели 1.15 для диапазона углов от 0° до 180° с шагом $0,5^\circ$. Пример синограммы приведен на рис. 4.44. Интегральный метод свертки и обратного проецирования и два ал-

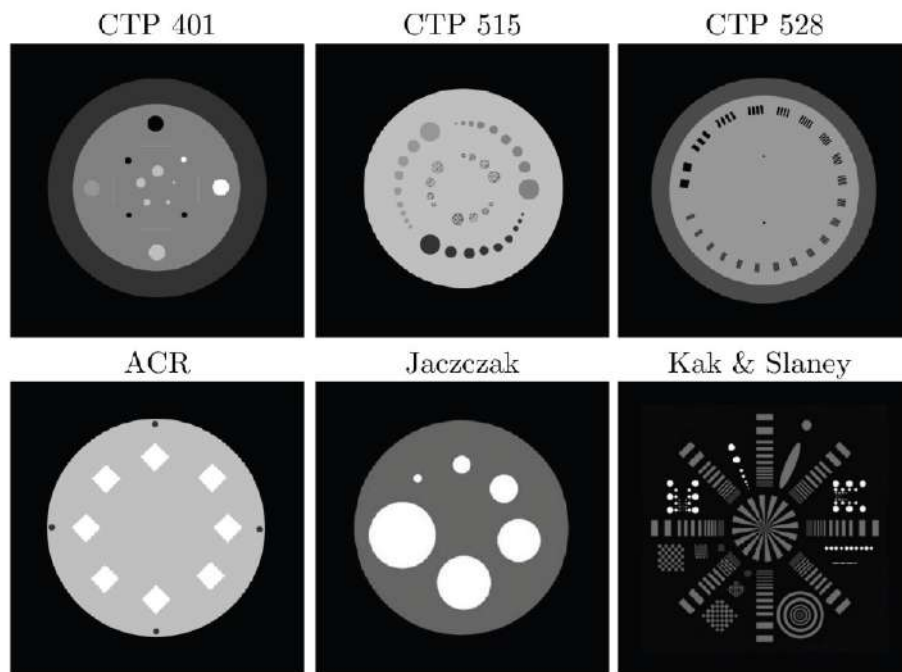


Рисунок 4.43 — Изображения фантомов, использованных в модельном эксперименте, размером 512x512 пикселей.

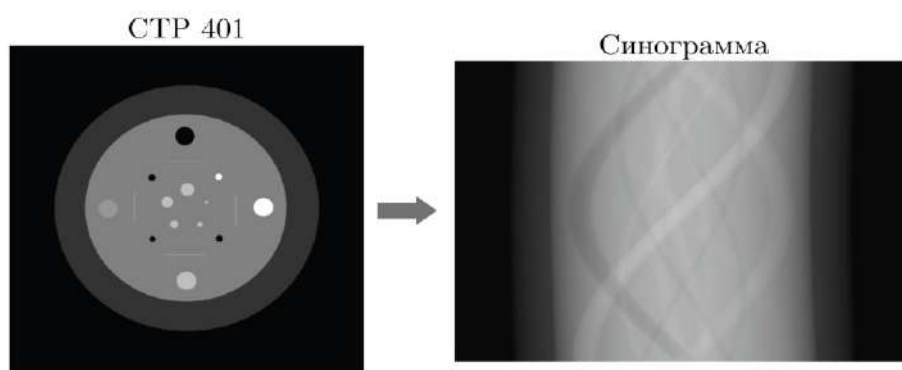


Рисунок 4.44 — Изображение фантома СТР401(слева). Синограмма, рассчитанная в диапазоне проекционных углов от 0° до 180° (справа).

гебраических метода с регуляризацией и без нее участвовали в эксперименте. В итерационных алгоритмах были рассчитаны 100 итераций. В ходе эксперимента каждым из трех методов (интегральным, алгебраическим и алгебраическим с регуляризацией) рассчитывались по 72 частичные реконструкции по проекциям каждого из 6 фантомов по следующей схеме. Первая реконструкция выполнялась с использованием 5 проекций, вторая реконструкция – с использованием 10 проекций и т.д. Последняя реконструкция с использованием всех 360 проекций. Проекция для каждой реконструкции цифрового изображения фантома выбирались случайно. На рис. 4.45 представлены частичные реконструкции, выполненные методом свертки и обратного проецирования по

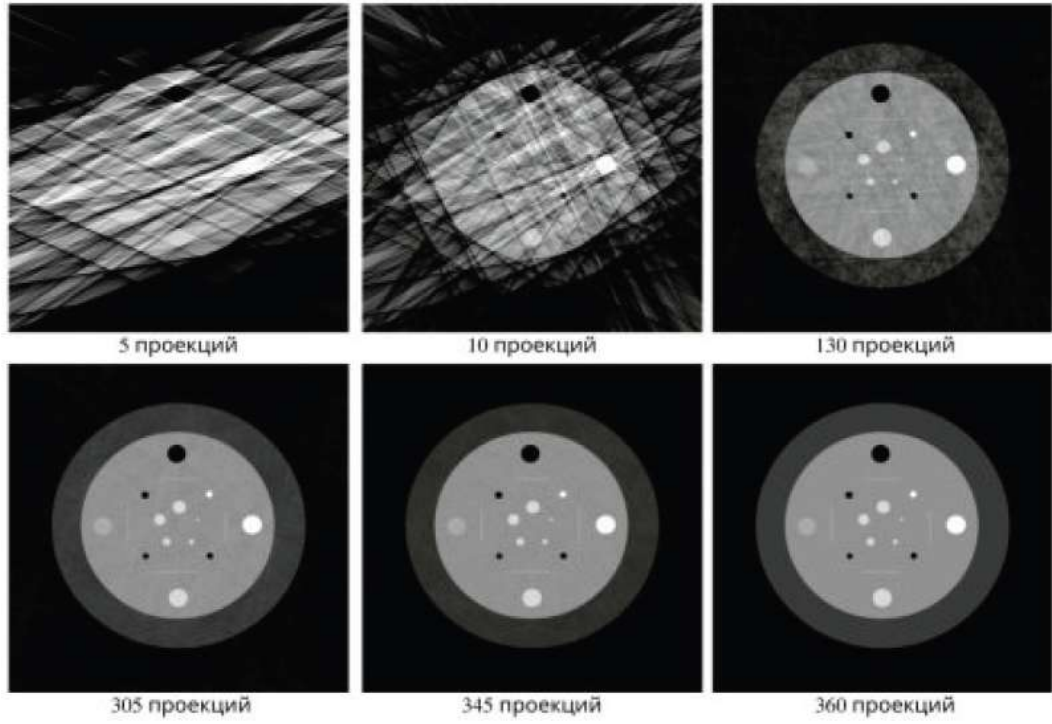


Рисунок 4.45 — Частичные реконструкции, выполненные с использованием алгоритма FBP для объекта СТР401.

проекциям, рассчитанным для фантома СТР 401. Ошибка оценивалась величиной среднеквадратичного отклонения результата реконструкции $R_{current}$ от значения фантома Θ в каждой точке модельного эксперимента:

$$RSRE(R_{current}, \Theta) = \sum_i (R_{current}^i - \Theta^i)^2. \quad (4.52)$$

Здесь i – номер пиксела, $R_{current}^i$ – реконструированное значение в i -ом пикселе, Θ^i – значение фантома. Значения $RSRE$ были рассчитаны для всех частичных реконструкций для каждого из 6 фантомов. Затем значения усреднялись, каждое по 6 изображениям, соответствующим текущему количеству проекционных углов. Зависимость усредненных значений среднеквадратичного отклонения от числа проекционных углов приведена на рисунке 4.46 пунктирной линией. Значения точек сплошной линии рассчитывались следующим образом. Задавался уровень ошибки. Для реконструкции каждого объекта использовалось то количество проекций, которое было необходимо, чтобы достигнуть выбранного уровня ошибки. Затем все необходимые количества проекций усреднялись. Анализ представленных на рисунке 4.46 результатов позволяет сделать следующие выводы.

1. Даже в идеальных условиях (в частности, при отсутствии шума) при использовании максимального числа проекций для реконструкции, точность

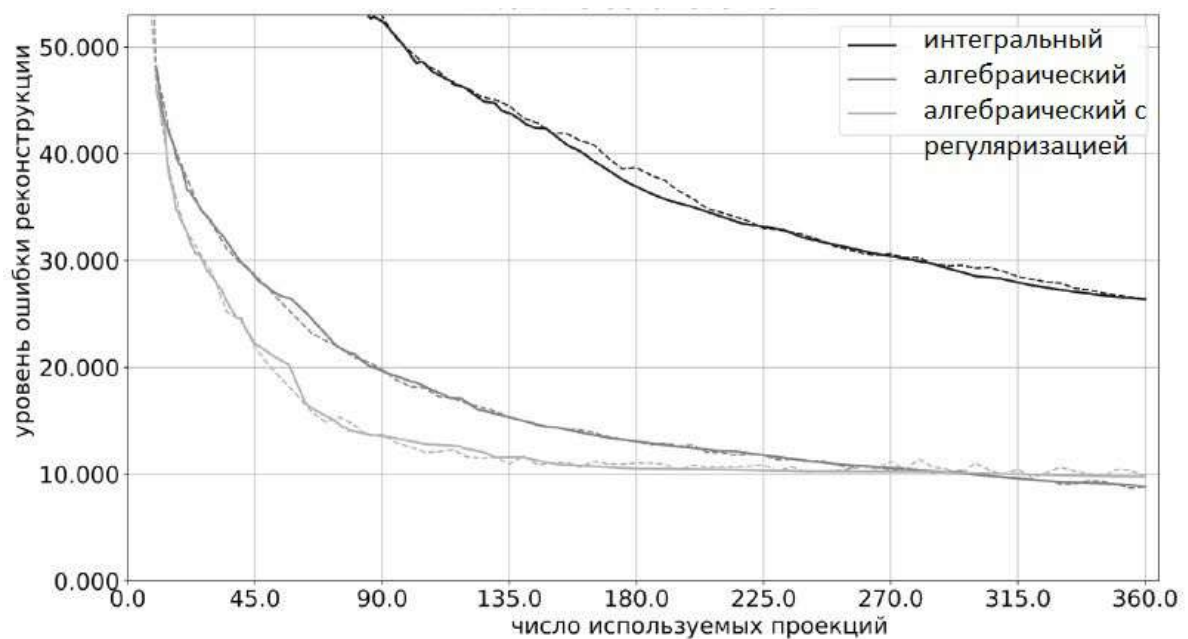


Рисунок 4.46 — Динамика поведения ошибки реконструкции.

реконструкции интегральным методом ниже, чем при использовании алгебраических методов.

2. Влияние регуляризации в алгебраических методах сильнее при малом числе проекций. Влияние ослабевает по мере увеличения числа проекционных углов.

Для уменьшения вычислительного времени автором было предложено использовать быстрое преобразование Хафа [146] для подсчета лучевых сумм (предложение 3). Для быстрой реализации алгебраического метода в параллельной схеме необходимо внести изменения в итерационную процедуру [147]. Поскольку в алгебраических методах дискретизация выполняется на начальном этапе, правомерно использовать дискретную модель луча, не наилучшим образом приближающую прямую, а модель дискретных симметричных лучей-ступенек (рис. 4.47). Это позволит ускорить операцию суммирования вдоль луча. Приближение прямых ступеньками обладает симметрией. Оно применяется для расчетов быстрого преобразования Хафа, для случая прямых на плоскости и в пространстве – это одна из аппроксимаций преобразования Радона. Быстрое преобразование Хафа, выполненное над изображением x размером $M_s \times M_s$ — это изображение p размером не более чем $2M_s \times M_s$, в каждом пикселе которого записана сумма значений пикселей изображения x вдоль соответствующих лучей. По строкам записаны суммы вдоль лучей с одинаковым углом наклона, а по столбцам – суммы вдоль лучей с одинаковым отступом

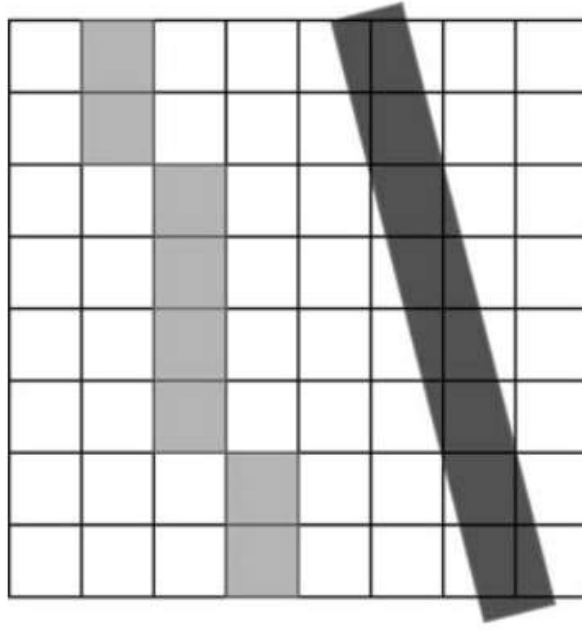


Рисунок 4.47 — Модели лучей. Слева - модель луча с использованием симметричных лучей-ступенек, справа - модель, наилучшим образом приближающая прямую.

от края изображения. Полное преобразование Хафа можно считать быстро за $O(M_s^2 \log M_s)$, где M_s — линейный размер изображения, для которого рассчитывается преобразование [146]. Если к началу итерационной процедуры измерены и линеаризованы все проекции, то применима следующая последовательность шагов. Для каждого угла $\varphi_j, j = 1, \dots, M_\varphi$ рассчитаем изображение, столбцы которого будут иметь постоянные значения, а в строках будут записаны невязки, соответствующие различным сдвигам проекций:

$$r_{lk}^{\varphi_j} = \frac{p_{jk} - \sum_i l x_i w_{ki}^{\varphi_j}}{w_{\varphi_j}^2}. \quad (4.53)$$

Здесь k - сдвиг, i - индекс, по которому проводится суммирование и который индексирует изображение линейным образом, $w_{ki}^{\varphi_j}$ — элемент матрицы оператора прямого проецирования для соответствующего пиксела при значении проекционного угла φ_j . l индексирует рассчитываемые изображения. После того, как рассчитаны все изображения с невязками, повернем каждое из них на соответствующий угол и сложим с исходным:

$$x^k = x^{k-1} + \gamma \sum_{j=1, \dots, M_\varphi} \text{rotate}(\mathbf{r}^{\varphi_j}, \varphi_j). \quad (4.54)$$

Введем следующие обозначения:

$$q_l^\varphi = (\mathbf{p} - W\mathbf{x})_{\varphi l}, l \in M_s, \quad (4.55)$$

$$r_{kl}^\varphi = q_l^\varphi, k, l \in M_s. \quad (4.56)$$

Здесь q_l^φ – строка невязок длины M_s для текущей итерации для пикселей синогаммы, соответствующих углу φ , а r_{kl}^φ – изображение размера $M_s \times M_s$, для которого значения по столбцам постоянны и равны q_l^φ . Будем нумеровать лучи для одного проекционного угла, т.е. для любого φ , слева направо в порядке их отступа от края.

Чтобы рассчитать вклад, формируемый лучами направления φ , в финальную поправку текущего решения необходимо повернуть изображение $\mathbf{r}_\varphi$ на угол φ и, взвесив на релаксационный параметр, прибавить к текущему решению

$$\mathbf{x}^{m+1\varphi} = \mathbf{x}^m + \gamma \cdot \text{rotate}(\mathbf{r}^\varphi, \varphi). \quad (4.57)$$

Две операции эквивалентны:

$$W^{\varphi T}(\mathbf{p} - W\mathbf{f}) = \text{rotate}(\mathbf{r}^\varphi, \varphi). \quad (4.58)$$

Теперь запишем накопленную по всем углам поправку к решению в следующем виде:

$$\Delta \mathbf{x} = \sum_{\varphi} W^{\varphi T}(\mathbf{p} - W\mathbf{x}) = \sum_{\varphi} \text{rotate}(\mathbf{r}^\varphi, \varphi) = W^T(\mathbf{p} - W\mathbf{x}). \quad (4.59)$$

Наконец введены все обозначение и операции, необходимые для построения быстрого алгоритма реконструкции. Запишем функционал невязки между линеаризованными значениями измерений и значениями, рассчитанными с использованием модели линеаризованной проекции и ступенчатой модели луча:

$$Q(\mathbf{x}) = (\mathbf{p} - W\mathbf{x})^2. \quad (4.60)$$

Будем искать минимум записанного функционала методом градиентного спуска. Для этого рассчитаем градиент:

$$\nabla Q(\mathbf{x}) = 2W^T(\mathbf{p} - W\mathbf{x}) \quad (4.61)$$

и выпишем один шаг градиентного спуска:

$$\mathbf{x}^{m+1} = \mathbf{x}^m - \lambda W^T(\mathbf{p} - W\mathbf{x}). \quad (4.62)$$

Последовательное применение двух быстрых преобразований Хафа (первое при расчете $\mathbf{p} - W\mathbf{x}$ и второе при расчете умножения W^T на матрицу невязки) и позволяет улучшить асимптотику вычислений с $O(M_s^3)$ до $O(M_s^2 \log M_s)$ [147]. Был

проведен модельный эксперимент с использованием модельных изображений разных размеров. Модельное изображение, его Хаф-сумма и результат реконструкции (100 итераций) описанным методом приведены на рисунке 4.48. На

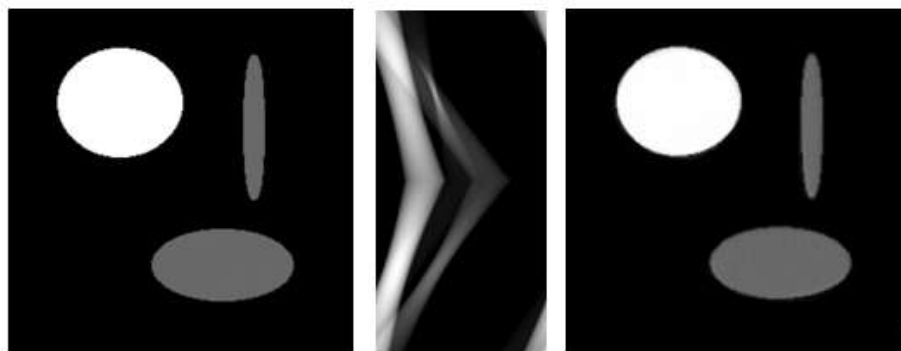


Рисунок 4.48 — Слева - изображение фантома, по центру - Хаф-сумма, справа - результат реконструкции.

рис. 4.49 приведен график функции $C(n^2 \log n)$, на котором крестиками отмечены результаты по времени реконструкции, выполненной для линейаризованных проекций модельных изображений разных размеров. В эксперименте рассчиты-

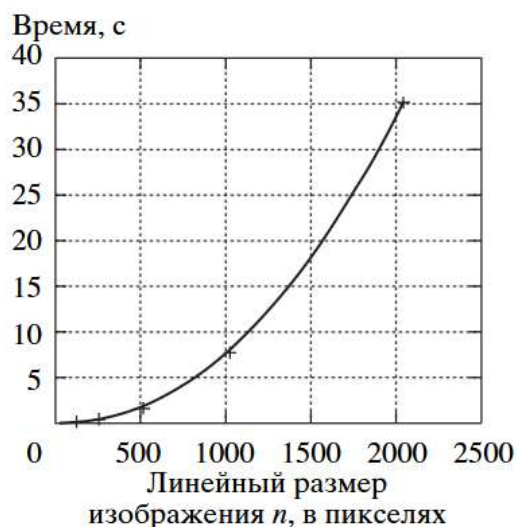


Рисунок 4.49 — Время вычисления 30 итераций. Непрерывная кривая - функция $C(n^2 \log n)$, крестиками отмечен результат измерения времени расчета.

вались по 30 итераций для каждого из фантомов. Метод ускорения операции обратного проецирования может быть применен и в том случае, когда геометрия эксперимента не позволяет свести задачу к послойной двумерной реконструкции, т.е. при использовании конусных пучков для зондирования. Наивное применение трехмерного быстрого преобразования Хафа к задаче томографической реконструкции оказывается невозможным по двум причинам. Во-первых,

схема расчета оказывается не эффективной, в силу того, что рассчитывается большое число частичных сумм для направлений, которых нет в томографическом эксперименте (вдоль вертикальной оси детектора). Во-вторых, в отличие от двумерного случая, в трехмерном случае не существует простого соответствия между прямым и обратным преобразованием Хафа. В 2022 году был предложен метод обращения быстрого трехмерного преобразования Хафа с предпосчетом [148], позволивший создать алгоритм томографической реконструкции с асимптотической сложностью $C(n^{3,5})$. Для больших размерностей это существенное ускорение по сравнению с классическими алгоритмами, имеющими асимптотическую сложность $C(n^4)$.

Сокращение объема входных данных, передаваемых в реконструктор, повысит быстродействие вне зависимости от применяемого метода и его численной реализации (предложение 4). Уменьшить объем данных можно, обрезав неинформативную площадь на каждой проекции. Это можно было бы легко сделать пороговой обработкой, если бы проекции не содержали шума. Результат применения пороговой обработки к изображению интегральной проекции представлен на рисунке 4.50. Часть объекта обрезана. в диссертационном исследовании

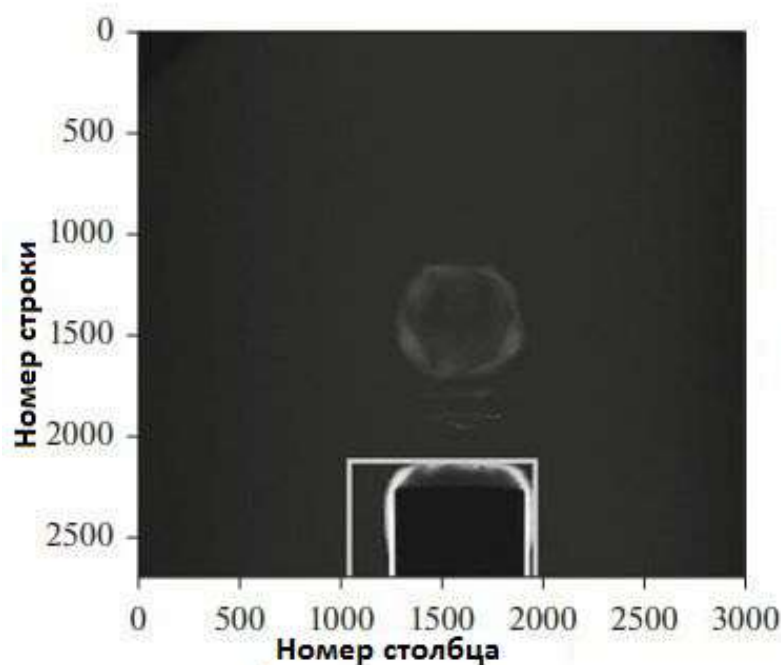


Рисунок 4.50 — Изображение интегральной проекции с автоматически выделенной областью интереса

предложен автоматический метод анализа пикселей проекций с целью сокращения объема передаваемых в реконструктор данных. Метод может быть описан

последовательностью шагов: расчет изображения интегральной проекции, удаление шума, контрастное растяжение, бинаризация, поиск границ минимальной осесимметричной области. Выполнение последнего шага необходимо для обеспечения возможности применения быстрых алгоритмов реконструкции. Далее представлено пошаговое описание метода с обоснованием введенных шагов. Пусть на вход реконструктору передается серия 2D томографических проекций размером $M \times N$. Это соответствует количеству ячеек позиционно-чувствительного детектора. Каждая ячейка детектора имеет некоторый динамический диапазон:

$$G \subset \mathbb{N} \cup \{0\}. \quad (4.63)$$

Свяжем декартову систему координат с каждой 2D-проекцией. Пусть система координат задана следующим образом: элементом проекции с координатами $(0, 0)$ является верхний левый угол, ось X проходит вправо, а ось Y - вниз. Каждая проекция описывается функцией:

$$P_k(x, y) : V \times H \rightarrow G, \quad (4.64)$$

где $V = \overline{(0 \dots M)}$, $H = \overline{(0 \dots N)}$. Эта функция описывает простое соответствие между ячейками детектора и значениями интенсивности сигнала, регистрируемыми во время k -го измерения. Таким образом, весь вектор двумерных проекций может быть описан функцией:

$$P_k(x, y, k) : v \times H \times J \rightarrow G, \quad (4.65)$$

где $J = \overline{(0 \dots K)}$ и K - количество проекций. Каждый индекс проекции соответствует углу поворота образца. Текущий угол поворота θ легко определить по индексу k с помощью простого соотношения $\theta = k\theta_{\text{step}}$, где θ_{step} - это шаг углового поворота, задаваемый оператором или автоматически заданными параметрами экспериментальной установки. Тогда задача состоит в том, чтобы определить на каждой проекции ROI (Region of Interest) как область, которая регистрирует лучи, прошедшие через объект. Будем использовать следующие предположения. Процессами рассеяния и вторичного переизлучения пренебрегается. Ось вращения проходит через центр объекта. Постановка задачи – для набора проекций, описанных выражением 4.65, определить наименьшую (в смысле площади) возможную симметричную относительно оси вращения

ограничивающую рамку, которая ограничивает ROI на каждой проекции. Рассчитаем новое изображение интегральной проекции, согласно выражению:

$$\sigma(x, y) = \sqrt{\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K P(x, y, k)^2 - \left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K P(x, y, k) \right)^2}. \quad (4.66)$$

Здесь x, y - пространственные координаты на каждой проекции, k - индекс текущего измерения, K - общее количество измерений (проекций), зарегистрированных в ходе эксперимента, и $P(x, y, k)$ - интенсивность сигнала в пикселе с координатами x, y на текущей проекции. Бинаризация изображения интегральной проекции проводилась методом Оцу [149]. Пороговое значение рассчитывалось путем минимизации внутриклассовой дисперсии. Применение метода Оцу для разделения пикселей интегральной проекции на два класса: фон и объект (рис. 4.50) привело к обрезанию части объекта. Рассмотрим в деталях гистограмму, чтобы выяснить причину случившегося. На гистограмме

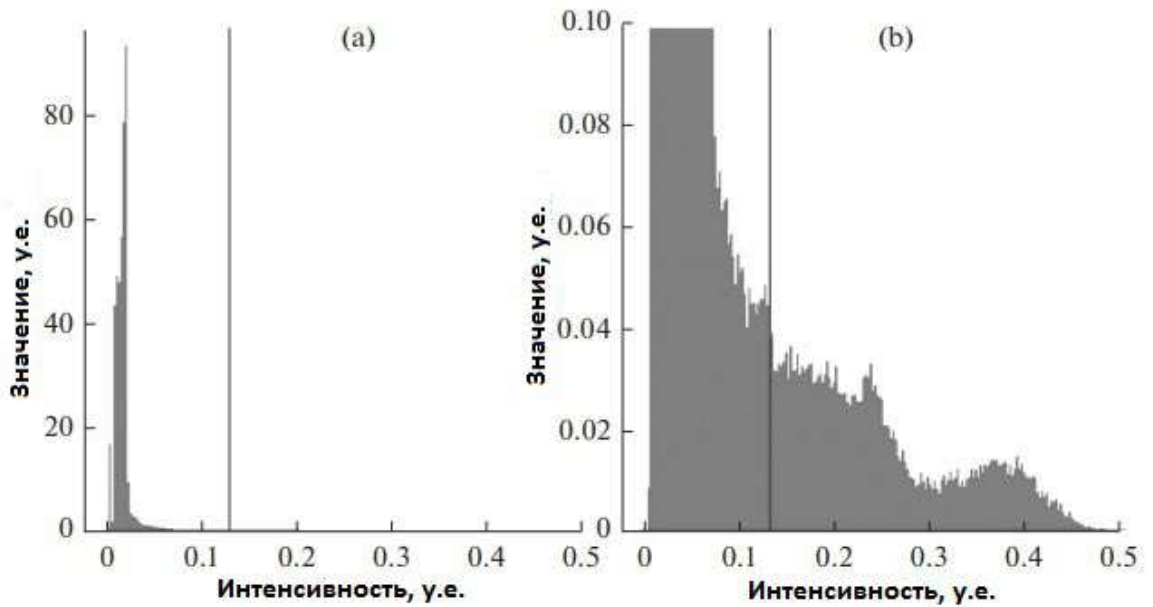


Рисунок 4.51 — Слева – гистограмма изображения интегральной проекции. Справа – увеличенный участок изображения гистограммы.

присутствуют два значительных пика в области нуля. Эти значения относятся к слабо видимой части объекта и к области шума. Пики расположены близко и неразличимы для метода бинаризации. В правой части гистограммы присутствуют пиксели с относительно высокой интенсивностью, но их количество незначительно. Они представляют собой яркую часть объекта, которая и попала в выделенную область (рис. 4.50). Для рентгеновских проекций ситуация,

когда один объект на изображении выглядит намного темнее другого, является типичной. Использование метода контрастного растяжения [150] позволяет повысить точность бинаризации. Контрастное растяжение переводит изображение $I : \mathbb{N} \cup \{0\} \times \mathbb{N} \cup \{0\} \rightarrow [\text{RangeMin}, \text{RangeMax}]$ в новое изображение $I_N : \mathbb{N} \cup \{0\} \times \mathbb{N} \cup \{0\} \rightarrow [\text{RangeMin}, \text{RangeMax}]$ путем следующего линейного преобразования интенсивности для каждого пикселя:

$$I_N(x, y) = (I(x, y) - \text{RangeMin}) \times \frac{\text{NewRangeMax} - \text{NewRangeMin}}{\text{RangeMax} - \text{RangeMin}} + \text{NewRangeMin}. \quad (4.67)$$

Выбор значений NewRangeMin и NewRangeMax базируется на использовании некоторого процентиля минимального и максимального значений динамического диапазона. В рассматриваемом примере были выбраны следующие границы:

$$\text{NewRangeMin} = 0, \text{NewRangeMax} = p_{99} \quad (4.68)$$

Нижняя граница нового диапазона совпадает с нижней границей динамического диапазона изображения, а верхняя граница составляет 99-й процентиль диапазона. Применение метода контрастного растяжения к изображению интегральной проекции не приводит к ожидаемому результату бинаризации 4.52. Причиной является наличие шума на проекциях, амплитуда которого, по-види-

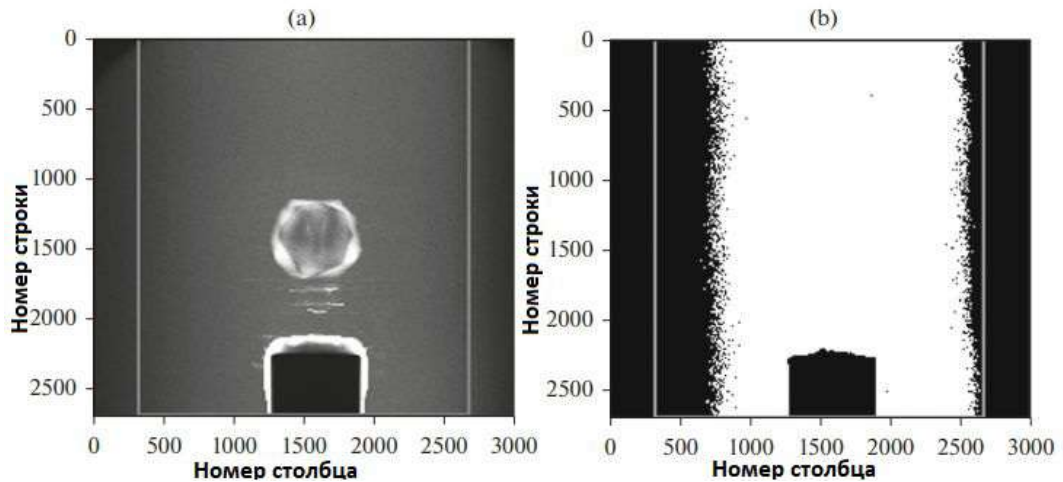


Рисунок 4.52 — Слева – изображение интегральной проекции после применения метода контрастного растяжения. Справа – бинаризованное изображение с границами.

мому, находится в том же диапазоне, что и полезный сигнал. Далее потребуется два набора изображений. Первый набор данных собирается при установленном

образце, т.е. это томографические проекции, собранные в ходе зондирования объекта. Будем использовать для первого набора данных обозначение $I_{\text{data}}(x,y)$. Второй набор данных собирается для пустого пучка, т.е. объект в тракте отсутствует. Набор, собранный в условиях пустого пучка, обозначим $I_{\text{empty}}(x,y)$. В рамках аддитивной модели шума уменьшение влияния шума проводилось в два этапа. Сначала использована процедура попиксельного вычитания:

$$I_{\text{result}}(x,y) = I_{\text{data}}(x,y) - I_{\text{empty}}(x,y), \quad (4.69)$$

а затем к результату применена операция нелинейной фильтрации. Окно фильтра выбирается эмпирически. В рассматриваемом примере использован медианный фильтр с размером окна 5×5 пикселей. Использование медианного фильтра позволяет сохранить все границы. На рисунке 4.53 приведены результаты выполнения двух последовательных этапов: этапа удаления шума и этапа контрастного растяжения. Сравниваются два подхода – удаление шума в прямом пространстве и удаление шума в частотном пространстве. Удаление шума в частотном пространстве реализовано для компонент спектра покомпонентным вычитанием. На рисунке представлены результаты после выполнения этапов бинаризации и поиска минимальной осесимметричной области интереса. Для исследования свойств предложенного метода был проведен модельный эксперимент с использованием 3D модели Шеппа-Логана (рис. 4.55a). Для трехмерного фантома размера $256 \times 256 \times 256$ пикселей были рассчитаны проекции размером 512×512 пикселей. Проекции рассчитывались с использованием модели (1.15). Рассчитанная синограмма приведена на рисунке 4.55b. Результаты реконструкции интегральным методом сечения по полным проекциям и с использованием выделенного ROI даны на рисунках 4.55c и 4.55d, соответственно.

Динамика поведения ошибки реконструкции и скорости вычислений в зависимости от размера ROI представлены на рисунке. Ошибка рассчитывалась с использованием выражения:

$$SNR = \frac{\sum_{i,j} Rec_{ij}^2}{\sum_{i,j} (Rec_{ij} - Phantom_{ij})^2}. \quad (4.70)$$

Расчеты проведены на персональном компьютере Intel® Core™ i7-4700HQ 2.4 GHz, 16 GB RAM без использования GPU. Для выполнения расчетов уменьшение размера ROI в процентах проводилось симметрично со всех четырех углов одновременно, сужением размера прямоугольника, центрально симметричного

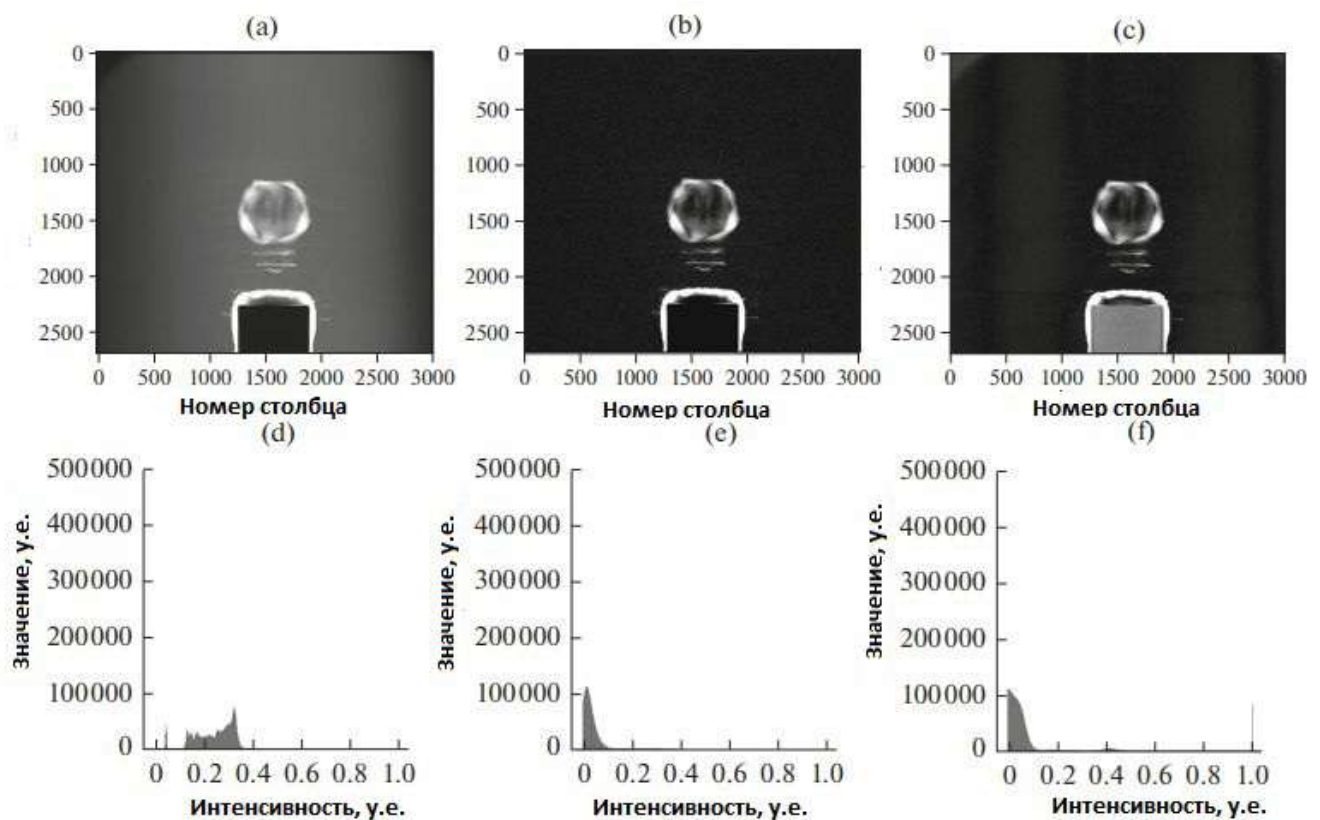


Рисунок 4.53 — Верхний ряд – изображение интегральной проекции. Выполнено а) контрастное растяжение, б) удаление шума в прямом пространстве с последующим контрастным растяжением, с) удаление шума в частотном пространстве с последующим контрастным растяжением. Нижний ряд – гистограммы, соответствующие изображениям верхнего ряда.

относительно центра изображения. Точкой на кривых отмечен проиллюстрированный на рисунке 4.56 случай.

В заключении сделаем короткий обзор предложенных подходов к сокращению времени расчетов. Использование интегральных методов реконструкции рекомендовано для случаев, когда собранные проекции распределены равномерно, их количество меньше латерального размера восстанавливаемого изображения не больше, чем вдвое, методы автоматической обработки результатов реконструкции не используются для анализа результатов реконструкции. Если для конусного зондирования размер набора проекций таков, что позволяет использование графических процессоров для выполнения реконструкции стандартными методами, то использование графических процессоров может повысить производительность в десятки раз. Использование алгоритмического ускорения операторов прямого и обратного проецирования позволит увеличить производительность с $C(n^3)$ до $C(n^2 \log n)$ для параллельных схем зондирова-

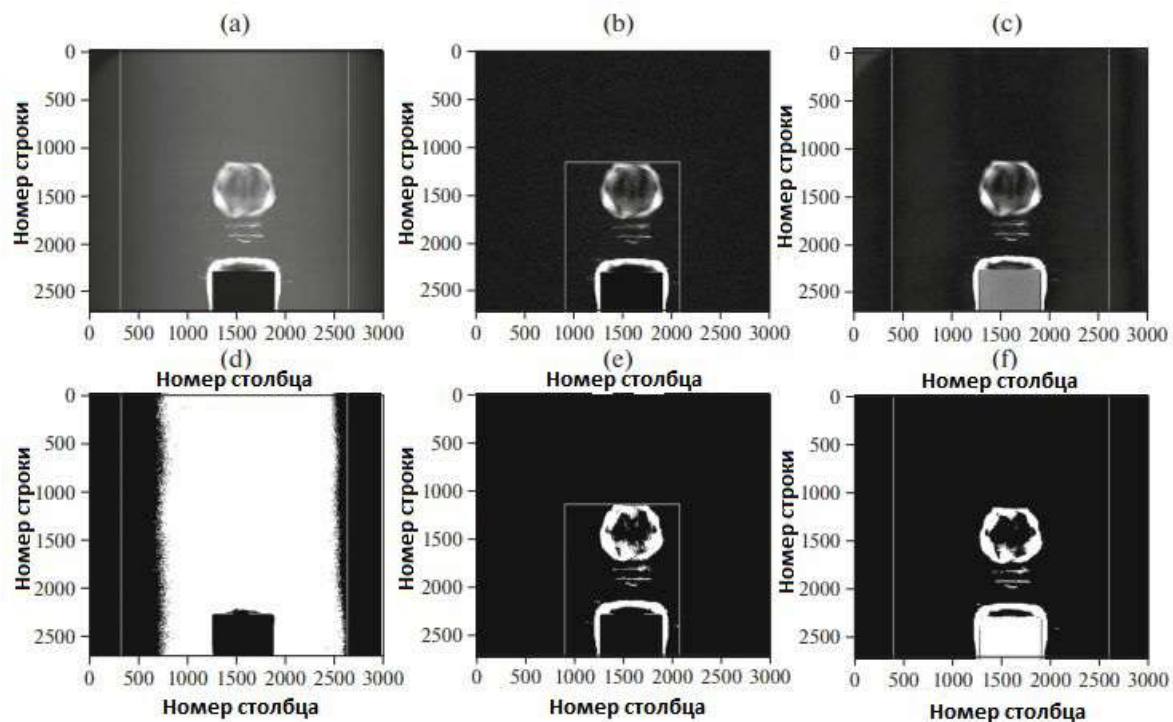


Рисунок 4.54 — Верхний ряд – изображение интегральной проекции. Выполнено а) контрастное растяжение, б) удаление шума в прямом пространстве с последующим контрастным растяжением, с) удаление шума в частотном пространстве с последующим контрастным растяжением. Нижний ряд – Результаты бинаризации, соответствующие изображениям верхнего ряда.

ния и с $C(n^4)$ до $C(n^{3.5})$ для конусных. Это позволяет до 15% ускорить расчет операции прямого проецирования и до 21% расчет операции обратного проецирования. Сокращение объема данных, подаваемых на вход реконструктору, за счет автоматического уменьшения площади проекций без потери точности реконструкции увеличит скорость вычислений пропорционально уменьшению объема данных.

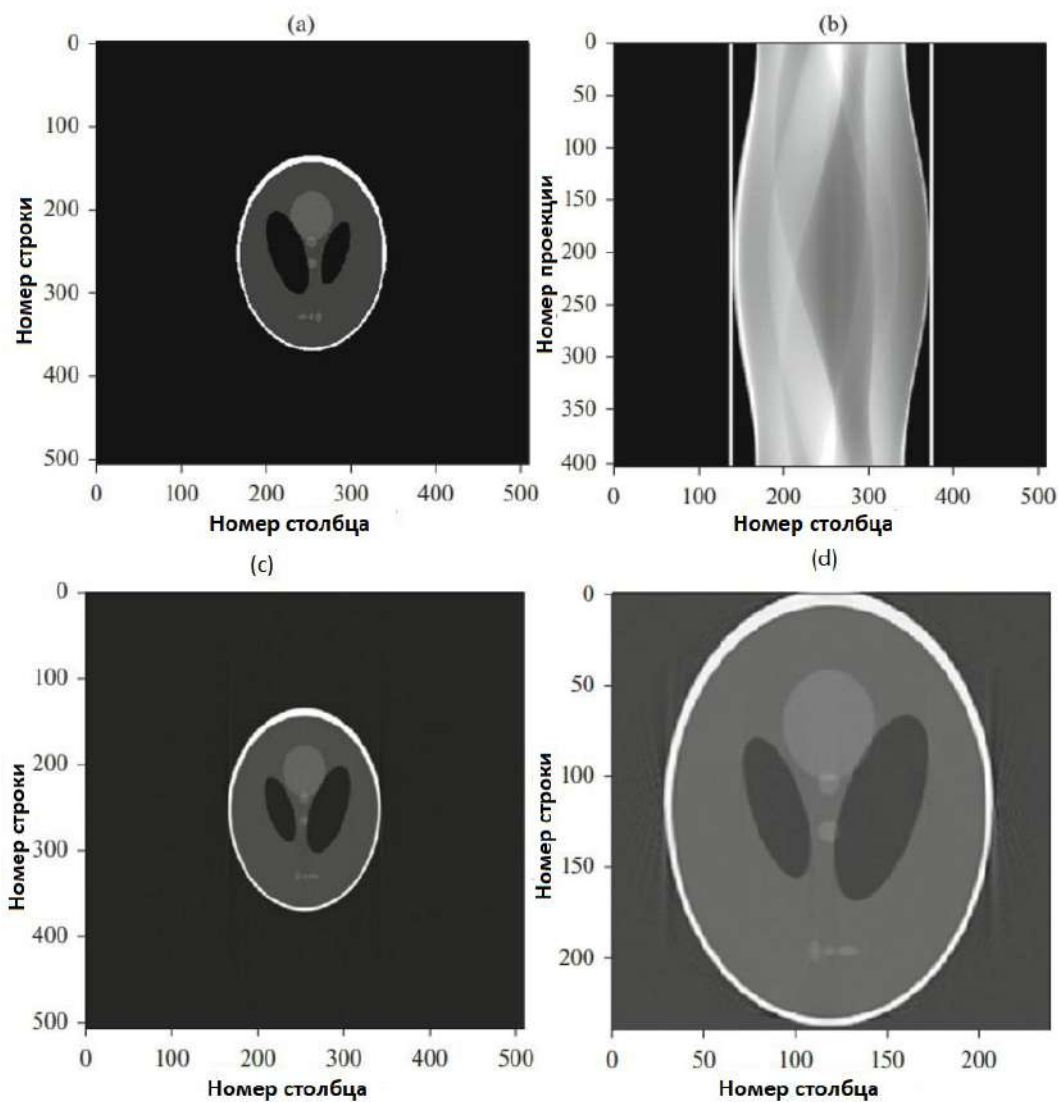


Рисунок 4.55 — а) Горизонтальное сечение фантома, б) синограмма с выделенным ROI (использован предложенный метод), с) реконструкция интегральным методом по полным проекциям, d) реконструкция по ROI.

4.8 Заключение

В данной главе предложены методы томографической реконструкции трансмиссионной рентгеновской томографии (в схеме на просвет) и для рентгено-флуоресцентной томографии:

1. алгебраический метод с нелинейной регуляризацией RegART
2. алгебраический метод для определения локального состава
3. алгебраический метод томографической реконструкции из набора рентгено-флуоресцентных проекций от объекта, имеющего протяженные локальные области, содержащие источники флуоресценции.

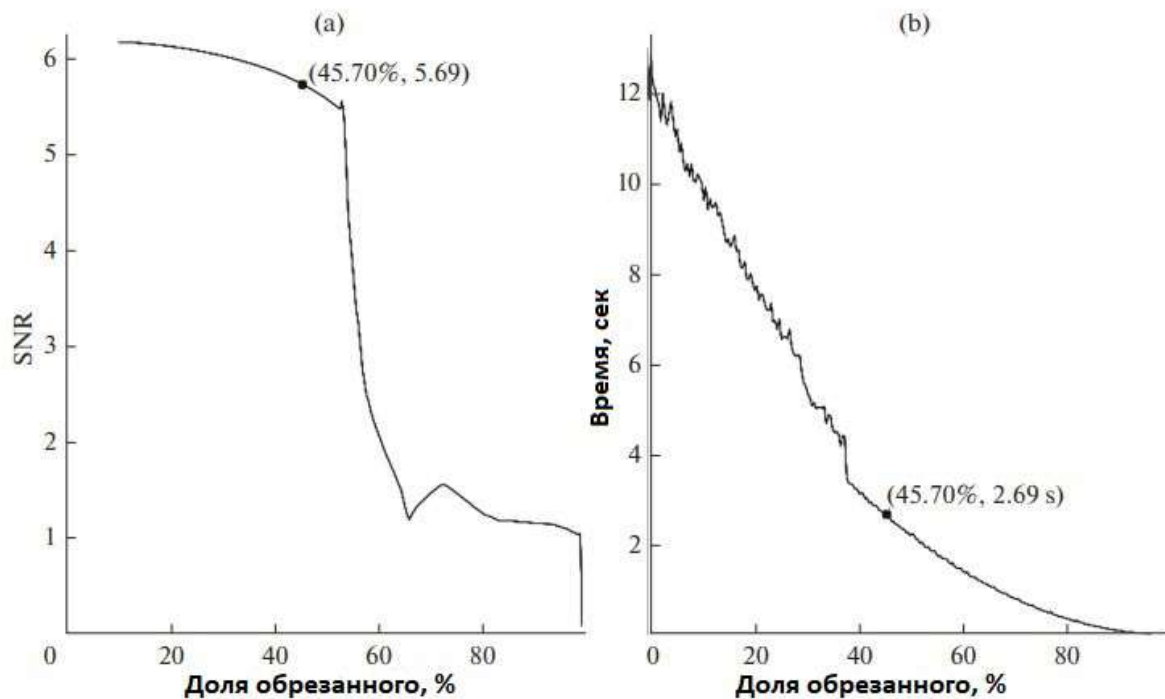


Рисунок 4.56 — а) Зависимость ошибки реконструкции от размера ROI, б) зависимость времени вычислений от размера ROI.

При сканировании ортотропных объектов с большим соотношением размеров сторон, таких как печатные платы или биполярные транзисторы с изолированным затвором (IGBT) возникают трудности с реконструкцией при их равномерном сканировании. Для обеспечения равномерного ослабления в продольном и поперечном направлениях требуются разные энергии рентгеновского излучения для зондирования. Поэтому для томографии ортотропных объектов применяются методы с выделенными направлениями зондирования [151]. Алгебраические методы [152] менее требовательны и к количеству проекционных углов, и к равномерности их распределения, они позволяют использовать априорные данные об исследуемом объекте и инкорпорировать методы адаптивной фильтрации. Опираясь на данные преимущества алгебраического подхода к реконструкции, автор в ходе своего исследования развивал именно этот подход.

Реализации алгебраических методов требуют для расчета градиентов хранения решений на последовательных итерациях, т.е. быстро растут требования по памяти. Предложенный метод реконструкции, учитывающий наличие ограничений по памяти, позволяет работать большими объемами измеренных данных. Линейку измерительных схем, в которую традиционно входили круговая и спиральная, дополнили ламинография, томосинтез и пр. Проекции,

собираемые в новых схемах, уже не являются равномерно распределенными по пространству углов. Применение интегральных методов к таким проекциям порождает искажения. Что подтверждает необходимость развития алгебраического подхода к реконструкции.

Метод рентгено-флуоресцентной томографии имеет широкий круг практических применений, в частности, позволяет проводить эффективную оценку использования лазерной абляции посредством виртуального анализа результатов ее применения. Облостями применения методов абляции являются декапсуляция корпусов интегральных схем [153], получение пленочных покрытий, получение новых материалов [154]. Создание новых материалов с определенным, наперед заданным комплексом свойств обусловлено сегодня требованиями многих областей человеческой деятельности. Это электроника, вычислительная и телекоммуникационная техника, космонавтика, медицина и прочие. Параметры морфологической структуры этих материалов, называемых функциональными, приходится контролировать как на стадии их производства, так и на стадии эксплуатации готовых устройств, в которых они используются. Последние могут состоять из нескольких материалов, объединенных в нескольких масштабах (от атомарного до макро). В ряде случаев контроль за поведением активно взаимодействующих материалов требуется на протяжении всей функциональной истории устройства. Контролировать неразрушающим образом внутреннюю морфологическую структуру многих материалов и устройств позволяет метод высокоразрешающей рентгеновской томографии. Однако в области наноразмеров применение метода имеет ряд ограничений. Это связано с тем, что в подавляющем числе случаев применение «стандартного протокола сканирования» приводит к плохому отношению сигнал-шум на регистрируемых проекциях. Для улучшения показателя в протоколе съемки либо увеличивают число измеряемых проекций, либо увеличивают время сбора одной проекции. Результат таких операций оценивается только после выполнения всего протокола. Увеличение числа попыток может привести к деградации объекта или к его разрушению. Использование метода высокоразрешающей томографии позволит ответить лишь на часть вопросов. Связано это с тем, что размер объекта, томографируемого с высоким разрешением, сильно ограничен. Если увеличить число ячеек детектора без изменения линейных размеров детектора, т.е. попытаться повысить пространственное разрешение, это приведет к пропорциональному увеличению объема обрабатываемых данных.

Согласно теореме Котельникова, с увеличением пространственного разрешения (числа ячеек детектора) пропорционально должно расти число проекционных углов, необходимых для реконструкции объема. Выполним простую оценку. Для реконструкции объема методом FDK [109] (один из малозатратных по памяти методов) количество ячеек детектора надо умножить на количество углов. Столько же вокселей будет содержать реконструированный объем. Один кубический миллиметр содержит квинтиллион вокселей размером 1 нанометр. Если оптическая плотность закодирована числом с плавающей запятой, то только для хранения результата реконструкции потребуется 4 эксабайта памяти. Т. е. аппаратное увеличение пространственного разрешения приводит к гигантскому увеличению объема обрабатываемых данных.

Оптимальное соотношение зондируемого объема и пространственного разрешения составляет 3-4 порядка. Т.е. объекты размером несколько сантиметров реконструируются с микронным разрешением, а объекты, размер которых составляет десятки сантиметров – с разрешением в доли миллиметра. Аппаратная и программные части томографов с разномасштабным пространственным разрешением также различаются. Далее в работе рассмотрен отдельно каждый из диапазонов масштабов. Результаты работы интегральных и алгебраических методов представляют собой дискретное цифровое изображение зондируемого объекта. Над повышением быстройдействия программной части комплекса ученые работают с того момента, как томографы начали применять для медицинской диагностики в 70-х годах прошлого столетия [108]. Затем эти машины пришли в научные лаборатории для решения задач геофизики [155], изучения исторического наследия [156], решения проблем микро- [157], наноэлектроники [158] и т.п. Мегапиксельные позиционно-чувствительные детекторы сегодня применяются в томографических установках. Повышение пространственного разрешения с одной стороны ведет к увеличению количества данных, с другой - сильно ухудшает отношение «сигнал-шум» в пикселях измеряемых проекций. Сегодня предложена новая технология «томография под контролем реконструкции» [102], позволяющая оптимизировать дозовую нагрузку на томографируемый объект. При применении технологии, требования к скорости и точности вычислений диктуют необходимость проведения расчетов в режиме реального времени измерения, поскольку заключительное решение об остановке съемки принимается на лету. Только алгебраические методы способны давать приемлемый результат в условиях, когда собрано малое число

проекций. Следует обратить внимание на тот факт, что какие бы математические методы и подходы к решению задачи реконструкции не применялись (интегральные, алгебраические, нейросетевые), основными операторами в вычислительных схемах являются операторы прямого и обратного проецирования. Их алгоритмическое ускорение [159], дает существенный выигрыш по времени. По существу, томографические комплексы превращаются, а где-то уже и превратились, в реальные системы, в которых выбор метода реконструкции осуществляется автоматически. Несмотря на большое количество существующих подходов к реконструкции, работы по поиску новых не прекращаются. Это связано с несколькими причинами. Жесткие требования к дозовой нагрузке диктуют появление схем сбора проекций с критически малым числом ракурсов или малой экспозицией. Увеличение пространственного разрешения понижает уровень сигнала, регистрируемого ячейкой позиционно-чувствительного детектора, что, соответственно, ведет к сильному ухудшению отношения сигнал-шум на проекциях [160]. Создание автоматических систем классификации [161] результатов реконструкции задает высокие требования к качеству реконструкции, что подтверждает актуальность проведенного исследования.

Глава 5. Рентгеновская томография. Методы уменьшения выраженности артефактов. Методы оценки точности реконструкции

5.1 Источники искажений, возникающих на восстановленных изображениях

Метод рентгеновской компьютерной томографии позволяет визуализировать внутреннюю морфологическую структуру объекта без разрушения самого объекта. Из собранных под разными углами рентгеновских проекций (рентгенограмм) восстанавливается 3D цифровое изображение объекта. Цифровое изображение – это распределение некоторой характеристики, включенной в модель описания объекта. Анализ полученного изображения позволяет проводить виртуальные метрологические измерения, в частности, применяя методы семантической сегментации, вычислять локальные объемы интересующих областей, строить цифровые модели объектов для их воссоздания или для последующего наблюдения за динамикой изменения их морфологической структуры под воздействием изменяющихся внешних условий. Например, наблюдать за образованием и распространением трещин под давлением в объеме и т.д. Томограф это аппаратно-программный комплекс (АПК). Размер и оптическая плотность (способность ослаблять рентгеновское излучение) томографируемого объекта определяют требования к аппаратной части АПК. Бессмысленно пытаться изучать структуру металлических дендритов из аккумуляторных батарей, используя томографы, предназначенные для оценки качества сварных швов стальных труб. В приведенных задачах исследуемые объекты имеют разный размер. Задачи должны решаться с разным пространственным разрешением. Разные энергетические диапазоны должны использоваться для зондирования объектов.

В состав АПК входят источник рентгеновского излучения; оптическая часть, формирующая зонд; механическая система, обеспечивающая сбор рентгеновских изображений объекта с разных ракурсов; система регистрации рентгеновских изображений и вычислитель. Каждый из узлов, назовем так части с разной функциональностью, вносит свои погрешности в решение обратной задачи реконструкции цифрового изображения физического объекта.

Чтобы сформулировать задачу построения точного цифрового изображения необходимо начать с ответа на вопрос, что представляет собой цифровое изображение. При ответе на этот вопрос оказывается, что нельзя рассматривать объект в отрыве от измерительной схемы. При сканировании объекта монохроматическим рентгеновским пучком цифровым изображением объекта будет являться пространственное распределение линейного коэффициента ослабления рентгеновского излучения используемой энергии материалами объекта. Если сканирование проводится с использованием спектра рентгеновского излучения – цифровым изображением является пространственное распределение некоторого «усредненного» коэффициента ослабления спектра. Основа алгоритмов реконструкции, применяемых в томографах, – это реализация с разной точностью операции обращения преобразования Радона. Ее можно выполнить аналитически в случае, если связь между результатом измерения и восстанавливаемыми значениями линейна, а углов наблюдения бесконечно много. Однако в реальных условиях, углов наблюдения – счетное количество, обычно сильно меньшее, чем линейный размер детектора. Источник рентгеновского излучения не стационарен, т.е. число квантов в зондирующем рентгеновском пучке варьируется по времени и пространству. Процессы генерации рентгеновского излучения являются вероятностными процессами. Величина сечения ослабления атомов – вероятность взаимодействия рентгеновского излучения с атомами материала. Описание процесса регистрации излучения без привлечения теории вероятностей во многих случаях приводит к грубым аппроксимациям. Отсюда можно сделать следующие выводы. Регистрируемые изображения содержат искажения, которые не описываются исключительно аддитивной добавкой к идеальным значениям [162; 163]. Применение алгоритма реконструкции, построенного в предположении непрерывности используемых данных [164], к собранному в реальных условиях набору изображений (рентгенограмм с разных ракурсов), вносит дополнительные артефакты. Т.е. мы подошли к ошибкам, источником которых является алгоритм реконструкции. Разделим ошибки на два типа. Первый тип свяжем с отклонением значений параметров, используемых в модели измерения, от реальных значений. К ним, в частности, относятся параметры положения узлов томографа относительно друг друга. Второй тип ошибок обусловлен необходимостью использования аппроксимаций при реализации численных расчетов. Для уменьшения выраженности артефактов на восстановленных изображениях предложено большое количество подходов. В

основном подходы проблемно ориентированы, т.е. компенсируют один из источников возникновения проблем. Ниже обсуждаются методы, предложенные в ходе диссертационного исследования, и приводятся количественные оценки качества получаемых результатов.

Решение обратной задачи томографической реконструкции в схемах «на просвет» в классической постановке основано на предположении о линейности модели формирования рентгеновской проекции. При спектральном зондировании свести задачу к линейной тривиальным образом не удастся. Предложенный в диссертации метод линеаризации задачи в полихроматическом случае, уменьшающий выраженность артефактов, также представлен в данной главе.

На рисунке 5.1 приведена принципиальная схема, описывающая связи между источниками ошибок (искажений), возникающих на восстановленных изображениях.



Рисунок 5.1 — Источники искажений.

Программная часть томографического комплекса обеспечивает следующие функции: управление и контроль за сбором проекций, проведение автокалибровки каждого из узлов и системы в целом, подготовку измеренных данных для выполнения реконструкции и реконструкцию цифрового изображения томографируемого объекта. Последующий анализ 3D изображения может проводиться с разными целями: исследование локальной внутренней структуры объекта, локализация положения недопустимых включений, выявление наличия и определение местоположения дефекта или метрологического отклонения в структуре или составе. Разделение процедуры автокалибровки и процедуры подготовки данных не случайно. Процедуры выполняются последовательно, и

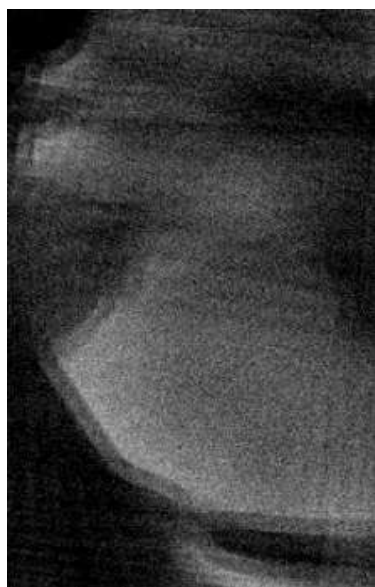
вторая в качестве части входных параметров использует выходные параметры первой. Процедура подготовки данных опирается на модель формирования проекций и процедуру линейаризации данных. Объект может включать области, сильно различающиеся по степени ослабления рентгеновского излучения, в частности, сильно поглощающие области. В этом случае, те лучи, которые для конкретного ракурса пересекут сильно поглощающие области, ослабятся сильнее (сигнал часто окзывается лежащим в области нуля), чем не пересекающие их. Т.е. уровень сигнала в ячейках детектора для двух типов лучей (пересекающих и не пересекающих области сильного поглощения) будет значительно различаться. При переходе от аналитической формы преобразования Радона к дискретной, ошибки возникают при переходе от декартовой системы координат (в этой системе координат живет конструируемое цифровое изображение) к полярной (пространство регистрируемых проекций) и обратно. Ошибки, связанные с процедурой линейаризации данных, зависят от моды зондирующего излучения (монохроматичное или полихроматичное) и определяются используемой процедурой линейаризации. Выбор алгоритма реконструкции и его численная реализация, включая используемые методы оптимизации и способы регуляризации, формирует свою группу ошибок.

В случаях, когда предположение, использованное в модели формирования проекции, нарушается, на реконструированных изображениях возникают систематические искажения, называемые артефактами. Артефакты куда более опасны, чем некоррелированный шум, поскольку за счет пространственной локализации искажают ключевые детали изображения. Для применений рентгеновской томографии в качестве диагностического инструмента микроэлектроники наибольшую опасность представляют артефакты следующих типов.

- Артефакты выделенных направлений. Обусловлены наличием недостаточного числа проекций и/или их неравномерным распределением. Уменьшение числа проекционных углов уменьшает суммарное время съемки, позволяя проводить контроль в режиме реального времени, и является одним из путей понижения дозовой нагрузки. Последнее в ряде применений является критическим требованием.

- Кольцевые артефакты. Обусловлены неоднородностью отклика ячеек детектора. Выглядят как концентрические кольца на восстановленном изображении.

- Геометрические артефакты. Их появление на восстановленных изображениях обусловлено неточностями в позиционировании, вызываемых люфтами или нарушенной юстировкой механики томографа, т.е. раскалиброванностью узлов АПК (рис. 5.2). Артефакты выглядят как «двоение» границ, наложение слоев. Обратим внимание, что все алгоритмы реконструкции требуют точного



а)



б)

Рисунок 5.2 — Участок восстановленного изображения. Слева - без коррекции положения оси (наблюдается двоение границ), справа - положение оси скорректировано.

описания положения тройки: «источник», «образец», «детектор».

- Металлические артефакты. Появление обусловлено наличием сильно поглощающих включений в объекте. При их наличии на восстановленном изображении возникает целый комплекс артефактов, которые не позволяют провести дальнейший анализ автоматически. К искажениям относятся высокочастотные линии, расходящиеся от границ включений; широкие черные и светлые полосы, соединяющие все включения; искажение формы самих включений; большие области тени, в которых части объекта не различимы (рис. 5.3).

- Артефакты, обусловленные нелинейностью модели формирования проекции. Чашевидные артефакты при полихроматическом зондировании обусловлены различием в степени ослабления материалом компонент спектра разной энергии. Проявляется как уменьшение значения коэффициента ослабления от краев к центру объекта в однородных объектах, за что и получили свое название «чашевидные».

- Артефакты типа «соль–перец». Обусловлены плохим отношением сигнал/шум.

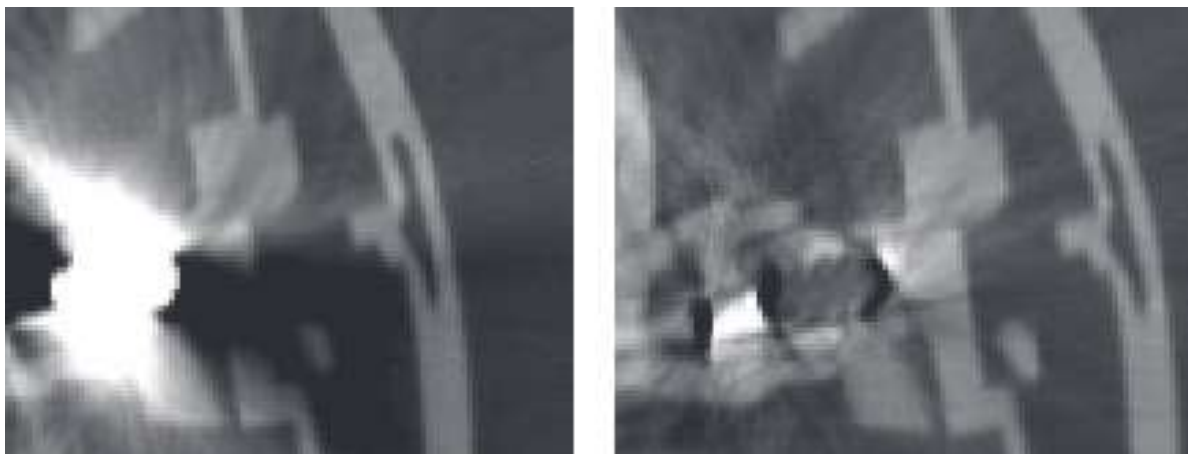


Рисунок 5.3 — Пример томографической реконструкции (участок). Слева - реконструкция проведена «классическим» алгоритмом. Справа - применялся алгоритм, учитывающий наличие сильнопоглощающих включений [165].

Существующие методы борьбы с артефактами разделяются на аппаратные и программные. С геометрическими артефактами пытаются бороться использованием физической калибровки узлов, проводя измерения на фантомах, и юстировки узлов АПК.

Артефакты выделенных направлений при наличии модели объекта, дефектоскопия которого выполняется, пытаются устранить адаптивным выбором ракурсов. Однако, такой подход требует радикально ускорить смену ракурса. Использование, например, электронно-лучевого томографа помогло бы в решении задачи. Поскольку в таком подходе нет перемещения образца (он неподвижен), нет перемещения детекторов (регистрирующая система неподвижна), это позволяет существенно понизить и геометрические артефакты. Однако создание такого прибора не завершено.

Для понижение выраженности металлических артефактов применяются следующие стратегии:

1. предотвращение присутствия металла в поле зрения, изменение параметров получения КТ сканирования, таких как напряжение рентгеновской трубки и ток трубки, уменьшение толщины зондируемого среза путем утановки коллимирующих устройств в тракт томографа. Более радикальный аппаратный подход заключается в использовании двухэнергетических протоколов, использование детекторов прямого счета фотонов.

2. Адаптивная фильтрация проекций с дальнейшим применением традиционных алгоритмов реконструкции.

3. Заполнение значениями нулевых пикселей проекций с использованием либо полиномиальной интерполяции, либо путем синтеза данных, которые удовлетворяют некоторым критериям согласованности.

4. Использование методов реконструкции, основанных на репроецировании. Подход включает оценку идентификации металлических объектов в исходном реконструированном изображении и заполнение этих областей значениями некоторой оптической плотности.

5. Использование методы реконструкции с привлечением априорной информации о форме сильнопоглощающего включения.

6. Наименее популярный подход заключается в выполнении постобработки, которая направлена на исправление артефактов в области изображения. Методы постобработки уменьшают артефакты после того, как изображение реконструировано, и не полагаются на доступ к необработанным проекционным данным.

Проанализируем используемые подходы. Избежать попадание металла в поле зрения, к сожалению, удастся не всегда, поскольку именно области, прилегающие к сильнопоглощающим включениям, являются областями интереса. Организация коррекной адаптивной фильтрации проекций является сегодня самостоятельной задачей, ожидающей корректного решения. Использование стандартных фильтров приводит к потере информации, содержащейся в проекциях. Подходы 4 –6 применимы только в задачах дефектоскопии, когда модель объекта известна заранее. В задаче изучения морфологической структуры подходы 4 и 6 могут привести к потере информации об участках объекта, расположенных в области тени сильнопоглощающего включения.

Для выполнения метрологического контроля требуются разномасштабные высокоточные и надежные средства объективного контроля. Поскольку аппаратная часть комплекса включает три основных узла: источник рентгеновского излучения, систему позиционирования томографируемого объекта относительно пары источник-детектор для получения рентгеновских изображений с разных ракурсов и позиционно чувствительный детектор, она может быть реализована разными способами: пара источник-детектор неподвижна, а объект вращается или перемещается; объект неподвижен, а пара источник-детектор вращаются или перемещаются. Схема организации съемки в

электронно-лучевом томографе в диссертации не рассматривается, поскольку, как уже упоминалось выше, проект по его созданию еще не завершен. Характеристики узлов АПК определяют требования к объекту томографирования – его минимальный и максимальный размеры, диапазон оптической плотности его локальных областей. Для получения точного 3D томографического изображения (цифрового изображения) объекта необходимо выполнение условий, накладываемых на режим зондирования, геометрическую схему съемки проекций и выполнение требований к образцу. Режим зондирования согласуется с требуемой чувствительностью. Чувствительность – минимальное детектируемое количество вещества. Вещество определяется своей поглощательной способностью. Для задач обнаружения следует проводить предварительную калибровку АПК с целью определения энергетического диапазона (диапазонов) для зондирования, определения функций отклика детектора, оптимизации времени съемки одной проекции и выбора алгоритма реконструкции.

Геометрическая схема съемки проекций – это тройка (в первом приближении) – форма зонда + траектория перемещения пары источник-детектор относительно «неподвижного» образца + форма и размер ячейки детектора. Геометрическая съемка согласуется с требуемым пространственным разрешением. Пространственное разрешение в томографии задается размером вокселя 3D цифрового изображения объекта в абсолютных единицах длины. Свойствами объекта определяется зависимость контраста на измеряемых проекциях от спектра рентгеновского зонда.

Вся продукция микроэлектроники – это многослойные объекты с большими перепадами оптической плотности в рентгеновском диапазоне. Дисперсия оптических свойств используемых материалов (от полимеров до благородных металлов) ведет к появлению на восстановленных цифровых изображениях объектов рассмотренных выше артефактов, затрудняющих анализ и принятие решений. Использование к компьютерной томографии не позволяют решить проблемы контроля качества в микроэлектронике на должном уровне.

Проблема анализа причин возникновения искажений на восстановленных изображениях была сформулирована автором в работе [162]. Позднее исследования были продолжены и результаты представлены в работах [163; 166].

Далее глава организована следующим образом. Начинается она с рассмотрения задачи уменьшения выраженности артефактов, возникающих на изображениях, восстановленных по проекциям малоракурсной съемки классическими

методами реконструкции. Описан метод реконструкции, разработанный в рамках диссертационного исследования специально для случая малоракурсной съемки томографических проекций (Раздел 5.2).

Далее описан метод обработки проекций для уменьшения выраженности кольцевых артефактов на восстановленных изображениях. Кольцевые артефакты на реконструкции возникают при неравномерном отклике ячеек позиционно-чувствительного детектора на одинаковое количество регистрируемых квантов одной энергии.

В следующем разделе рассматривается задача автоматической коррекции параметров положения оси вращения. При неверных значениях параметров, переданных в реконструктор, результат реконструкции стандартными методами будет иметь размытые границы локальных областей.

Исследованию причин возникновения артефактов при зондировании объектов, имеющих сильно поглощающие включения, посвящен следующий раздел. Описан предложенный метод реконструкции, позволяющий уменьшить выраженность артефактов данного типа.

Завершается анализ артефактов разделом, в котором описан метод лиnearизации полихроматических проекций, не приводящий к появлению на восстановленных изображениях артефакта типа чаши.

Завершается данная часть исследования введением модели, предложенной для оценки точности результатов реконструкции.

5.2 Артефакты при малоракурсной съемке. Реконструкция в условиях малоракурсной съемки

Для уменьшения дозовой нагрузки на томографируемые объекты одним из способов является уменьшение числа ракурсов съемки. Малоракурсная съемка приводит к возникновению выделенных направлений на восстановленном изображении [167] (рис. 5.4). Даже если при визуальном контроле восстановленного изображения его полосатость не мешает, то автоматический анализ такого изображения затруднен. При наличии ошибки в проекциях, передаваемых на реконструкцию, ситуация усугубляется, и качество реконструкции падает не только для интегральных, но и для алгебраических методов. В науч-

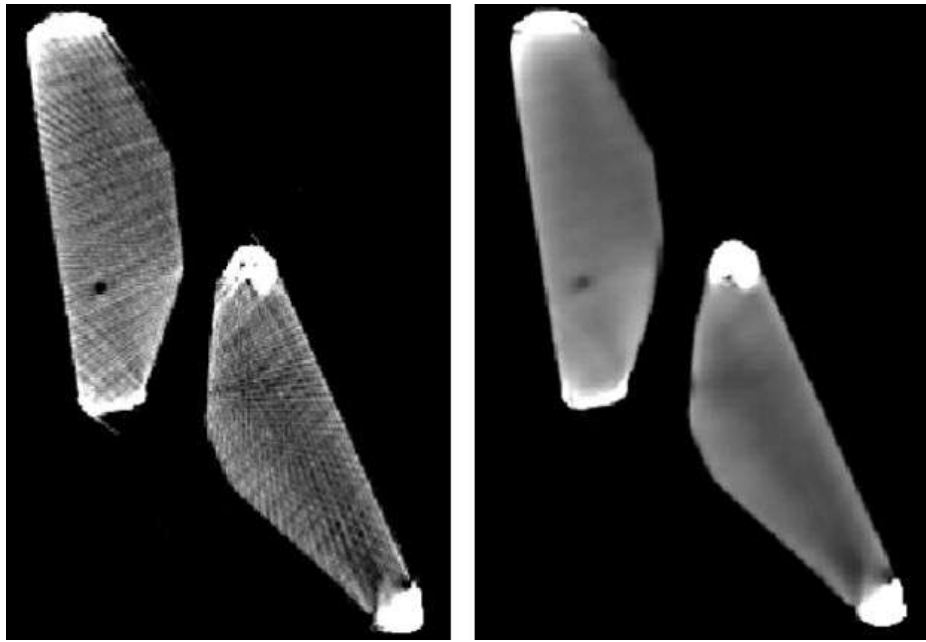


Рисунок 5.4 — Иллюстрация артефактов, возникающих при использовании классических методов реконструкции в условиях малоракурсной съемки. Слева: применен стандартный метод реконструкции. Справа: использован предложенный метод реконструкции для малоракурсного случая.

ных публикациях предлагается напрямую обучать нейронные сети сквозному сопоставлению между полноракурсной и малоракурсной реконструкцией [168]. Сопоставление реализуется в виде глубокой сверточной нейронной сети (CNN), которая принимает малоракурсное изображение реконструкции в качестве входных данных и выдает полноракурсное изображение. Однако минимального значения невязки между результатом прямого проецирования при таком способе получения изображения ожидать не приходится. Как известно, нейронные сети способны галлюцинировать, т.е. пририсовывать дополнительные несуществующие детали или изменять геометрию существующих [169]. Другим подходом к решению задачи является подход с использованием локализованных регуляризаторов в алгебраическом методе реконструкции [170].

В данном разделе описывается нейросетевой метод реконструкции под контролем значения невязки, предложенный для уменьшения выраженности артефактов, возникающих при малоракурсной съемке [171]. Не ограничивая общности рассмотрим задачу на примере двумерного случая. Обозначим через $\mathbf{x}$ двумерное распределение линейного коэффициента ослабления, W — линейный оператор, связывающий $\mathbf{x}$ с набором линеаризованных проекций (си-

нограммой) $\mathbf{p}$. Лучевые суммы представляются в следующем виде:

$$\mathbf{p} = W\mathbf{x}. \quad (5.1)$$

Задача реконструкции – оценить $\mathbf{x}$ по $\mathbf{p}$. Поскольку число ячеек позиционно-чувствительного детектора ограничено, двумерное распределение линейного коэффициента восстанавливается в виде изображения с ограниченным числом пикселей. В каждом пикселе записывается восстановленное значение. Линеаризованные значения сигналов p и значения результата реконструкции x являются компонентами евклидовых векторов. Тогда в силу линейности преобразования W и того, что размерность $\mathbf{p}$ меньше размерности $\mathbf{x}$, евклидово пространство всех изображений можно представить как сумму нуль-пространства оператора проецирования $N(W)x : Wx = 0$ и ортогонального ему $N^\perp(W)$. $N(W)$ является линейным пространством ненулевой размерности и $\mathbf{x}$ можно представить как сумму:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_N + \mathbf{x}_\perp, \quad (5.2)$$

где $\mathbf{x}_N \in N(W)$ и $\mathbf{x}_\perp \in N^\perp(W)$ ортогональны. С учетом этого перепишем 5.1:

$$\mathbf{p} = W\mathbf{x} + \mathbf{v} = W\mathbf{x}_\perp + \mathbf{v}, \quad (5.3)$$

где и $\mathbf{p}$ не зависит от $\mathbf{x}_N$. Это означает, что если дополнительная информация о зондируемом объекте не привлекалась, то путем измерения $\mathbf{p}$ можно восстановить только компоненты $\mathbf{x}_\perp$ цифрового изображения $\mathbf{x}$. Компоненты $\mathbf{x}_N$ не могут быть восстановлены, поскольку информация о них не содержится в $\mathbf{p}$. Отсюда следует, что для уточнения реконструкции модель измерения 5.1 должна быть дополнена информацией о компонентах $\mathbf{x}_N$. Т.е. необходима модель, описывающая зависимость между ортогональными компонентами $\mathbf{x}_N$ и $\mathbf{x}_\perp$ изображения $\mathbf{x}$. Аналитически этого сделать не удастся. Было предложено использовать нейросетевой подход для построения данной зависимости. Перепишем оптимизационную задачу томографии с учетом условий малоракурсности:

$$\|\mathbf{p} - W\mathbf{x}_\perp\|^2 \rightarrow \min. \quad (5.4)$$

Использование нейросетевых модели типа GAN [172], предназначенных для повышения качества изображений, восстановленных классическими методами, приведет к непредсказуемому поведению невязки, поскольку лучевые суммы,

рассчитываемые для тех проекционных углов, для которых измерения измерения были выполнены, от полученного нейросетью изображения, могут отличаться от результата измерения случайным образом. Т.е. рассчитанная нейросетью добавка к начальной реконструкции может не лежать в нуль-пространстве матрицы W , а значит уточненное нейросетью изображение нельзя считать изображением более высокого качества, чем полученное классическим методом.

Воспользуемся теоремой о центральном сечении [173] в качестве метода согласования лучевых сумм и нейросетевых реконструкций. Согласно теореме о центральном сечении, по набору результатов 1D Фурье преобразований лучевых сумм, расположенных в Фурье пространстве с учетом проекционных углов, можно восстановить изображение сечения, используя операцию обратного 2D преобразование Фурье. Обучим нейросетевую модель проводить в Фурье пространстве оптимизированное смешивания Фурье образов уточненного с помощью другой нейросетевой модели решения и нулевого приближения (уточняемого решения). Будем использовать нейросетевую модель для решения следующей задачи:

$$\mathbf{x} = FT_2^{-1}(FT_2(\mathbf{x}_\perp) + M \times FT_2(\Delta\mathbf{x})). \quad (5.5)$$

Здесь M – маска, используемая в Фурье пространстве для оптимизированного взвешивания. Пусть модель рассчитывает решение, удовлетворяющее требованию оптимизационной задачи 5.4. Входом для модели является начальное приближение к решению, полученное с использованием алгебраического метода, как дающего более точное решение при работе с проекциями, собранными не в идеальных условиях. Использованная для реализации предложенного метода архитектура нейронной сети LRFR (Learned Residual Fourier Reconstruction) подробно описана в работе [171]. Для демонстрации эффективности предлагаемого метода были обучены две модели: предложенная ранее шведской группой нейросетевая модель LPDR (Learned Primal-Dual Reconstruction) [175] и модель LRFR, реализующая предложенный метод. Обучение нейронных сетей проводилось на открытом наборе данных Low Dose CT Challenge [174]. Изображение фантома, взятого из того же открытого набора данных, представлено на рисунке 5.5). Обученные модели тестировались на наборе из 64 проекций, рассчитанных от фантома с использованием модели сигнала (1.15). Начальное

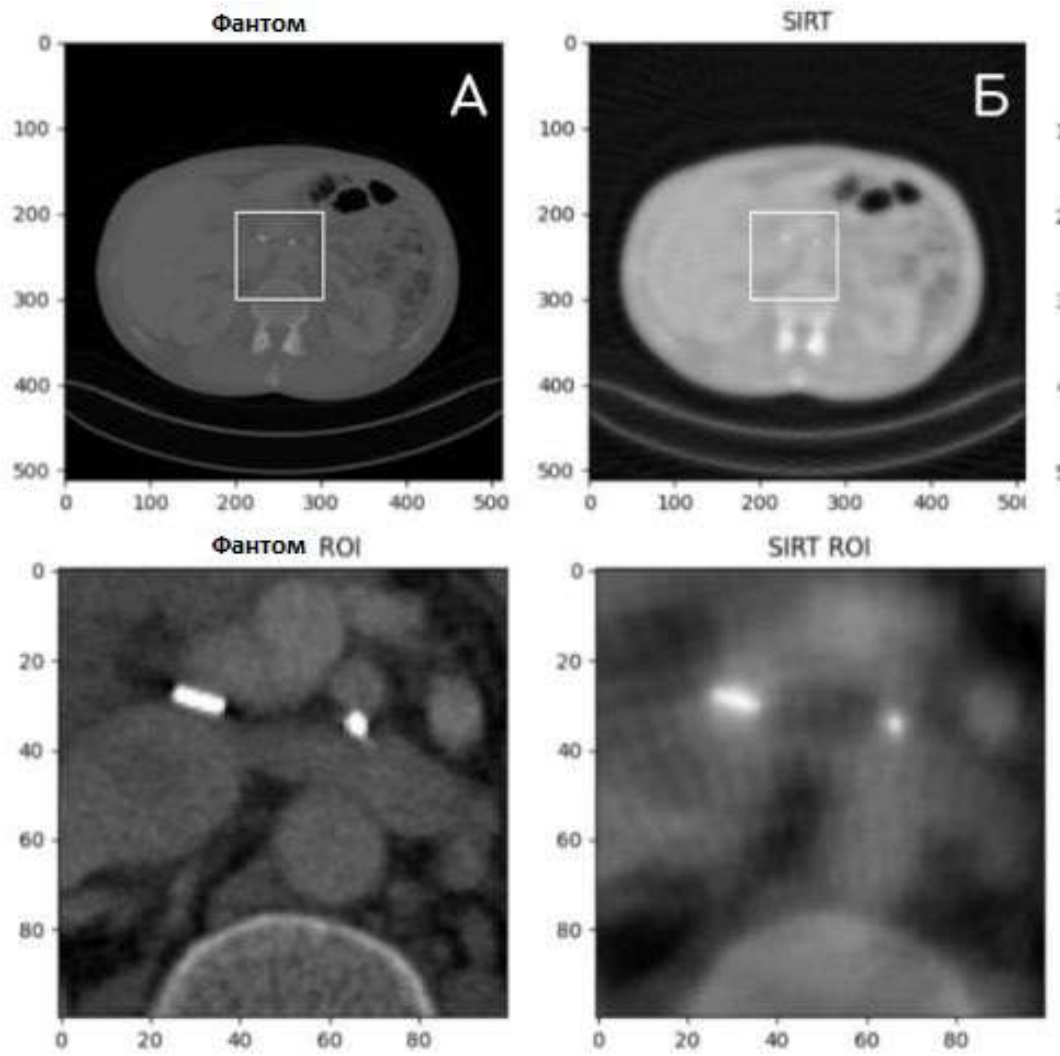


Рисунок 5.5 — Верхний ряд. Слева: фантом из открытого набора данных Low Dose CT Challenge [174], используемый в эксперименте. Справа: реконструкция алгебраическим методом SIRT (20 итераций), выполненная по 64 проекциям.

Нижний ряд: увеличенные участки двух изображений, соответственно.

приближение для модели LRFR было восстановлено методом SIRT. Были рассчитаны 20 итераций. Изображение использованного начального приближения для модели LRFR приведено на рисунке 5.5 (правое изображение) вместе с увеличенным участком, на котором хорошо артефакты выделенных направлений, совпадающих с направлениями зондирования. Набор из 64 модельных проекций подавался обоим сетям. Ширина модельной синограммы 512 пикселей (рис. 5.6). Размер восстановленного изображения составлял 512×512 пикселей. Используемая при обучении модели LRFR функция потерь имела вид:

$$Loss(\mathbf{R}, \mathbf{x}_\perp) = \|\mathbf{R} - \mathbf{x}_\perp - \mathbf{x}_N\|^2 + 0.1\|FP(\mathbf{x}_N)\|^2 + SSIM(\mathbf{R}, \mathbf{x}_\perp + \mathbf{x}_N) \quad (5.6)$$

где $\mathbf{x}_N$ – результат расчета предлагаемый сетью, $\mathbf{x}_I$ – входные данные для сети (реконструкция SIRT), R – фантом, FP – операция прямого проецирования, SSIM – индекс структурной схожести [176]. Интеграция в архитектуру нейронной сети LRFR слоев, вычисляющих быстрое преобразование Радона, обеспечило соответствие вычислительного графа нейросети физическому процессу томографического измерения.

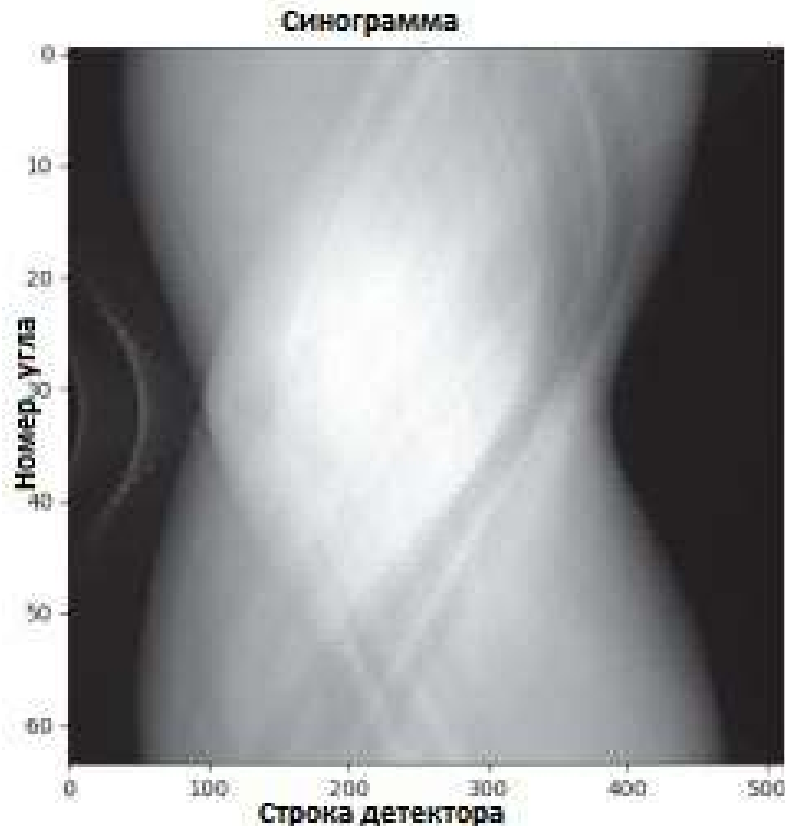


Рисунок 5.6 — Синограмма, рассчитанная от фантома для 64 проекционных углов.

Маска, рассчитанная нейросетью (5.5) для выполнения смешивания начального приближения и нейросетевой добавки, приведена на рисунке 5.7. Нейросетевая модель LRFR обучалась с использованием алгоритма оптимизации Adam (Adaptive Moment Estimation). Расчеты проводились на компьютере с процессором AMD Ryzen 7 2700x с использованием видеокарты Nvidia Titan Xp GPU.

В Таблице 3 приведены результаты сравнения работы двух нейросетевых моделей предложенной и модели LPDR [175].

Реализация предложенного метода показывает более высокую точность реконструкции по метрикам SSIM, PSNR и более короткое время выполнения реконструкции на одно изображение по сравнению с методом LPDR.

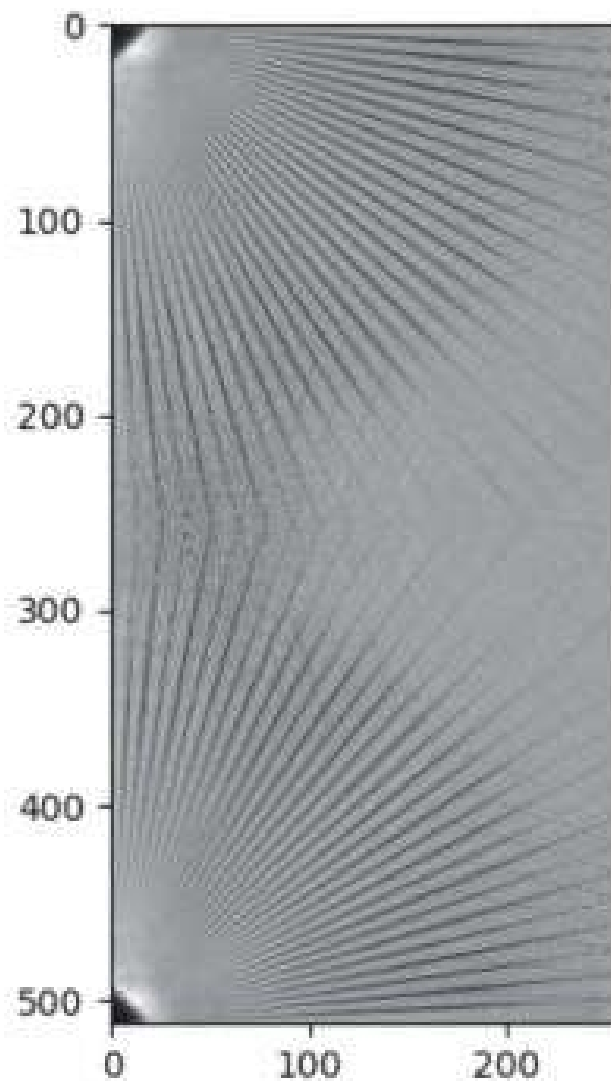


Рисунок 5.7 — Маска, использованная для смешивания начального приближения и уточняющей добавки в Фурье пространстве

Таблица 3 — Сравнение двух нейросетевых моделей

Параметр	LPDR	Предложенный метод
PSNR	37.55	38.66
SSIM	0.88	0.89
Время, мс	105	108
Репроецирование MSE	2×10^{-5}	3×10^{-6}

Видно, что реконструкция SIRT на рис. 5.5 имеет легко различимые артефакты, например, радиальные лучи, исходящие из центра реконструкции, и общую размытость реконструированного изображения.

Задача нахождения реконструкции по измеренному набору проекций является недоопределенной при наличии шума на проекциях или в случае малого

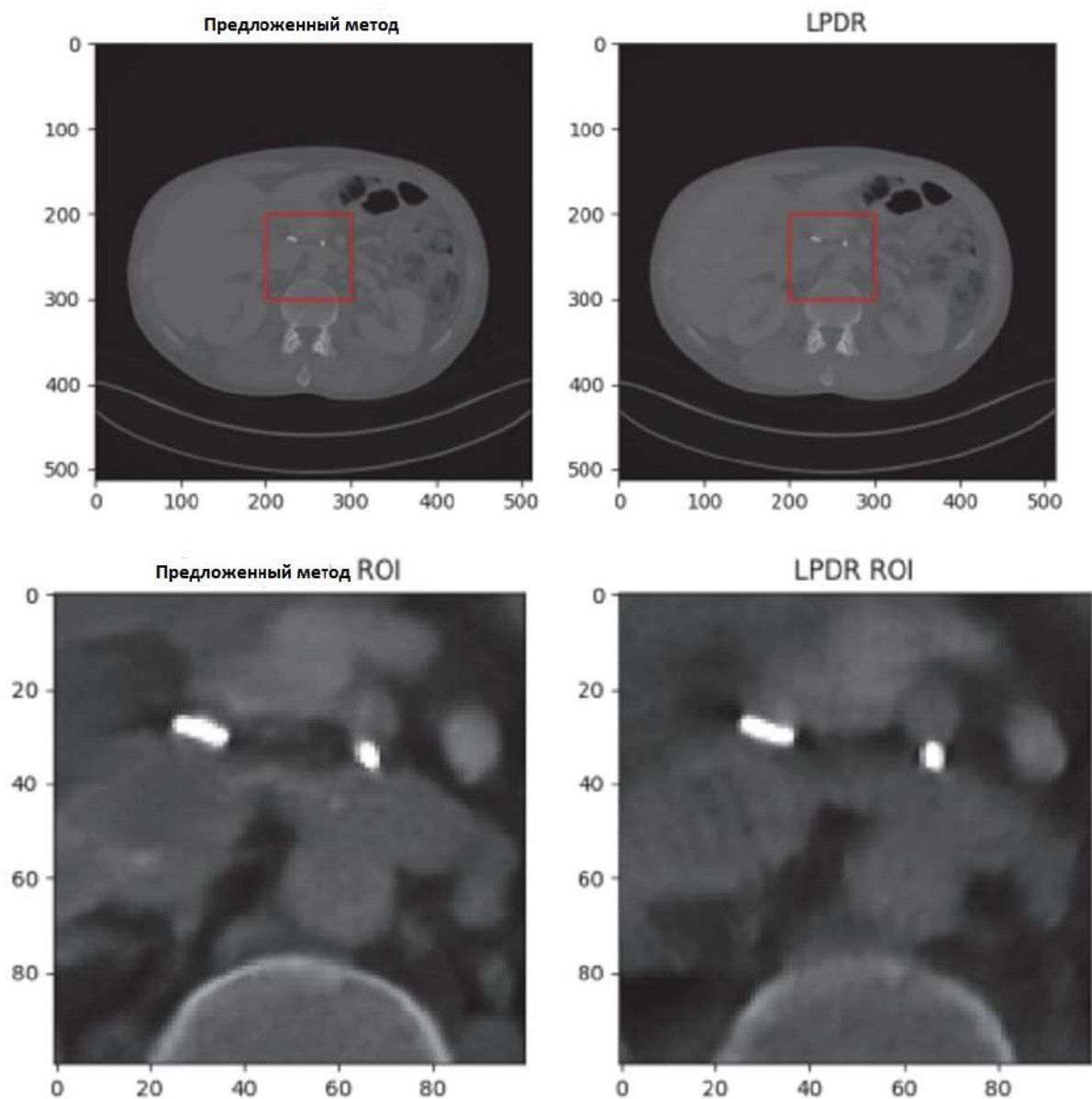


Рисунок 5.8 — Верхний ряд. Слева: Реконструкция фантом предложенным методом с использованием нейросетевой модели LRFR. Справа: реконструкция фантома с использованием нейросетевой модели LPDR [175]. Нижний ряд: увеличенные участки двух изображений, соответственно.

числа измеренных проекций. Это означает, что существует множество реконструкций, соответствующих измеренным проекциям. Для выбора наилучшего решения из всех возможных используют различные стратегии регуляризации. Одними из лучших регуляризаторов для изображений являются нейросетевые алгоритмы. В отличие от аналитических подходов, нейросетевые имеют возможность учитывать особенности морфологической структуры восстанавливаемых объектов, поэтому находят наиболее близкое к истине (по какой-либо метрике) решение. Необходимая производительность может быть достигнута комби-

нацией использования Радоновских архитектур, малобитного квантования и рекуррентных (а не прямых) сверток, а методология физически обоснованной аугментации данных позволит контролировать процесс обучения и добиться качественных и объяснимых результатов.

5.3 Артефакты при неравномерном отклике ячеек детектора. Метод уменьшения выраженности артефактов

При неравномерном отклике ячеек позиционно-чувствительного детектора на одно и то же, достигающее ячейки количество рентгеновских квантов с одинаковой энергией, на синограммах появляются характерные вертикальные линии (рис. 5.9), приводящие к появлению концентрических окружностей на восстановленных изображениях (рис. 5.10). Если мертвые пиксели детектора

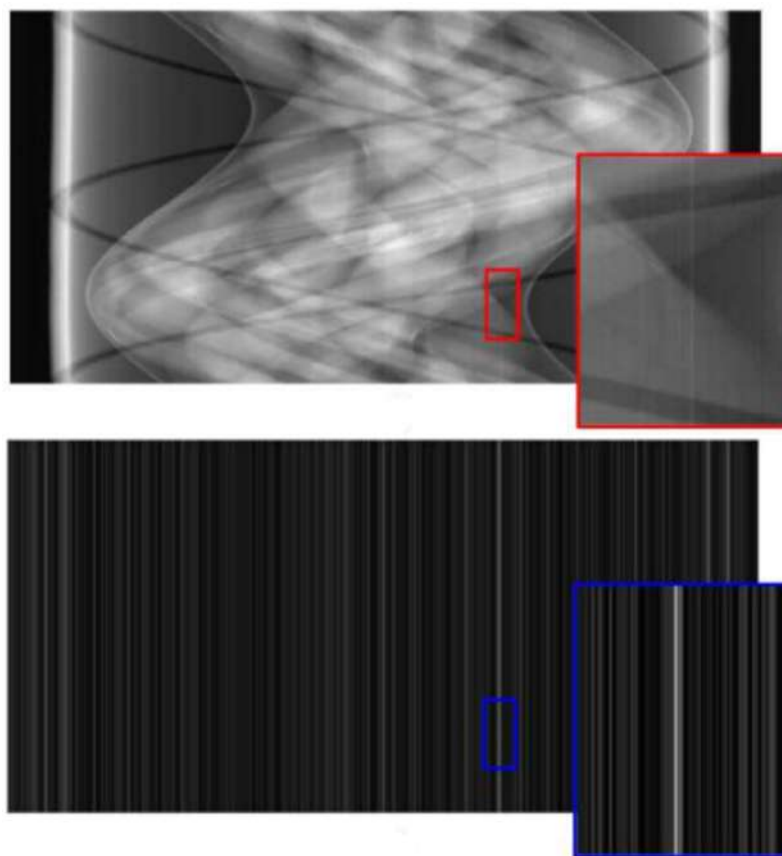


Рисунок 5.9 — Иллюстрация эффекта неоднородного отклика ячеек

создают интенсивные изолированные кольца при реконструкции, разкалиброванные ячейки детектора создают более слабые, широкие кольца или группы колец. Большинство существующих методов анализа кольцевых артефактов можно условно разделить на 3 основные группы: аппаратные методы, методы предварительной обработки проекционных данных и методы постобработки результатов реконструкции. К аппаратным методам относятся методы организации дрожания (небольшого отклонения) детектора в плоскости, перпендикулярной главной оптической оси. Использование методов постобработки

восстановленных изображений может привести к потере значимых объектов изображения, имеющих форму кольца. Несмотря на то, что проблема наличия

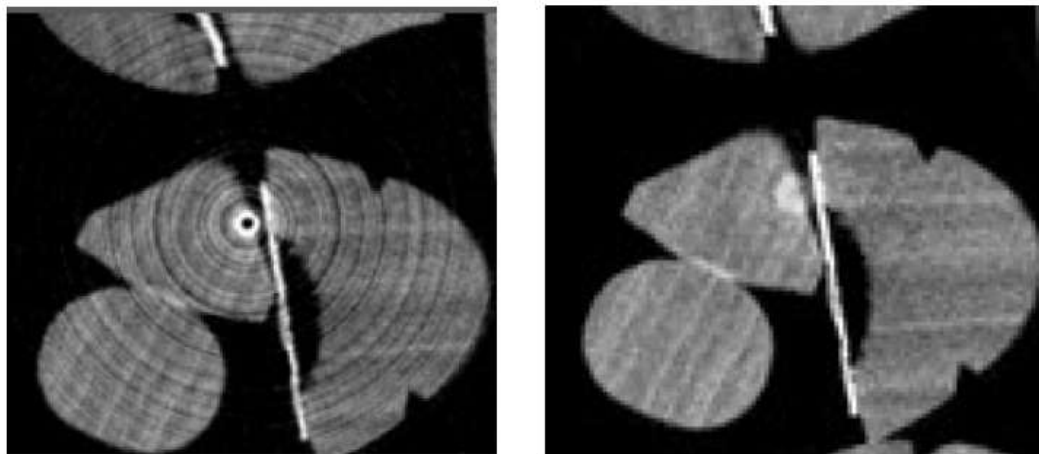


Рисунок 5.10 — Участок горизонтального сечения цифрового изображения объекта. Слева - реконструкция без учета неоднородного отклика пикселей позиционно-чувствительного детектора. Справа - реконструкция выполнена после автоматической коррекции проекций на неоднородный отклик [177].

кольцевых артефактов мешает проводить детальный анализ восстановленных изображений, значительная часть существующих и используемых в научных лабораториях методов [178—180] не автоматизирована. Методы требуют либо непосредственного вмешательства исследователя в процедуру сбора данных об объекте и ее настройки, либо ручного скрупулезного поиска и подбора параметров метода подавления артефактов для наилучшей коррекции реконструкции. Методы уверенно используются исключительно специалистами. Неискушенные пользователи томографов настройкой параметров провоцируют появление новых кольцевых артефактов по всему объему реконструкции.

Предложенный метод является полностью автоматическим[181]. Метод состоит из пяти последовательных этапов: расчет синограмм по проекционным данным, расчет усредненной синограммы, медианная фильтрация усредненной синаграммы, билатеральная фильтрация результата предыдущего этапа, расчет ошибки, и коррекция синограммы с учетом распределения ошибки. Этапы выполняются для каждой линейки пикселей детектора. Обоснуем необходимость проведения каждого этапа и опишем этапы в деталях. Метод принимает в качестве входных данных массив томографических проекций $\{p_k\}_{k=0}^{\Phi-1}$, где Φ — это число проекционных изображений в массиве, $\Phi \geq 1$. Каждая проекция p_k

представляет собой двумерный массив (матрицу) или, что эквивалентно, одноканальное изображение. Значение интенсивности пикселя с индексами (i, j) проекции p_k обозначим $p_k(i, j)$, где i – номер строки проекционного изображения, j – номер столбца, $0 \leq i < N$, $0 \leq j < M$, $N \geq 1$, $M \geq 1$. Размеры (N, M) всех проекционных изображений обычно предполагаются одинаковыми и определяются числом строк и столбцов (количеством ячеек) матрицы позиционно-чувствительного детектора. Число проекций Φ числу углов, под которыми объект зондировался.

Проекционные изображения объекта могут быть «сырыми», то есть необработанными проекционными изображениями, зарегистрированными детектором, или лианеризованными. Пример линеаризованного изображения после обработки проекционных данных, представлен на рис. 5.11. Массив си-

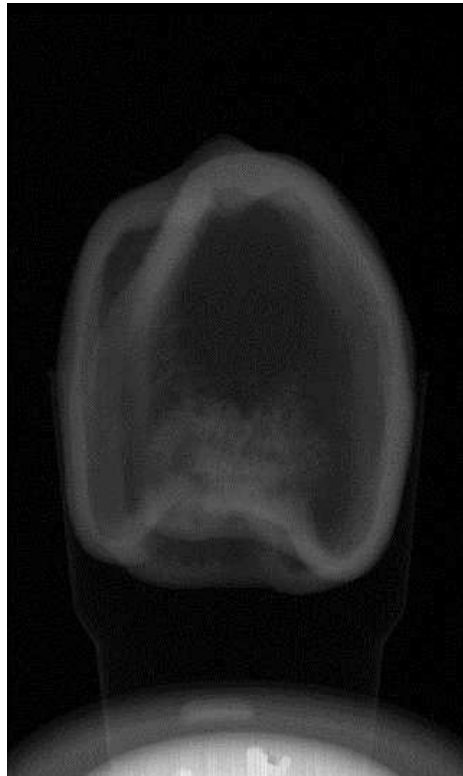


Рисунок 5.11 — Пример линеаризованного проекционного изображения

нограмм объекта $\{s_k\}_{k=0}^{N-1}$ рассчитывается из массива проекционных данных объекта $\{p_k\}_{k=0}^{\Phi-1}$ следующим образом: значение $s_k(i, j)$ интенсивности пикселей с индексами (i, j) синограммы s_k определяется по формуле

$$s_k(i, j) = p_i(k, j) \quad (5.7)$$

k - номер синограммы, i - угол поворота объекта, j - номер столбца детектора, $0 \leq i < \Phi$, $0 \leq j < M$. Количество синограмм равно количеству строк матрицы детектора N , размеры всех синограмм одинаковы и равны (Φ, M) .

Этап *расчет синограмм по проекционным данным объекта* описываемого метода состоит из преобразования массива проекционных изображений (необработанных или линеаризованных) $\{p_k\}_{k=0}^{\Phi-1}$ в массив синограмм $\{s_k\}_{k=0}^{N-1}$ согласно уравнению 5.7. Пример синограммы показан на рис. 5.12. На изображении

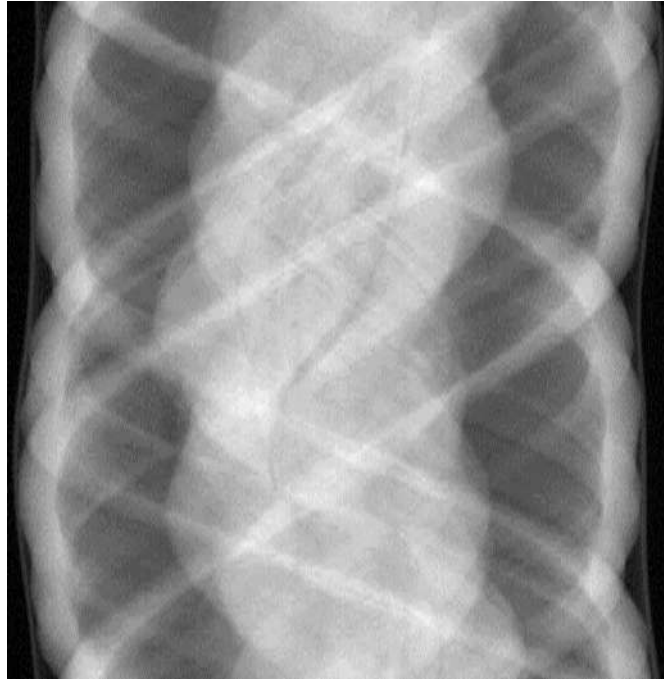


Рисунок 5.12 — Пример синограммы.

синограммы просматриваются вертикальные полосы. В случае использования необработанных проекционных изображений строки синограммы точно попиксельно соответствуют определенной строке матрицы детектора при зондировании объекта под разными углами. Результатом текущего шага является сформированный массив синограмм объекта $\{s_k\}_{k=0}^{N-1}$. Далее каждая синограмма обрабатывается отдельно. Методически индивидуальная обработка каждой синограммы соответствует циклу по всему массиву синограмм. Опишем шаги обработки отдельной синограммы $s \equiv s_k$. Первый шаг заключается в арифметическом усреднении значений синограммы s по ее угловой переменной, что эквивалентно попиксельному арифметическому усреднению значений отдельной строки матрицы детектора по всем проекционным углам. Усредненная строка синограммы представляет собой одномерный массив $\bar{s}$ длины M , эле-

менты которого определяются согласно выражению:

$$\bar{s}(j) = \frac{1}{\Phi} \sum_{\varphi=0}^{\Phi-1} s(\varphi, j), \quad (5.8)$$

где Φ – количество углов поворота объекта. На рисунке 5.13 приведено распределение усредненных значений $s(j)$ синограммы, представленной на рис. 5.12. Усредненная строка синограммы аккумулирует информацию об отдель-

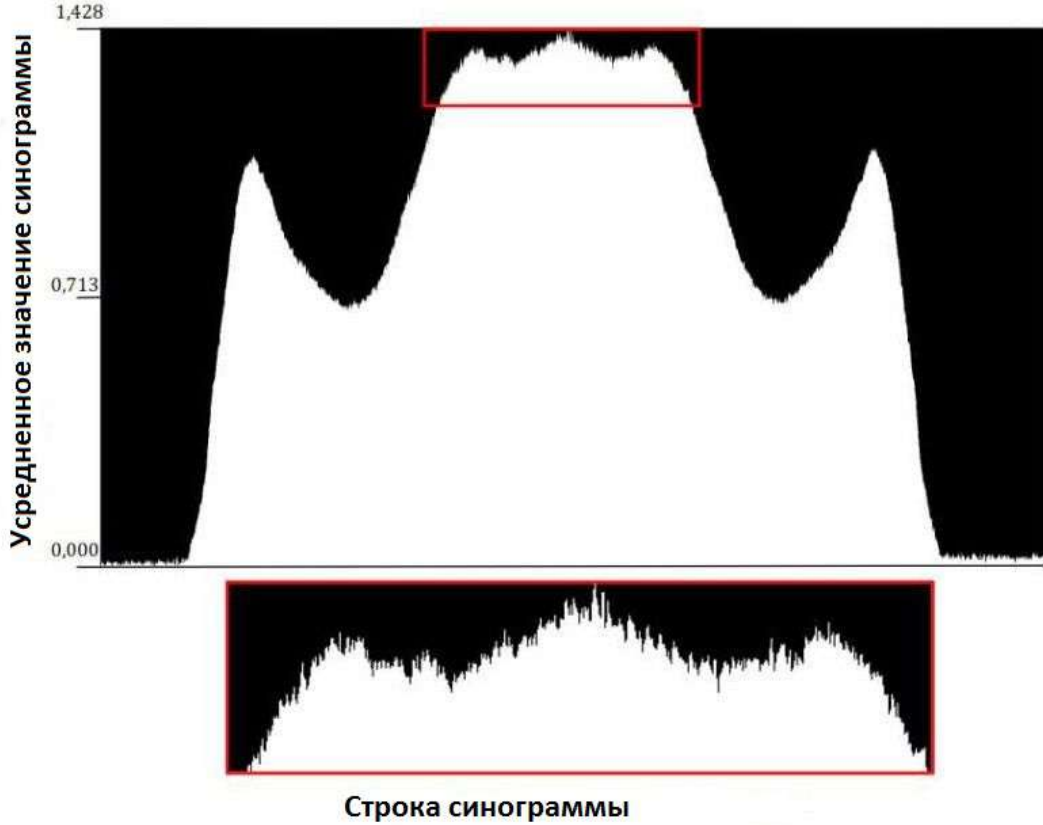


Рисунок 5.13 — Пример распределения усредненных значений синограммы.

ных пикселах матрицы детектора. При этом, в частности, точки локальных пиков $\bar{s}$ могут быть связаны с раскалиброванными или битыми пикселами соответствующей строки матрицы детектора. Результатом 1 итерации цикла является усреднённая синограмма $\bar{s}$ (5.8), которая представляет собой одномерный массив длины M . Её попиксельная разность с исходной усредненной строкой синограммы оценивает величину аддитивной погрешности зарегистрированных значений отдельных пикселей матрицы детектора, которая, в свою очередь, вызвана неточностью калибровки пикселей матрицы детектора или наличием мертвых пикселей в матрице.

На втором шаге итерации цикла усредненное значение синограммы строки $\bar{s}$ фильтруется медианным фильтром $Median_{wing=1}[\cdot] \equiv Median[\cdot]$ с размером

окна 3 пикселя (или, что эквивалентно, параметру размера окна $wing$, равному 1 пикселу). Результат фильтрации усредненного значения синограммы строки $\bar{s}$ медианным фильтром с размером окна 3 пикселя будем обозначать как $Median[\bar{s}]$:

$$Median_{wing=1}[\bar{s}](i) \equiv Median[\bar{s}](i) = \begin{cases} median\{\bar{s}(i-1), \bar{s}(i), \bar{s}(i+1)\}, 0 < i < M-1, \\ \frac{\bar{s}(0)+\bar{s}(1)}{2}, i=0 (M \geq 2), \\ \frac{\bar{s}(M-2)+\bar{s}(M-1)}{2}, i=M-1 (M \geq 2), \end{cases} \quad (5.9)$$

где обозначение $median\{M\}$ определяет медианное значение конечного числового множества $M, M \subset \mathbb{R}$. Процедура медианной фильтрации $Median[\cdot]$ (с размером окна 3 пикселя) удаляет небольшие изолированные спекл-шумы (высокочастотные шумы) и шумы типа «соль-перец» (импульсные шумы) из исходной строки $\bar{s}$ синограммы. Медианный фильтр сохраняет границы. Таким образом, результатом шага 2 является фильтрованная медианным фильтром усредненная строка синограммы $Median[\bar{s}]$. Полученный массив усредненных строк синограммы, прошедший медианную фильтрацию, представлен на рисунке 5.14.

На третьем шаге рассчитываем значения параметров одномерного двустороннего фильтра $Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i}[\cdot]$, который будет применен к результату предыдущего этапа $Median[\bar{s}]$:

1. размер крыла окна фильтра $wing$,
2. латеральное стандартное отклонение σ_x ,
3. стандартное отклонение яркости (интенсивности) фильтра σ_i .

Параметры фильтра не заданы по умолчанию и рассчитываются индивидуально для каждой синограммы. Это позволяет эффективно учитывать структуру целевого объекта, уменьшая выраженность кольцевых артефактов реконструкции. Размер окна фильтра равен $2 \cdot wing + 1$ пикселей. Понятие эффективной площади синограммы - минимальной ширины прямоугольной части изображения синограммы, вне которой значения пикселей синограммы равны нулю, а высота прямоугольника совпадает с высотой изображения синограммы будем использовать для определения половинного размера окна фильтра. Другими словами, эффективная площадь синограммы - это минимальная ширина прямоугольной области синограммы, содержащей все пиксели ненулевой интенсивности и равной по высоте изображению исходной синограммы (см. рис. 5.15).

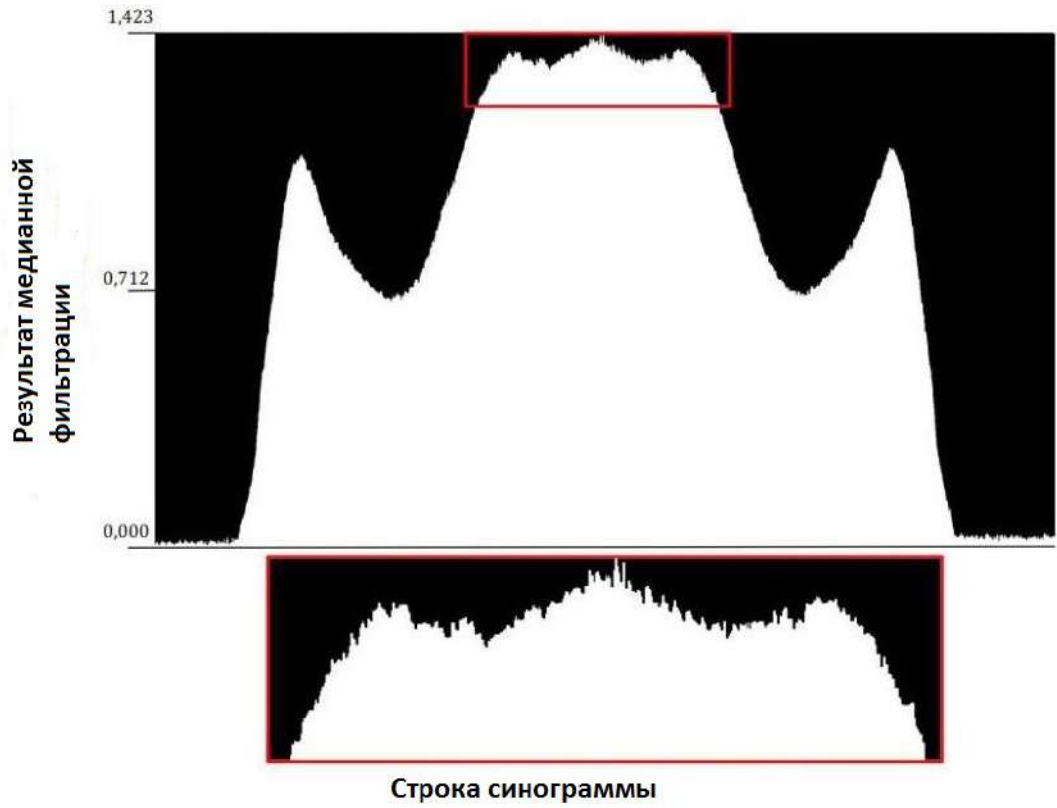


Рисунок 5.14 — Результат применения медианной фильтрации. Увеличенная часть обведена прямоугольной рамкой.

Ширину эффективной области синограммы назовем эффективной шириной си-



Рисунок 5.15 — Эффективная площадь (оранжевая рамка) и эффективная ширина синограммы.

нограммы (см. рис. 5.15). Оценим эффективную ширину $EffectiveWidth(s)$ синограммы s , используя выражение:

$$EffectiveWidth(s) = \#\{i : \bar{s}(i) > threshold, 0 \leq i < M\}, \quad (5.10)$$

где пороговое значение $threshold$ определяется выражением:

$$threshold = 0.015 \cdot (\max(\bar{s}) - \min(\bar{s})) + \min(\bar{s}). \quad (5.11)$$

Здесь $\max(\bar{s})$ и $\min(\bar{s})$ обозначают максимальный и минимальный элементы массива строк усредненной синограммы $\bar{s}$, соответственно. $\#A$ обозначает мощность множества A . Для вычисления минимального и максимального элементов массива строк использованы быстрые алгоритмы сортировки массивов. Оценка эффективной ширины синограммы является вычислительно эффективной, поскольку выполняется не по исходной синограмме s , а по её усреднению $\bar{s}$. В рамках предлагаемого метода автоматического определения параметров фильтра, используемого для фильтрации усредненной строки синограммы, отфильтрованной медианным фильтром $Median[\bar{s}]$, половинный размер окна фильтра предполагается равным 0.55% от эффективной ширины синограммы $EffectiveWidth(s)$:

$$wing = [0.0055 \cdot EffectiveWidth(s)]. \quad (5.12)$$

Здесь $[x]$ обозначает целую часть действительного числа x . Коэффициенты, используемые в формулах (5.11) и (5.12), были подобраны эмпирически в ходе многочисленных экспериментов. Множитель 0.015 в выражении (5.11) позволяет избежать влияния шума проекционных данных при расчете эффективной ширины синограммы. На практике важно ограничить сверху множество допустимых значений параметра $wing$, то есть использовать для расчета параметра $wing$ выражение $\min(0.0055 \cdot EffectiveWidth(s), wing_{max})$. $wing_{max}$ определяется из эксперимента. Настройка размера окна фильтра, пропорционального эффективной ширине синограммы, позволяет учесть степень проявления и характер шума синограммы при фильтрации. Значение параметра стандартного отклонения σ_x фильтра считаем равным одной шестой размера окна фильтра:

$$\sigma_x = \frac{2 \cdot wing + 1}{6}. \quad (5.13)$$

Следуя правилу трёх сигм, при выборе заданного значения $sigma_x$ пренебрежимо малая часть распределения, функция вероятности которой определяет ядро фильтра, выходит за пределы окна. В этом случае интервал длиной $6 \cdot \sigma_x$ пикселей, то есть $2 \cdot wing + 1$ пикселей, согласно выражению (5.13), вокруг центра окна фильтра, охватывает всё окно фильтра и одновременно 99.7% наиболее вероятных значений массива. Другими словами, можно с высокой точностью предположить, что распределение, функция вероятности которого задаётся ядром одномерного билатерального фильтра с предложенным значением (5.13) параметра σ_x , полностью сосредоточено в пространственной области

окна фильтра. В рамках этапа фильтрации одномерным двусторонним фильтром $Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i}[\cdot]$ массива $Median[\bar{s}]$, - значение параметра стандартного отклонения яркости σ_i рассчитывается согласно выражению:

$$\sigma_i = 0.95 \cdot \text{absmax}((Bilateral_{2 \cdot wing, 2 \cdot \sigma_x - \frac{1}{6}, q} \circ Median)[\bar{s}] - Median[\bar{s}]) \quad (5.14)$$

Здесь q равно 0.9-квантилю выборки, составленной из значений элементов массива усредненной строки синограммы $\bar{s}$ или значений интенсивности пикселей исходной синограммы s . Использование строки синограммы $\bar{s}$ позволяет быстро вычислить значение стандартного отклонения яркости, и, кроме того, замена s на $\bar{s}$ в выражении (5.14) не ухудшает качество предлагаемого метода, как показали эксперименты. Разность массивов $(Bilateral_{2 \cdot wing, 2 \cdot \sigma_x - \frac{1}{6}, q} \circ Median)[\bar{s}]$ и $Median[\bar{s}]$ следует рассматривать как поэлементную разность соответствующих массивов. $\text{absmax}(m)$ определяет (абсолютное) значение элемента массива m , имеющего максимальный модуль $\text{absmax}(m) \geq 0$. Оба значения параметров $wing$ и σ_x были введены ранее. Значения коэффициентов выражения (5.14) эмпирически скорректированы в ходе процедуры тестирования предлагаемого метода. Чтобы оценить значение q с использованием $\bar{s}$ или s , гистограммы массивов могут быть построены на основе значений не каждого пикселя строк синограммы, а, например, каждого второго или третьего, в зависимости от конкретных размеров синограммы. При стремлении значения параметра σ_i к положительной бесконечности результат двусторонней фильтрации $Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i}[\cdot]$ поэлементно стремится к результату фильтрации гауссовым фильтром с параметрами $wing$, σ_x . Следовательно, если считать q достаточно большим и превышающим широкий диапазон значений элементов массивов $\bar{s}$ или s (в зависимости от метода вычисления q), результат фильтрации фильтром $Bilateral_{2 \cdot wing, 2 \cdot \sigma_x - \frac{1}{6}, q}[\cdot]$ близок к результату фильтрации гауссовым фильтром со значениями параметров $wing$ и σ_x . Таким образом, разность массивов $(Bilateral_{2 \cdot wing, 2 \cdot \sigma_x - \frac{1}{6}, q} \circ Median)[\bar{s}] - Median[\bar{s}]$ содержит локализованные ошибки в значениях, зарегистрированных детектором, сосредоточенные в нескольких последовательных пикселях строк синограммы, вызванные дефектами детектора и не отфильтрованные медианным фильтром $Median[\cdot]$. Это означает, что величину σ_i , рассчитанную с использованием предложенного выражения, можно интерпретировать как порядок величины ошибки, вызванной несколькими последовательными некалиброванными или битыми пикселями строки матрицы детектора. Рассчитанное значение σ_i

позволяет оценить порядок погрешности значений сигналов, регистрируемых локализованными группами пикселей детектора, и эффективно подавить кольцевые артефакты с учетом индивидуальных особенностей синограммы, и не порождая дополнительных кольцевых артефактов.

После медианной фильтрации усредненной синограммы $\bar{s}$ массив $Median[\bar{s}]$ фильтруется с использованием $Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i}[\cdot]$ с предварительно рассчитанными значениями параметров $wing$, σ_x , σ_i , индивидуально для синограммы s , обрабатываемой на текущей итерации цикла. Результат двусторонней фильтрации будет обозначен как $(Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i} \circ Median)[\bar{s}]$. Значения элементов массива $(Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i} \circ Median)[\bar{s}]$ рассчитываются следующим образом:

$$Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i}[m](i) \equiv (Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i} \circ Median)[\bar{s}](i) = \quad (5.15)$$

$$\frac{\sum_{w \in window} m(w) \cdot e^{-\frac{(w-i)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(m(w)-m(i))^2}{2\sigma_i^2}}}{\sum_{w \in window} e^{-\frac{(w-i)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(m(w)-m(i))^2}{2\sigma_i^2}}}. \quad (5.16)$$

Здесь m обозначает массив $Median[\bar{s}]$, $window = \{k : \max(i - wing, 0) \leq k \leq \min(i + wing, M - 1)\}$ - множество индексов элементов отфильтрованного массива m , лежащих в окне двустороннего фильтра $0 \leq i \leq M - 1$, M , равно ширине детектора или средней ширине строки синограммы. Фильтрация $Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i}[\cdot]$ исправляет ошибки, вызванные техническими дефектами детектора и оставшиеся после медианной фильтрации $Median[\cdot]$. Пример изображения, полученного на текущем шаге, представлен на рис. 5.16.

На следующем этапе вычисляется массив ошибок e длины M - поэлементная разность между массивом $\bar{s}$ и массивом $(Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i} \circ Median)[\bar{s}]$:

$$e(i) \equiv \bar{e}(i) = \bar{s}(i) - (Bilateral_{wing, \sigma_x, \sigma_i} \circ Median)[\bar{s}](i), \quad (5.17)$$

где $0 \leq i \leq M - 1$ - индекс элемента массива ошибок e .

Массив e содержит ошибки в зарегистрированных значениях пикселей матрицы детектора, которые вызваны наличием некалиброванных или поврежденных пикселей детектора и, следовательно, вызывают появление кольцевых артефактов целевой реконструкции.

Результатом текущего шага является вычисленный массив ошибок пикселей матрицы детектора e (пример представлен на рис. 5.17 в виде распределения значений ошибок по ширине детектора: высота столбца соответствует значению

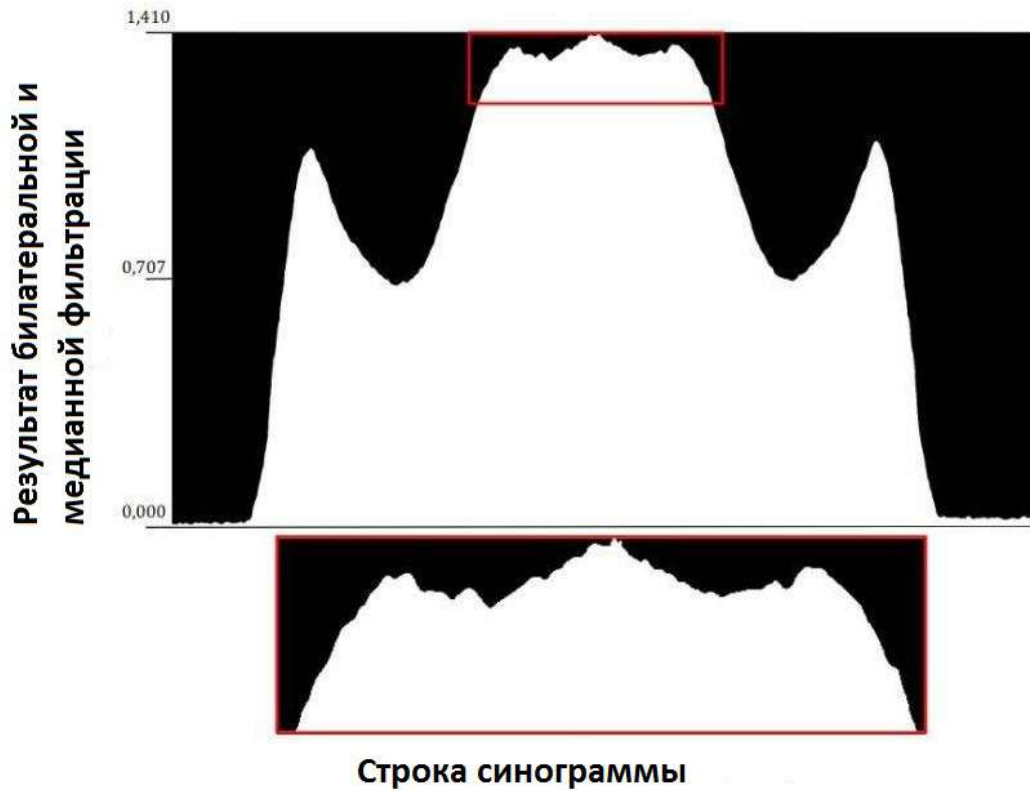


Рисунок 5.16 — Результат применения билатерального фильтра. Увеличенная часть массива обведена прямоугольником.

ошибки, зарегистрированному соответствующим пикселем матрицы детектора, направление столбца связано со знаком значения ошибки; использовалась синограмма с рис. 5.12). Для удаления из данных значений ошибок, вызванных битыми и раскалиброванными пикселями матрицы детектора, из каждой строки исходной синограммы s попиксельно вычитается массив ошибок e . Для исправленной (с удалёнными ошибками пикселей матрицы детектора) синограммы будем придерживаться обозначения $\hat{s}$:

$$\hat{s}(i,j) = s(i,j) - e(i,j), \quad (5.18)$$

где i обозначает номер строки скорректированной синограммы, j обозначает номер столбца скорректированной синограммы или индекс элемента массива ошибок, число проекционных углов Φ и ширина матрицы детектора M определяют размер скорректированной синограммы, $0 \leq i \leq \Phi - 1$, $0 \leq j \leq M - 1$. Размеры исходной s и скорректированной $\hat{s}$ синограмм одинаковы.

В результате выполнения этого шага рассчитана синограмма $\hat{s}$, не содержащая ошибочных значений дефектных пикселей матрицы детектора. Неверные значения пикселей скорректированы. Синограмма $\hat{s}$ соответствует измерениям

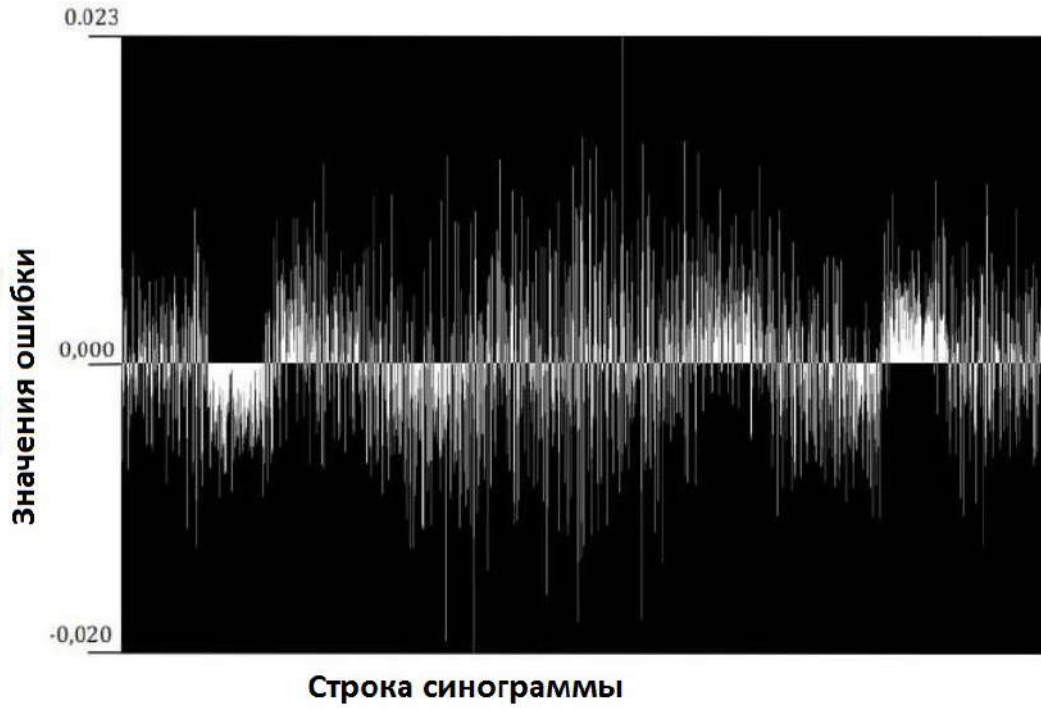


Рисунок 5.17 — Пример распределения значений ошибки по ширине детектора.

объекта в условиях использования идеального детектора. Далее, при необходимости, выполняется коррекция контраста полученной скорректированной синограммы $\hat{s}$.

Пример скорректированной синограммы $\hat{s}$ представлен на рис. 5.18.



Рисунок 5.18 — Пример скорректированной синограммы (с подавленными полосовыми артефактами).

Контрастная коррекция скорректированной синограммы $\hat{s}$ осуществляется путём попиксельного добавления к ней изображения, попиксельно пропорционального исходной синограмме s . Обозначая контрастно-скорректированную синограмму $\hat{\hat{s}}$, полученную в результате контрастирования синограммы $\hat{s}$, можно записать:

$$\hat{\hat{s}}(i,j) = \hat{s}(i,j) + \frac{mean(e)}{M} \cdot s(i,j), \quad (5.19)$$

где i - номер строки скорректированной по контрасту синограммы $\hat{\hat{s}}$, j обозначает номер столбца скорректированной по контрасту синограммы $\hat{\hat{s}}$, множитель

$mean(e) = \frac{1}{M} \sum_{i=0}^{M-1} e(i)$ означает среднее арифметическое значение массива ошибок e , число проекционных углов Φ и ширина матрицы детектора M характеризуют размер скорректированной по контрасту синограммы $\hat{s}$, $0 \leq i \leq \Phi - 1$, $0 \leq j \leq M - 1$. Размеры скорректированной синограммы $\hat{s}$ и исходной синограммы s одинаковы.

Пример синограммы с коррекцией контраста $\hat{s}$ представлен на рис. 5.19.



Рисунок 5.19 — Пример синограммы с коррекцией контраста.

Итерация цикла метода автоматического подавления кольцевых артефактов на этом завершена (см. блок-схему на рис. ??): k -я итерация цикла метода заканчивается вычислением скорректированной по контрасту синограммы $\hat{s} = \hat{s}_k$ из исходной синограммы $s \equiv s_k$.

Набор контрастно скорректированных синограмм $\{\hat{s}_k\}_{k=0}^{N-1}$, вычисленных по набору исходных синограмм $\{s_k\}_{k=0}^{N-1}$ и полученных после выполнения всех итераций цикла метода подавления кольцевых артефактов (в количестве N итераций), используется для высококачественной реконструкции, свободной от нежелательных кольцевых артефактов. При необходимости контрастно скорректированные синограммы могут быть преобразованы в проекционные изображения с контрастной коррекцией по формуле 5.7. На рисунке 5.20 показано сравнение исходной и конечной контрастно-скорректированной синограммы, полученных после выполнения итерации цикла разработанного метода автоматического подавления кольцевых артефактов реконструкции. Можно отметить, что контрастно-скорректированная синограмма содержит полосы, имеющие выраженную интенсивность на исходной синограмме, которые генерируют кольцевые артефакты в области реконструкции. Компонент исходной синограммы, содержащий полосовые артефакты с выраженной интенсивностью, который извлекается и удаляется из синограммы в ходе итерации цикла алгоритма, показан на рисунке 5.20 (с). Следует отметить, что полосовые артефакты синограммы часто визуально неразличимы, что затрудняет ручную коррекцию синограмм для подавления кольцевых артефактов реконструкции. После

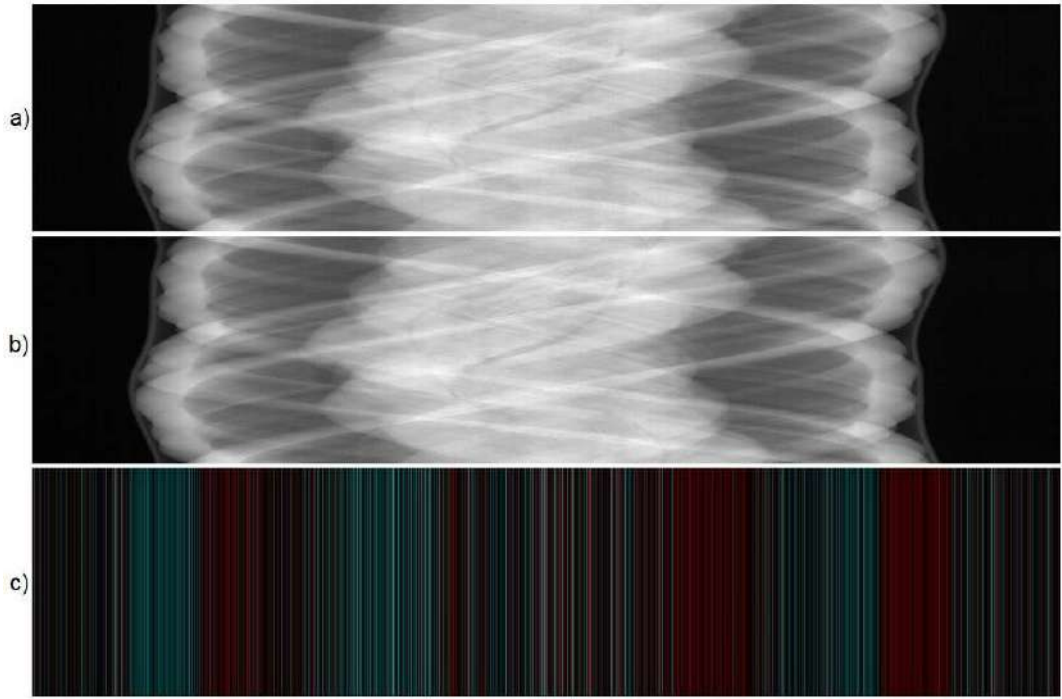


Рисунок 5.20 — Сравнение исходной и конечной контрастных синограмм: а) исходная синограмма, б) скорректированная синограмма (результат итерации цикла метода), в) попиксельная разность исходного и конечного скорректированных изображений синограмм. Попиксельная разность представлена в голубой палитре: выделены положительная и отрицательная компоненты нормализованной разности синограмм, при этом положительная компонента размещена в канале изображения, соответствующем красному цвету, а инвертированная отрицательная компонента заполняет каналы изображения, соответствующие зеленому и синему цветам.

завершения всех итераций цикла метода получается набор контрастно скорректированных синограмм $\{\hat{s}_k\}_{k=0}^{N-1}$, содержащих правильные значения, изначально зарегистрированные дефектными пикселями матрицы детектора. В рамках текущего шага контрастно скорректированные синограммы $\{\hat{s}_k\}_{k=0}^{N-1}$ используются для опциональной реализации других коррекций проекционных данных (в частности, коррекции синограмм с использованием изображений светлого и темного поля). Эти синограммы затем используются при последующем применении алгоритма томографической реконструкции для получения изображения внутренней структуры исследуемого объекта, предназначенного для анализа томографической реконструкции. Использование контрастно скорректированных синограмм $\{\hat{s}_k\}_{k=0}^{N-1}$ позволяет достичь существенно более высокого качества реконструкции, чем при использовании только исходных синограмм $\{s_k\}_{k=0}^{N-1}$. Для

анализа свойств предложенного метода, а также для сравнения результатов применения предложенного метода с результатами применения существующих методов было проведено два эксперимента. В модельном эксперименте проекции рассчитывались с использованием модели формирования проекций при сканировании параллельным пучком. Ширина синограммы 512 пикселей. Количество проекционных углов – 720. Они распределены равномерно в диапазоне от 0 до 360 градусов. Результат реконструкции методом FBP – двумерное изображение размером 512×512 пикселей. Линейный размер пиксела детектора принят равным 1 мкм.

На рисунке 5.21 представлены изображение фантома (ideal), результаты реконструкции для 4 случаев обработки проекций перед подачей в реконструктор и увеличенные участки восстановленных изображений для визуальной оценки выраженности артефактов. В первом из 4 случаев реконструктору передавались неискаженные проекции. Затем проекции искажались. Процедура искажения проекций детально описана в работе [183]. Далее 3 реконструкции выполнялись по проекциям, к которым были применены разные методы обработки: предложенный метод, метод, опубликованный в работе [182], и метод, опубликованный в работе [178].

На рисунке 5.22 приведены горизонтальные сечения восстановленных изображений, чтобы проиллюстрировать свойство сохранения границ областей при использовании методов обработки проекций. Визуальная оценка позволяет сделать вывод об устойчивости всех методов по отношению к положению границы областей.

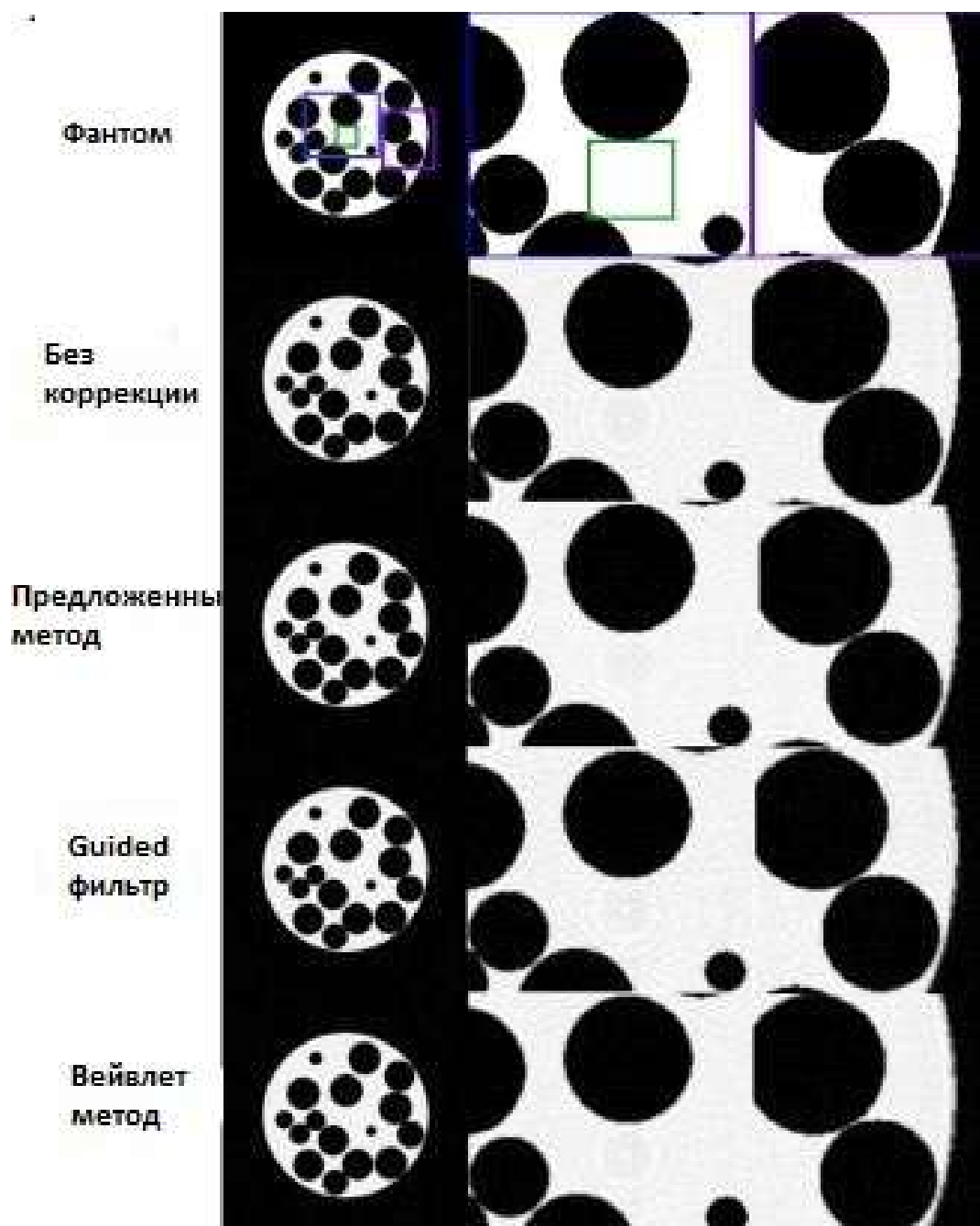


Рисунок 5.21 — Используемый в модели фантом (ideal) и результаты реконструкции для 4 наборов модельных проекций. Сверху–вниз: фантом; реконструкция по проекциям без коррекции; проекции обрабатывались предложенным методом; проекции обрабатывались методом [182]; проекции обрабатывались методом [178].

На рисунке представлены результаты реконструкции по проекциям, собранным в реальных условиях, от реальных объектов. Визуальная оценка представленных изображений позволяет сделать вывод о преимуществах предложенного метода по сравнению с другими, что подтверждается значениями рассчитанных метрик, приведенных в таблице 4. Расчет значения *RASP* (Ring

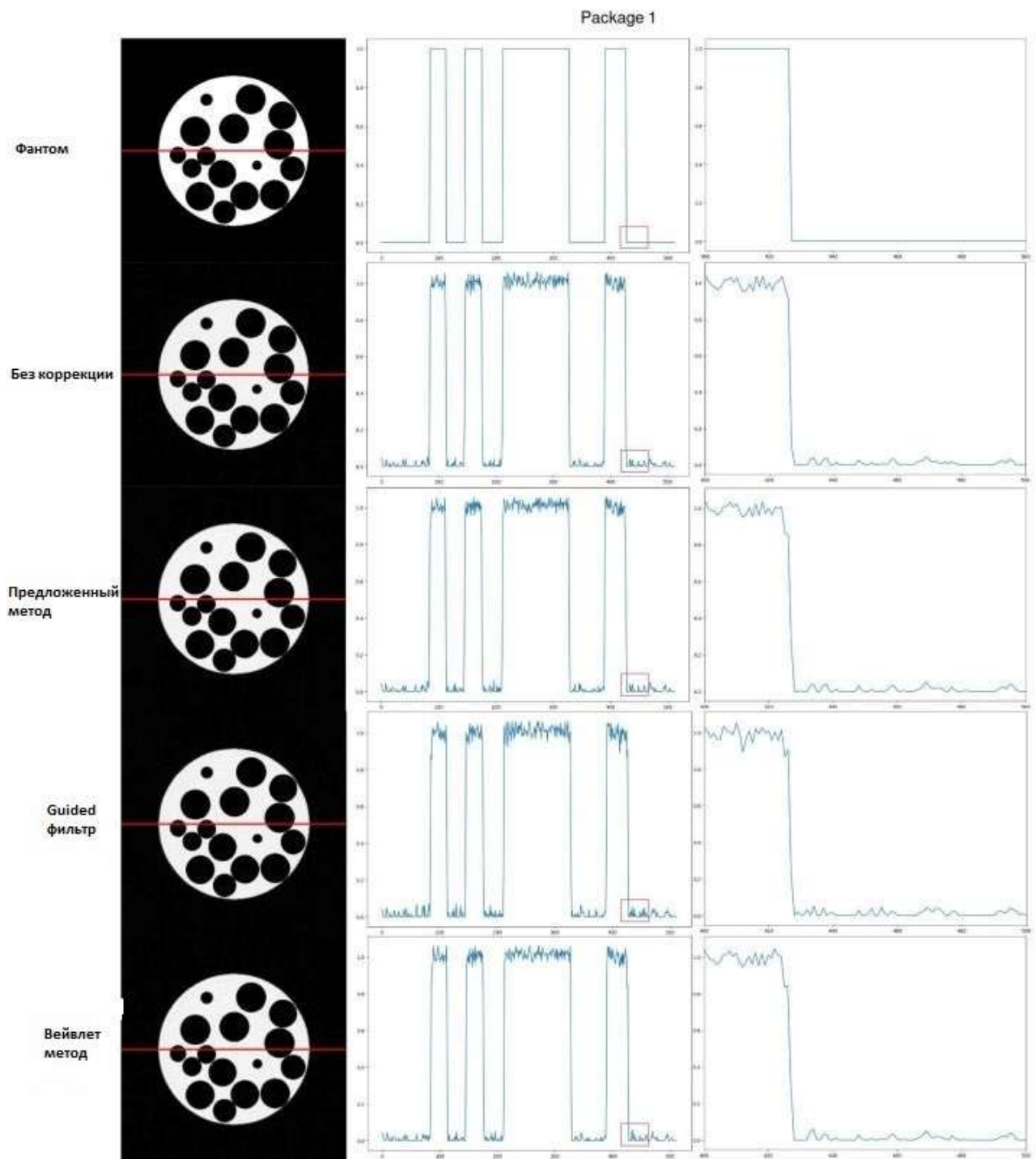


Рисунок 5.22 — Результат реконструкции. Профили восстановленных сечений для контроля сохранения границ.

Artifact Suppression Percentage) проводился согласно [184], SNR (Signal to Noise Ratio) – согласно [185]. Выражения для расчета метрик NRMSE и PSNR представлены в разделе 5.7.

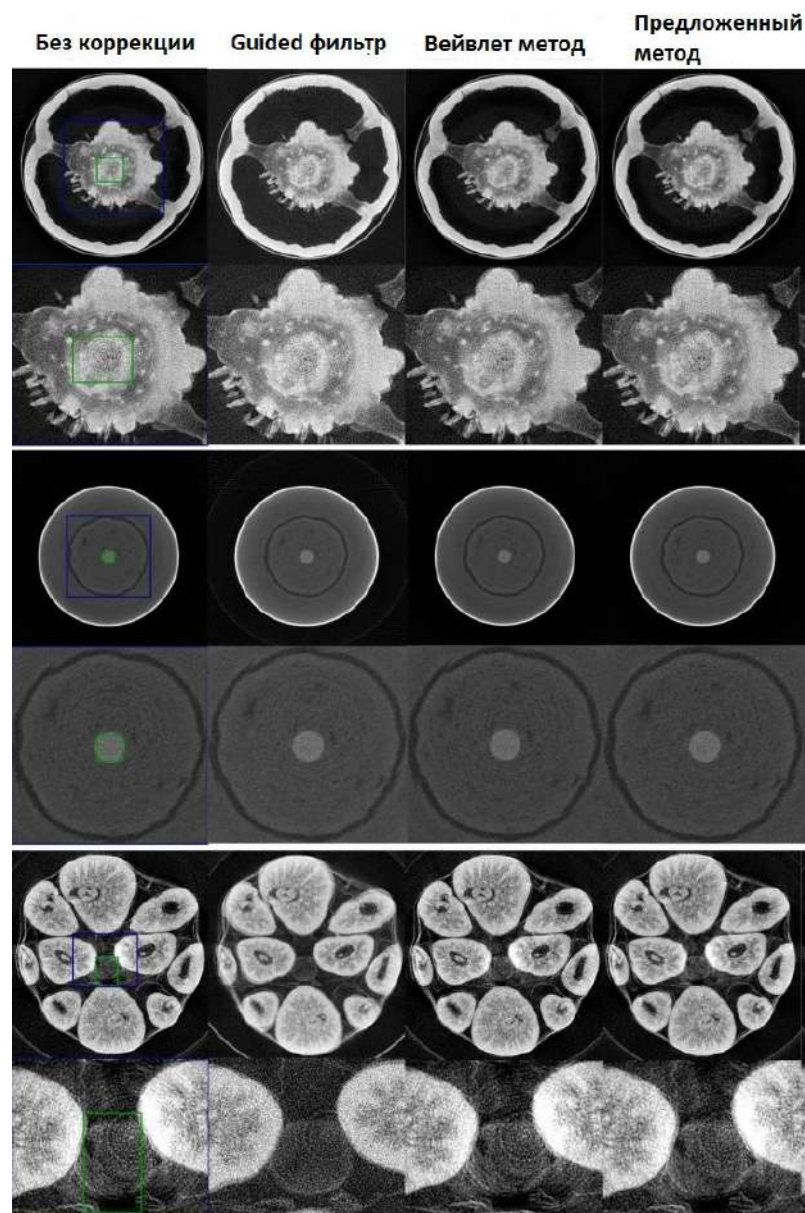


Рисунок 5.23 — Результат реконструкции по наборам реально измеренных томографических проекций. Слева–направо: колонка с результатами реконструкции, проведенной без обработки проекций; проекции обрабатывались методом [182]; проекции обрабатывались методом [178]; проекции обрабатывались предложенным методом.

5.4 Артефакты, возникающие при неточных параметрах положения оси вращения. Автоматический метод калибровки геометрии измерения

Для получения точного реконструированного изображения важными входными параметрами являются значения, задающие реальное положение оси

Таблица 4 — Сравнение методов

Метод метрика	NRMSE	PSNR	SNR	RASP
Без коррекции	0.14	25.6	17.1	0.0
Предложенный	0.1	27.0	19.9	33.5
Gided filter	0.13	24.7	17.9	-9.2
Wavelet FFT	0.11	26.4	19.3	-5.5

вращения. Этот параметр используется при совмещении двух систем координат, одна из которых связана с пространством восстанавливаемого цифрового изображения объекта, а вторая с геометрией проводимого измерения. Значения, передаваемые с томографа автоматически, часто не совпадают с реальными. Это может быть обусловлено техническим несовершенством аппаратной части томографа, высокой скоростью перемещения гантри, вызывающей смещения и наклоны оси вращения при текущем проекционном угле. Использование при реконструкции некорректных значений параметров расположения оси приводит к появлению специфичных артефактов на восстановленных с использованием классических алгоритмов в виде полос и размытостей на границе объекта (рис. 5.24). Существующие методы уточнения значений параметров, описываю-

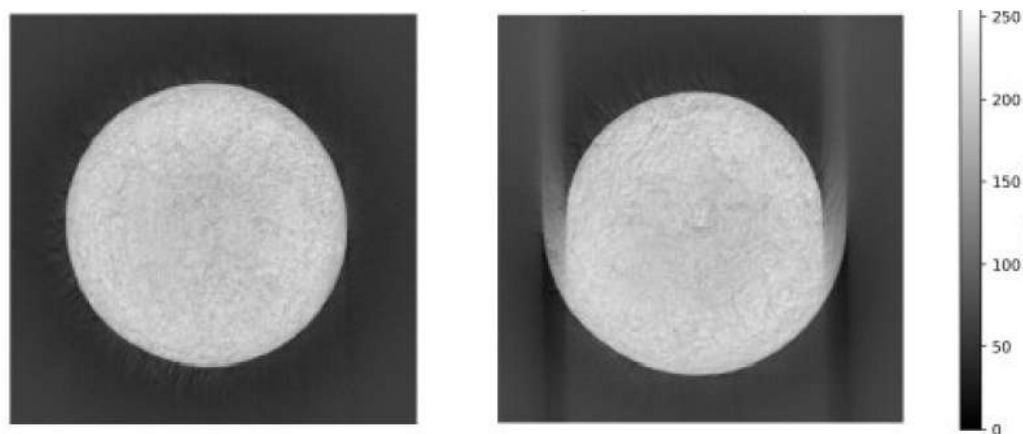


Рисунок 5.24 — Слева - результат реконструкции после передачи в реконструктор верных параметров положения оси. Справа - пример искажения результата реконструкции, вызванного передачей неверных параметров положения оси в реконструктор.

щих положение оси вращения для конусно-лучевой КТ, в основном основаны на обработке дополнительных, оснащенных реперными маркерами проекций объекта [186]. Методы с использованием маркеров предполагают отслеживание траектории движения маркеров. В качестве маркеров используются небольшие

золотые бусины или кремниевые шарики, которые либо устанавливаются на контейнер для образца (например, капилляр), либо помещаются непосредственно в образец или на него [187]. Несмотря на высокую точность, эти методы имеют существенный недостаток: они требуют высоких затрат на более сложную подготовку образца. Если речь идет об измерениях на микронных и субмикронных масштабах, то требуют специальных лабораторий для позиционирования и крепления маркеров. Помимо того, что маркеры могут двигаться во время съемки, в ряде случаев прикрепить их на все время измерения не удастся. Реперные маркеры создают дополнительную локальную плотность, что является распространенной причиной появления артефактов реконструкции, связанных с наличием сильно поглощающих включений. Ранее были предложены и методы автоматической коррекции смещения оси вращения. Для автоматического определения параметров смещения оси в плоскости, параллельной плоскости детектора, было предложено использовать метод прослеживания взаимной корреляции между последовательными проекциями [188]. Однако, показано, что метод плохо работает при малом числе проекционных углов [189]. Для оценки сдвига и наклона оси вращения в плоскости, параллельной плоскости детектора, предлагалось сравнивать частотно-временные спектры [189] проекционных изображений, соответствующих противоположным углам. Метод обоснованно показывает удовлетворительные результаты в геометрической схеме с параллельным пучком, но в схеме с конусным пучком применение этого метода для оценки параметров показало не удовлетворительные результаты. Если ось вращения объекта смещена, то проекционные изображения, соответствующие противоположным углам, геометрически не конгруэнтны. Еще один из подходов к автоматическому определению положения оси вращения базируется на использовании концепции прослеживания положения центра масс на проекциях в итерационных схемах коррекции проекций. Было продемонстрировано, что метод хорошо справляется с дрожанием (при измерениях с высоким пространственным разрешением) в монохроматических измерениях [190], но не точен при определении параметров положения оси вращения при работе с конусными полихроматическими пучками. За последние несколько десятилетий был представлен целый класс методов, называемых итеративным повторным проецированием по текущей реконструкции [191]. Эти методы реализуют стратегию выравнивания проекционных изображений с одновременной реконструкцией. Они основаны на минимизации невязки между измеренными

2D-проекциями с генерируемыми по текущей реконструкции проекциями. То, что они очень затратны по времени, компенсируется способностью работать в условиях, когда пара источник-детектор движется по произвольной траектории. Специфичные для конусно-лучевой компьютерной томографии методы используют прослеживание за отдельными точечными объектами. Параметры оси вращения и положения детектора связываются с геометрическими характеристиками эллиптической траектории наблюдаемой точки объекта. После обнаружения некоторого количества орбит точек объекта оцениваются геометрические параметры положения оси [192]. Основное условие применимости метода – объект должен содержать в себе мелкие контрастные включения. В отличие от описанных выше методов предложенный в рамках данного исследования автоматический метод определения параметров положения оси вращения [193] не использует маркеров, не требует прослеживания ярких точечных объектов, способен работать в полихроматической конусной схеме в условиях неравномерно распределенных проекций. В нем производится обработка собранного в ходе измерения набора проекций. Метод базируется на анализе усредненного проекционного изображения.

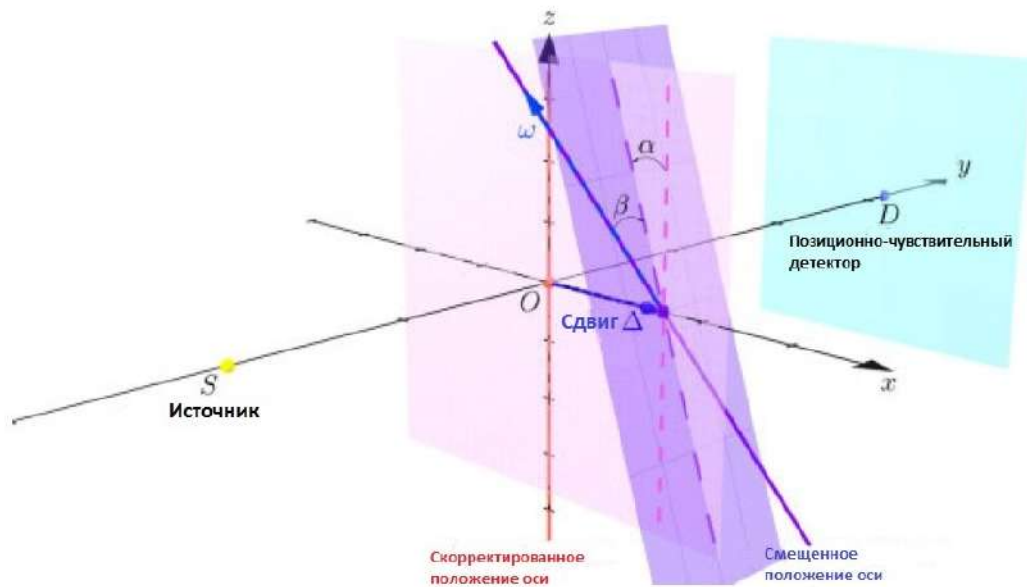


Рисунок 5.25 — Принципиальная схема для параметрической модели отклонения положения оси вращения от заданного положения.

Чтобы параметризовать смещение оси вращения от точного положения введем декартову систему координат XYZ, связав начало координат с положением источника излучения (в предположении, что он точечный), объектом

и центром приемного окна пространственно-разрешающего детектора следующим образом. Идеальное положение оси вращения совпадает с положением оси OZ. Ось OY совпадает с осью оптического тракта, соединяющего источник излучения и центр входного окна детектора (середина центрального пиксела матрицы панели детектора). Плоскость окна детектора перпендикулярна оси OY. поле вида детектора - конус, основанием которого лежит на плоскости входного окна детектора, в вершине которого расположен источник излучения. Плоскость XOZ параллельна плоскости детектора. Ось OZ направлена вверх. XYZ левый ортонормированный базис, образованный векторами, сонаправленными с осями OX, OY, OZ, соответственно, с длиной вектора равной линейному размеру пиксела детектора. Положение источника рентгеновского излучения $S = (0, OS, 0)^T$. Плоскость детектора $d = \{(x, y, z)^T \in R^3 \mid y = OD\}$ содержащая точку $D = (0, OD, 0)^T$, фиксирована в пространстве. Объект, описанный как пространственное распределение линейного коэффициента ослабления $\mu(x, y, z)$ вращается вокруг своей оси вращения. Положение оси вращения объекта в данной задаче предполагается фиксированным. Объект вращается с проекционным дискретным шагом. Регистрируемые данные далее будем называть проекционными данными или проекционным изображением. Данная модель неподвижных источника рентгеновского излучения и детектора со вращающимся объектом полностью эквивалентна модели со стационарным объектом и вращающейся парой источник-детектор. На практике ориентация оси вращения может отличаться от ориентации оси OZ. Положение смещенной и наклоненной оси вращения опишем как $l = \{(x, y, z)^T \in R^3 \mid (x, y, z)^T = \Delta + t \cdot \omega, t \in R\}$. Положение оси вращения задается точкой с координатами $\Delta = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)^T \in R^3$, направление вектором $\omega = (\omega_x, \omega_y, \omega_z)^T \in R^3, \omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2 = 1$. Направление вектора зададим следующими углами. α - угол между проекцией оси вращения на плоскость, параллельную плоскости приемного окна детектора и осью OZ. β - угол между осью вращения и плоскостью, параллельной плоскости приемного окна детектора, она же плоскость XOZ (рис. 5.25). Тогда направление оси вращения будет удобно выразить в виде $\omega = (\sin \alpha \cos \beta, \sin \beta, \cos \alpha \cos \beta)^T$. Сдвиг оси вращения вдоль оси OY не внесет никаких изменений в проекции при параллельном зондировании. При использовании конусного или вейерного пучка возникнет ошибка при определении точного размера воксела цифрового изображения, но артефактов реконструкции при этом не появится. В связи с этим при проведении метрологических

измерений с целью выявления нарушения размеров калибровка данного параметра должна выполняться предварительно. Сдвиг оси вращения вдоль оси Oz начнет сказываться в схемах, в которых положение декартовой системы координат не связывается с положением источника излучения. Здесь данный случай не рассматривается. В дальнейших рассуждениях будем полагать Δ_y и Δ_z равными нулю. Метод последовательно оцениваем значения параметров расположения оси вращения α, Δ_x, β . Перепишем выражение 1.15 с учетом введенных обозначений

$$p(\varphi, x, z) = \ln \frac{I_0(\varphi, x, z)}{I(\varphi, x, z)} = \int_0^{L(\varphi, x, z, \alpha, \Delta_x, \beta)} \mu(l) dl. \quad (5.20)$$

В методе используется понятие усредненного проекционного изображения $\bar{p}(x, z)$, которое определяется как среднее арифметическое всех проекционных изображений объекта $p(\varphi, x, z)_{\varphi \in \Phi}$, зарегистрированных детектором при сканировании объекта под углом $\varphi \in \Phi$ градусов, где Φ обозначает совокупность всех проекционных углов:

$$\bar{p}(x, z) = \frac{1}{|\Phi|} \sum_{\varphi \in \Phi} p(\varphi, x, z). \quad (5.21)$$

Свойство симметричности усредненного проекционного изображения $\bar{p}(x, z)$ представляется ключевым идеологическим содержанием первого этапа метода выравнивания оси вращения. Траектория произвольной точки вращающегося вокруг оси объекта представляет собой окружность определенного радиуса с центром в точке на наклоненной и смещенной оси вращения. Будучи параллельно (при параллельном сканировании) или центрально (в конусно-лучевой моде) спроецированной каждая круговая траектория точки объекта отобразится в эллипс на плоскости детектора d . Поэтому усредненное проекционное изображение $\bar{p}(x, z)$ объекта с богатой морфологией можно рассматривать как изображение, состоящее из счетного набора перекрывающихся и пересекающихся эллипсов различной яркости, образованных разными точками объекта. $\bar{p}(x, z)$ симметрично, и его ось симметрии, обозначенная γ , образует угол α с вертикальным направлением OZ при использовании конусного пучка для зондирования. Значение параметра Δ_x определяется координатой пересечения γ с параллельной проекцией оси OX на плоскость окна детектора. Для оценки наклона оси симметрии усредненной проекции α применялся тензор инерции. Ориентация оси симметрии усредненного проекционного изображения коллинеарна одному из собственных векторов тензора. Если Δ_x равно нулю, то

найденная оценка положения оси симметрии $R_\alpha [\bar{p}(x, z)]$ совпадает с несмещенной линией пересечения $OY \cap d$. Зеркальное отображение одной половины половины изображения усредненной проекции должно отобразить ее саму в себя. Т.е. будем решать оптимизационную задачу

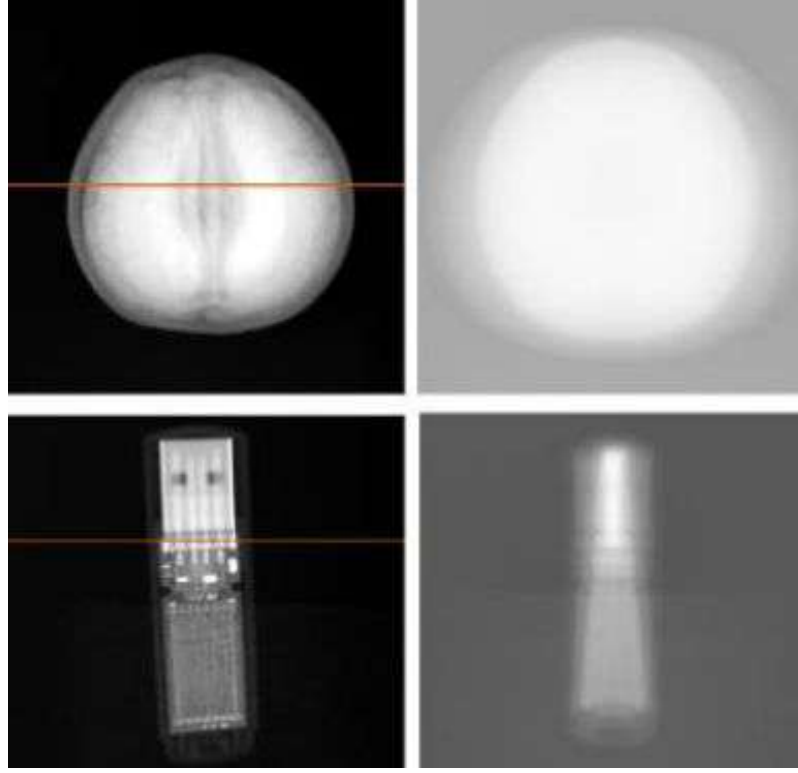


Рисунок 5.26 — Изображения объектов, участвующих в сравнении методов поиска и коррекции положения оси.

$$l(\alpha, \Delta x) = \| R_{-\alpha}[\bar{p}] - (S_{\Delta x} \circ F \circ R_\alpha)[\bar{p}] \|_1 \rightarrow \min. \quad (5.22)$$

где $R_{-\alpha}$ – оператор поворота изображения на α градусов вокруг центра МРІ, F – оператор зеркального отражения изображения в горизонтальном направлении, $S_{\Delta x}$ – оператор сдвига изображения на Δx пикселей в горизонтальном направлении (с линейной интерполяцией в случае сдвига на не целое число пикселей), $\circ$ — операция композиции, l_1 – норма Минковского. Мы называем целевую функцию $l(\alpha, \Delta x)$ функцией оценки асимметрии оси МРІ относительно прямой линии, которая образует угол наклона α с вертикальным направлением и которая смещена на Δx пикселей от центра МРІ. Чем меньше значение $l(\alpha, \Delta x)$, тем больше уверенность в том, что $z = \text{ctg } \alpha(x - \Delta x)$ представляет собой уравнение оси симметрии МРІ (в рамках модели оси вращения рис 5.26). Таким образом, действительно, требуемые значения угла наклона α^* и смещения Δx^* оси симметрии МРІ обеспечивают минимум целевой функции $l(\alpha, \Delta x)$.

Для поиска решения итерационным методом использовался пирамидальный подход, описанный в деталях в работе [194]. Проведено сравнение предложенного метода с методом фазовой корреляции [195]. На рисунке 5.26 измеренные проекции для двух объектов, участвующих в сравнении методов (слева). Справа на том же рисунке представлены их усредненные проекции. Для фрукта было измерено 400 проекций. Размер проекционного угла $0,9^\circ$. Было проведено восстановление цифрового изображения размером $3000 \times 3000 \times 400$ вокселей. Использовалась конусная схема сканирования. Увеличение составило 1.52. Для USB использовалась конусная схема сканирования. Увеличение составило 4.48. Размер проекционного угла $0,9^\circ$. Было проведено восстановление цифрового изображения размером $3000 \times 3000 \times 400$ вокселей. Результаты сравнения, представленные в таблице, подтверждают, что предложенный метод выиграл по точности у метода фазовой корреляции, поскольку все найденные значения параметров находятся в диапазоне ручного выбора значений. Параметры, рассчитанные методом фазовой корреляции не релевантны.

Таблица 5 — Сравнение предложенного метода с методом фазовой корреляции [195]

Пакет	Ручная оценка	Фазовая корреляция	Предложенный метод
параметры	сдвиг, наклон	сдвиг, наклон	сдвиг, наклон
фрукт	6.0:7.0, -1.0:1.0	4.0, -0.008	7.0, -0.33
USB	4.0:5.0, 0.0:1.0	5.0, 44.8	4.2, 0.0

На рисунке 5.27 приведены результаты реконструкции, визуально подтверждающие выводы сделанные по результатам анализа таблицы.

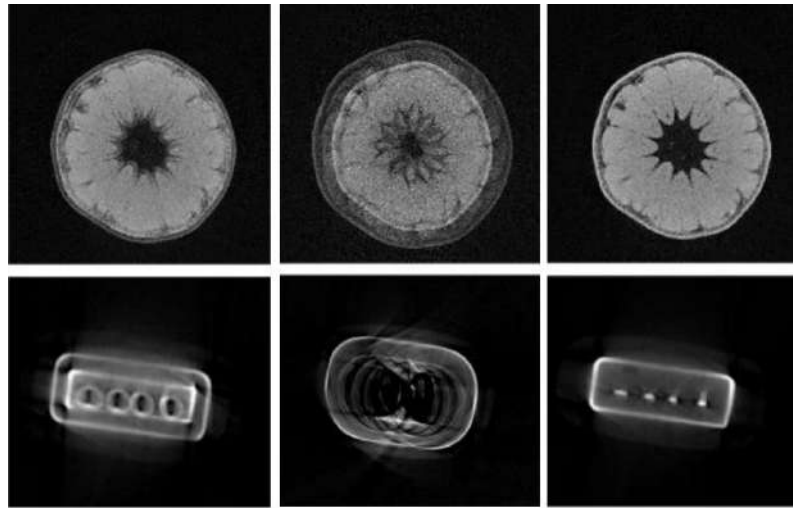


Рисунок 5.27 — Результаты реконструкции, выполненной без коррекции параметров (слева), коррекция методом фазовой корреляции (по центру), коррекция предложенным методом (справа).

5.5 Артефакты при наличии сильнопоглощающих включений. Алгебраический метод уменьшения выраженности артефактов

Поскольку в методе компьютерной томографии (КТ) для восстановления морфологической внутренней структуры требуется серия рентгенограмм, собранных с разных ракурсов, пространственное распределение локальных областей с разными оптическими свойствами оказывает существенное влияние на точность реконструкции. Ослабленное при прохождении через объект рентгеновское излучение регистрируется позиционно-чувствительным детектором. При наличии в объеме областей с высокой оптической плотностью те пиксели детектора, в которые попадают лучи, встретившие на своем пути включения с высоким поглощением, оказываются пикселями с нулевой нагрузкой. Практически полное поглощение лучей, пересекающих включение, при выполнении операции обратного проецирования порождает яркие полосы вдоль соответствующих направлений. Если объект сканировался монохроматическим излучением, то восстановленное цифровое изображение представляет собой пространственное распределение коэффициента линейного ослабления рентгеновского излучения. При использовании для зондирования полихроматического излучения, восстановленное изображение интерпретировать становится сложнее [196], поскольку восстановленный коэффициент ослабления характеризует теперь ослабление спектра локальным объемом. Если в исследуемом образце

присутствуют включения элемента с относительно высоким атомным номером, это приводит к возникновению характерных «металлических» артефактов на восстановленном изображении. Термин «относительно высокий» атомный номер использован не случайно. В данном контексте подразумевается, что высокий он относительно энергии зондирующего излучения. Т.е. связь атомный номер – энергия зондирующего излучения описывает способность элемента с заданным номером ослаблять рентгеновское излучение конкретной длины волны, т.е. атом имеет высокую вероятность провзаимодействовать с фотонами заданной энергии. Применяемая процедура томографической реконструкции по измеренным монохроматическим проекциям позволяет получить послойно трёхмерное изображение внутренней структуры объекта. На факт возникно-

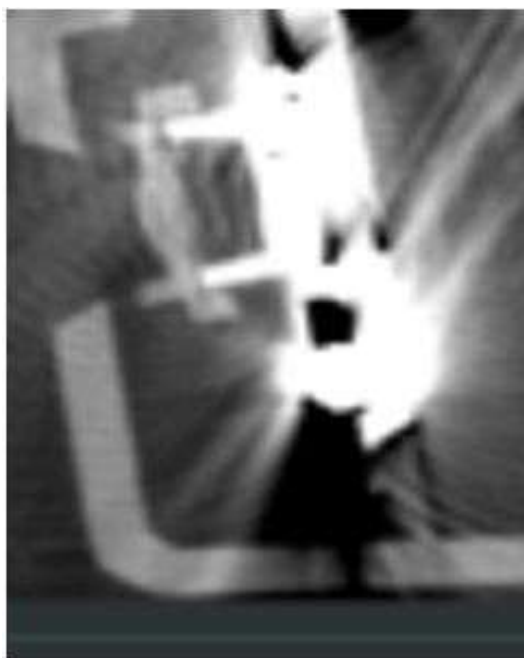


Рисунок 5.28 — Участок сечения объекта, содержащего сильнопоглощающее включение. Реконструкция выполнена методом FDK.

вения артефактов в виде расходящихся из точки объема радиальных полос при проведении медицинских исследований обратили внимание уже в середине 80-х [197]. Эффективных способов подавления таких искажений не удалось найти до сих пор [198; 199] и их поиски не прекращаются [200]. «Металлические» артефакты визуально выглядят как лучи, идущие в радиальных направлениях от включения (рис. reffig:exam), и неприятны тем, что могут скрывать или, наоборот, имитировать патологии в случае медицинских приложений, усложняя автоматическое выделение областей интереса на томограммах [201], в случае

промышленных приложений - прятать или порождать трещины и полости на изображениях промышленных изделий, затрудняя проведение дефектоскопии.

Производителями томографов используются различные приемы для борьбы с артефактами данного типа. В их числе применение для зондирования нескольких спектров [202], автоматическая модуляция тока рентгеновской трубки [203], фильтрация результатов восстановления [204; 205], а также предобработка адаптивными фильтрами синограмм, полученных в условиях недостатка фотонов [206; 207]. Последняя коррекция состоит в сглаживании участков проекций, соответствующих сильно поглощающим частям образца, перед восстановлением изображения [197]. Существует практика совместной обработки изображений, собранных не только в разных спектральных диапазонах [208], но и сканов однофотонной эмиссионной компьютерной томографии для создания псевдо-КТ изображения [209]. Создаются специальные методы реконструкции. В работе [210] описана модификация метода максимального правдоподобия, использующая процедуру расчета веса каждого пиксела при обратном проецировании, базирующуюся на анализе значений измеренных проекций.

В диссертационном исследовании предложено решать задачу реконструкции при наличии в объекте сильно поглощающих включений следующим образом. Поскольку проблема возникает вследствие того, что значение регистрируемого сигнала в пикселе детектора лежит в области нуля (близко к нулю), то при выполнении процедуры линеаризации они превращаются в большие значения, дающие яркие полосы при обратном проецировании. Предложено решать **задачу** условной оптимизации с ограничениями в виде неравенств [211]. Не ограничивая общности рассмотрим двумерный случай. Покроем пространство восстанавливаемых функций сеткой квадратных пикселей. Внутри пиксела значение восстанавливаемой функции считаем постоянным. Как и в предыдущих разделах обозначим распределение линейного коэффициента ослабления $\mathbf{x} \in R^2$. Тогда $\mathbf{I}$ - вектор измеренных значений, $\mathbf{p}$ - вектор линеаризованных значений, W - проекционная матрица, $\mathbf{x}$ - искомое решение. Системы линейных уравнений:

$$W\mathbf{x} = \mathbf{p} \quad (5.23)$$

связывает линеаризованные значения измеренных сигналов и компоненты вектора искомого решения. W – проекционная матрица используемой схемы

измерения. Пусть используется бинарная модель луча. Стандартный подход к решению системы – минимизация L_2 нормы невязки между измеренными значениями и значениями, рассчитываемыми на текущей итерации, приводит к появлению ярких лучей, расходящихся от включения вдоль направлений зондирования. Простой способ обойти проблему – игнорировать такие значения, и вместо этого решать следующую систему:

$$\|T(W\mathbf{x} - \mathbf{p})\|^2 \rightarrow \min, \quad (5.24)$$

где матрица P имеет отличными от нуля только те диагональные элементы, для которых значение измеренного сигнала больше заданного порога $I_i > I_{min}$, т.е.

$$T_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{if } i = j \text{ and } I_i > I_{min} \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (5.25)$$

Как показал эксперимент, это приводит к возникновению областей тени, прилегающих ко включению (правое изображение на рисунке 5.30) Чтобы сохранить информацию, содержащуюся в проблемных лучах с малым числом фотонов, заменим равенства неравенствами $w_i^T x > B$, где B рассчитывается, согласно значению I_{min} . Перепишем 5.25 с учетом сказанного:

$$\|T(W\mathbf{x} - \mathbf{p})\|^2 \rightarrow \min \text{ s.t. } QW\mathbf{x} \geq B, \quad (5.26)$$

где $Q = E - T$, E - единичная матрица. Задача решалась методом квадратичного программирования [211]. Несмотря на то, что ограничения математически корректны, было обнаружено, что получаемое решение неустойчиво при наличии высокого шума в проекционных данных. Поэтому вместо того, чтобы требовать строгого выполнения ограничений, было предложено решать задачу с «мягкими» ограничениями [212]:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \|T(W\mathbf{x} - \mathbf{p})\|^2 + \alpha \| [QW\mathbf{x} - B]^- \|^2. \quad (5.27)$$

Использовался метод штрафных функций с мягкими ограничения. Здесь $[y]^- = \min(0, y)$. T - бинарная матрица, единичные элементы соответствуют индексам, для которых $I_i > 0$. α регулирует эффект сглаживания. Q - бинарная матрица для выделения элементов, соответствующих $I_i = 0$. B - вектор пороговых значений [211]. Для сравнения результатов работы двух методов был проведен модельный эксперимент. Фантом, представленный на левом изображении

рисунка 5.29 был использован для расчета синограммы (правое изображение рисунка 5.29). Расчет синограммы проводился для монохроматического режима 55 кэВ. Объект имитировал зубы, т.е. коэффициенты ослабления соответствовали ослаблению дентина. Тi область в среднем зубе (модель импланта) имитировала сильно поглощающее включение. Библиотека XRayLib [136] использовалась для расчета коэффициентов ослабления. Размер поля вида 256×256 пикселей. Расчеты проводились для 512 проекционных углов, равномерно распределенных в диапазоне от 0 до 180 градусов. На рис. 5.30 приведено сравнение результатов

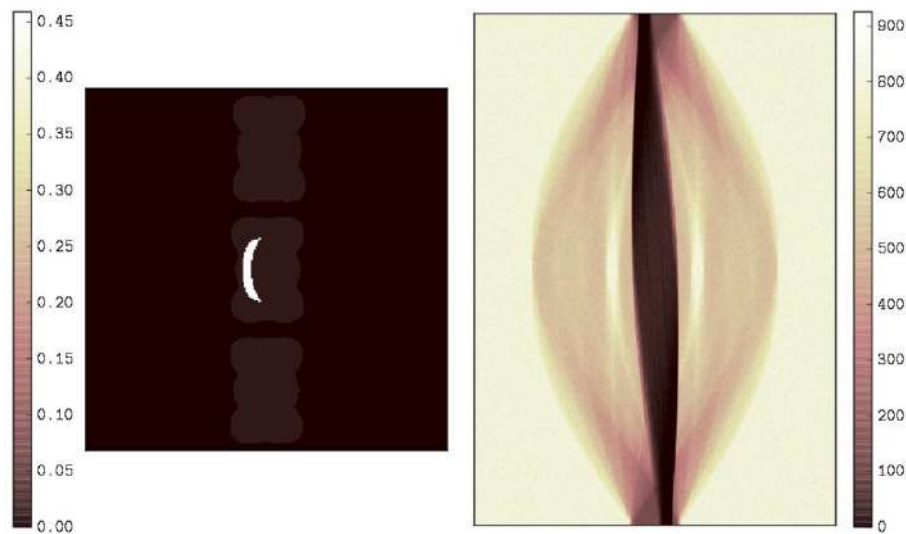


Рисунок 5.29 — Слева: используемый в эксперименте фантом. Справа: рассчитанная от фантома синограмма В.

работы двух методов реконструкции модельного изображения, представленного на рис. 5.29. Слева приведена реконструкция предложенным методом с мягкими ограничениями. Справа - реконструкция алгебраическим методом, в котором из системы линейных уравнений были удалены уравнения с правой частью, близкой к нулю. На правом рисунке присутствует область тени выше и ниже включения, искажена граница сильнопоглощающей области. Проиллюстрируем применение метода для реконструкции цифрового изображения реального объекта. В качестве объекта был выбран молочный зуб, удаленный, в связи с начавшимся разрушением, до того, как резорбция его корней была завершена. Оставшиеся участки корней, образовали полость. Было проведено два томографических измерения. В первом из них, назовем его E1, был прозондирован молочный зуб (Sample1) с полостью. Во втором эксперименте E2 в полость была помещена частичка свинца, имитирующая сильно поглощающее включение

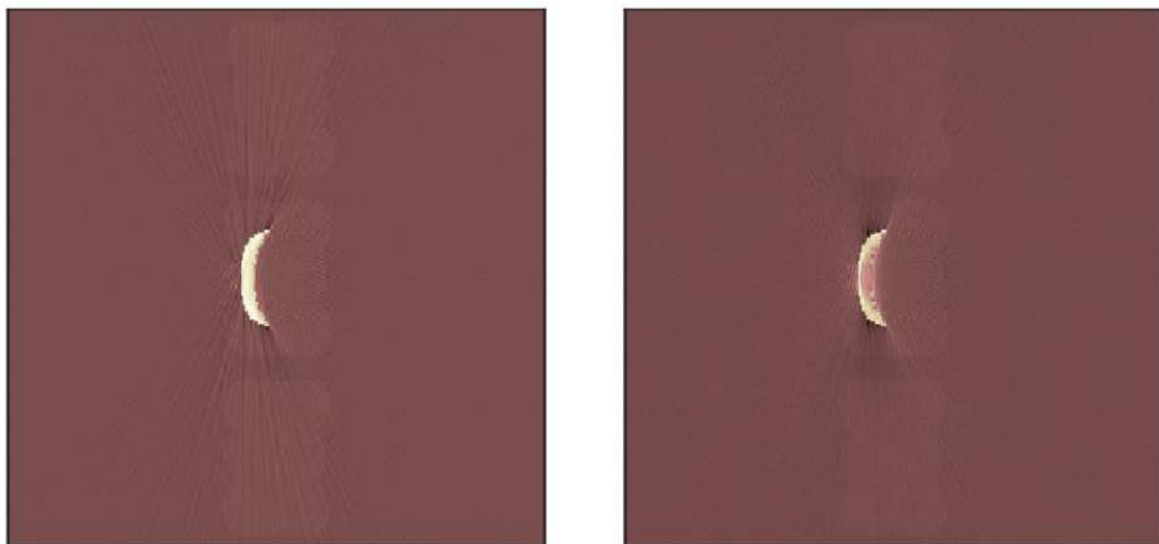


Рисунок 5.30 — Слева: результат реконструкции предложенным методом [212]. Справа: результат реконструкции методом без учета сигналов, лежащих в области сильного поглощения(5.24).



Рисунок 5.31 — Фотография тестового образца.

(Sample2). Нормированные проекции и соответствующие синограммы для двух экспериментов представлены на рисунке 5.32. Размеры зуба составлял примерно 7x7x12 мм, включение - около 0.6 мм. Фотография зуба без включения приведена на Рис. 5.31. Измерения проводились на лабораторном рентгеновском микротомографе ТОМАС [213]. Общий вид установки показан на рисунке 5.34.

Рентгеновская трубка с молибденовым анодом использовалась для зондирования. Рабочие параметры трубки – 40 кВ и 20 мА, время сбора одной томографической проекции составляло 5 с. Для регистрации проекций был использован детектор XIMEA xiRay 11 Mpix с размером пиксела 9 мкм. Рас-

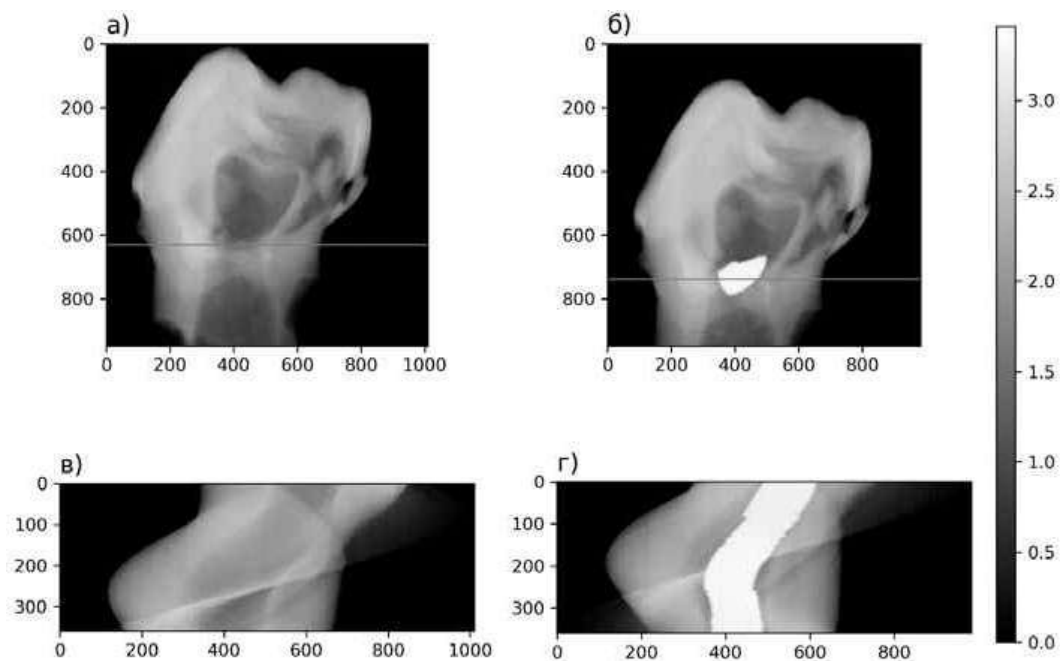


Рисунок 5.32 — Изображения нормированных проекций молочного зуба. (а) — без включения, (б) — со свинцовым включением. (в) и (г) — синогаммы отмеченных горизонтальными линиями сечений.

стояние от источника до объекта - 1.2 м (по вакуумному пути), от объекта до детектора - 0.05 м. Зарегистрировано 400 проекций, снятых в диапазоне $0-180^\circ$ с равномерным шагом по углу в 0.5° градуса. Рентгеновский пучок имел малую (менее 1°) угловую расходимость, что позволило считать его параллельным. На Рис. 5.32(а, в) представлены нормированная проекция зуба со свинцовой частицей и синогамма отмеченной линией сечения, передаваемые на реконструкцию. На Рис. 5.32(б, д) представлены нормированная проекция зуба со свинцовой частицей и синогамма отмеченной линией сечения, передаваемые на реконструкцию.

Реконструкция выполнялась четырьмя методами: методом свертки и обратной проекции (FBP) [40]; алгебраическим методом реконструкции без регуляризации (SIRT) [133]; предложенным методом с мягкими ограничениями (SOFT SIRT) [212] и методом SIRT с регуляризацией по полной вариации (SIRT TV) [128] (рис. 5.36). На рис. 5.35 представлены результаты реконструкции сечения зуба без включения. Результаты реконструкции горизонтального сечения зуба, содержащего включение, представлены на 5.36. Вертикальное сечение реконструированного изображения стандартным методом без коррекции приведен на рисунке 5.37. Визуальный анализ восстановленных сечений демонстрирует наличие линейчатых артефактов на изображениях с включением. После

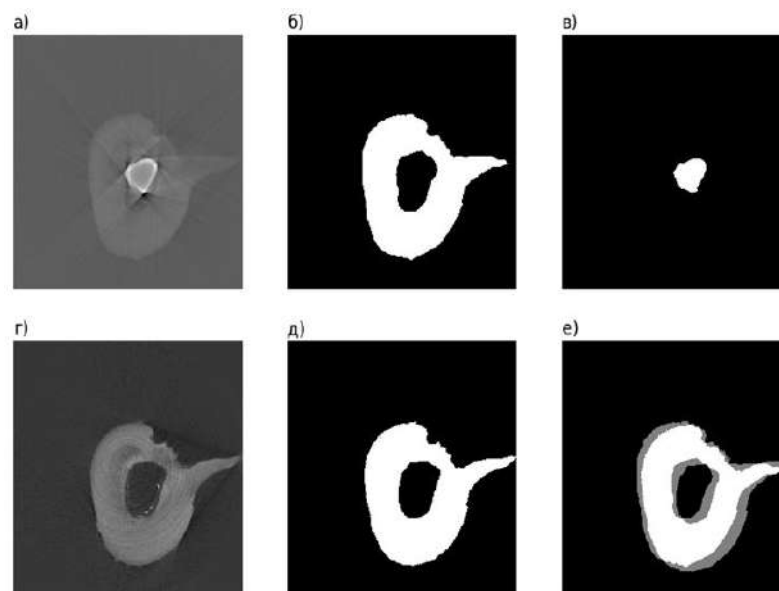


Рисунок 5.33 — К анализу областей интереса. (а) Реконструкция сечения зуба с включением. (б) Результат бинаризации с пороговым отсечением с операцией замыкания ROI1. (в) Результат бинаризации с пороговым отсечением ROI2. (г) Реконструкция сечения зуба без включения. (д) Результат бинаризации с пороговым отсечением с операцией замыкания. (е) Результат наложения (б) и (д).



Рисунок 5.34 — Лабораторный микротомограф (фото).

первого томографического измерения образец снимался с держателя для введения в полость сильно поглощающего включения. Совмещение восстановленных изображений проводилось после реконструкции [214]. На восстановленных изображениях анализировались две области. Первая область (ROI1) содержит дентин, вторая (ROI2) – свинец. Сегментация областей проводилась с ис-

пользованием пороговой обработки восстановленных изображений (рис. 5.33). Метрики – среднеквадратичная ошибка (RMSE) [215] и индекс структурного сходства (SSIM) [216] были использованы, чтобы оценить качество результатов реконструкции. Результаты представлены в Таблице 6. Для области (ROI1) рассчитывались метрики между E1 и E2 для каждого из методов реконструкции. Для области (ROI2) рассчитаны метрики между результатом, полученным с использованием метода с регуляризацией, и результатом анализируемого метода. Результаты представлены в Таблице 7 Алгебраический подход с регуляризацией показал самое высокое качество реконструкции области с дентином (ROI1), метод с мягкими ограничениями выиграл по качеству реконструкции в области включения (ROI2).

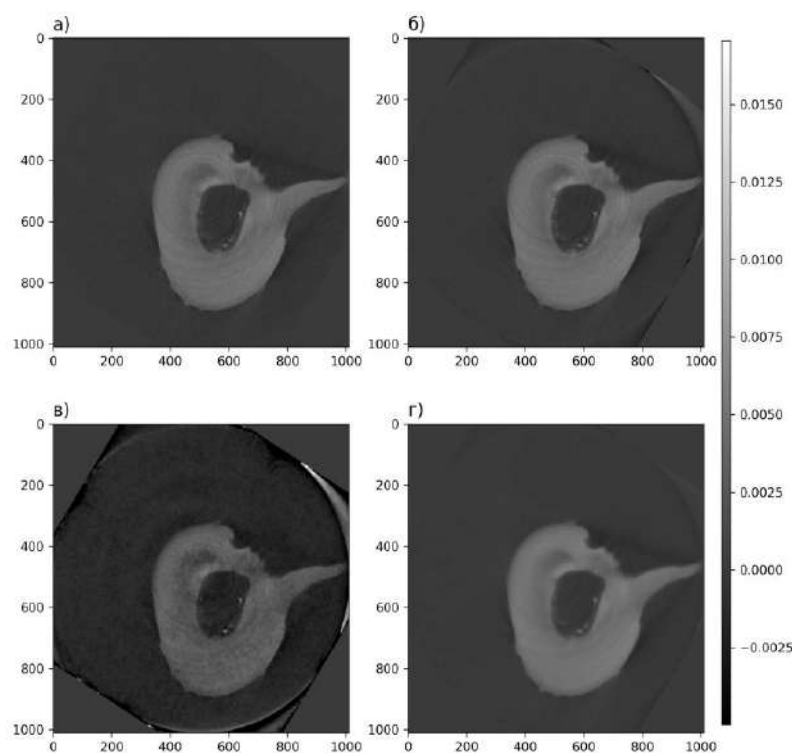


Рисунок 5.35 — Результат восстановления сечения зуба без включения Sample1 методами FBP (а), SIRT (б), SOFT SIRT (в), SIRT TV (г).

Таблица 6 — Сравнение значений RMSE и SSIM для ROI1

	FBP	SIRT	SOFT SIRT	SIRT+TV
RMSE	0.36×10^{-3}	1.31×10^{-3}	0.94×10^{-3}	1.26×10^{-3}
SSIM	0.99	0.98	0.95	0.99

Для ROI2 визуальный анализ показывает, что при сравнении с результатом реконструкции, выполненной методом SOFT SIRT, остальные методы

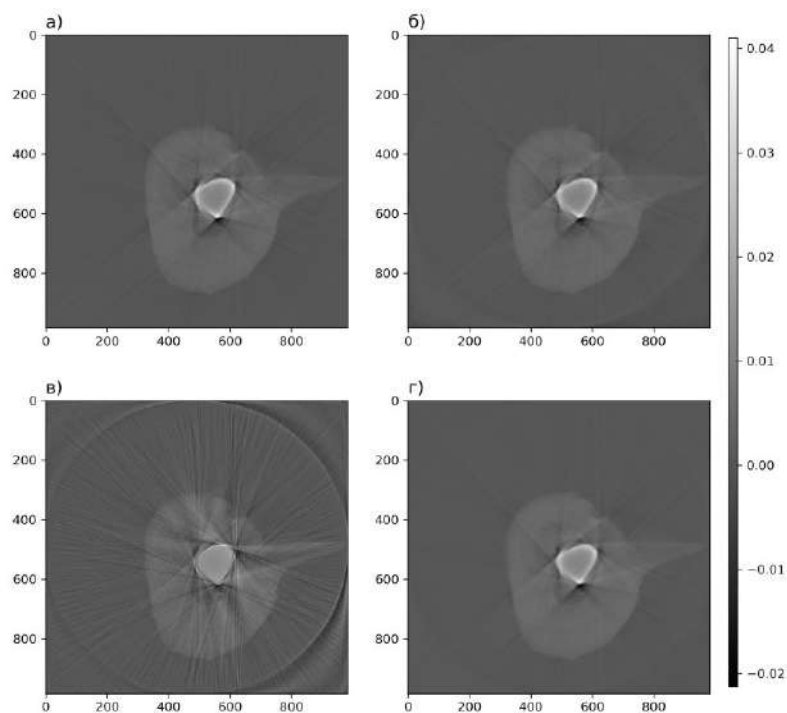


Рисунок 5.36 — Результаты реконструкции сечения зуба со свинцовым включением методами FBP (а), SIRT (б), SOFT SIRT (в), SIRT TV (г).

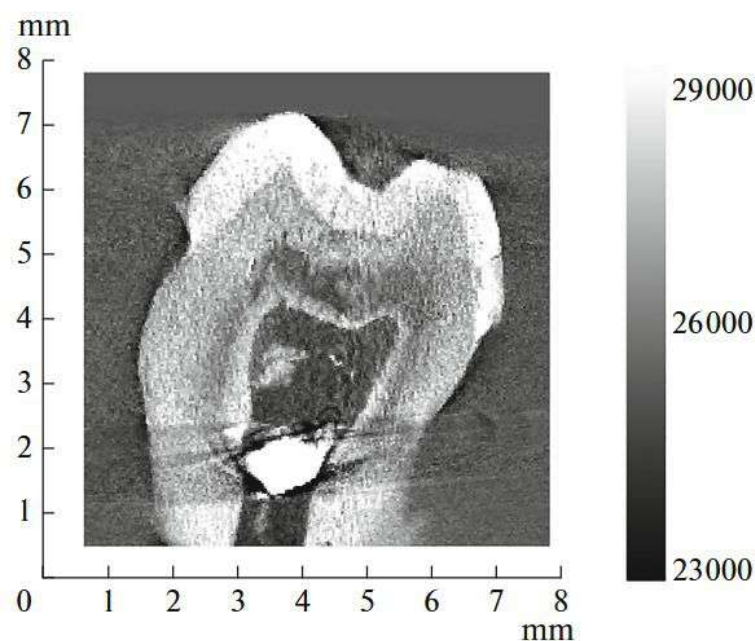


Рисунок 5.37 — Вертикальное сечение цифрового восстановленного изображения.

демонстрируют одинаковое качество. Рассчитанные значения метрик подтверждают это заключение.

Во многих публикациях авторы приходят к выводу, что одна из важнейших причин возникновения артефактов – полихроматическое зондирование. В ходе диссертационного исследования был спланирован и проведен эксперимент,

Таблица 7 — Сравнение значений RMSE и SSIM для ROI2

	FBP	SIRT	SOFT SIRT	SIRT+TV
RMSE	6.19×10^{-3}	6.25×10^{-3}	0	6.19×10^{-3}
SSIM	0.95	0.95	1	0.95

опровергающий данную гипотезу. Его результаты представлены ниже. В лаборатории рефлектотрии и малоуглового рассеяния ИК РАН им. А.В. Шубникова (Курчатовский центр) был спланирован и проведен следующий эксперимент. Был создан объект, содержащий медные включения 5.38. В цилиндр из ПММА высотой 25 мм и диаметром 10 мм были добавлены четыре медные вставки диаметром 1.1 мм.

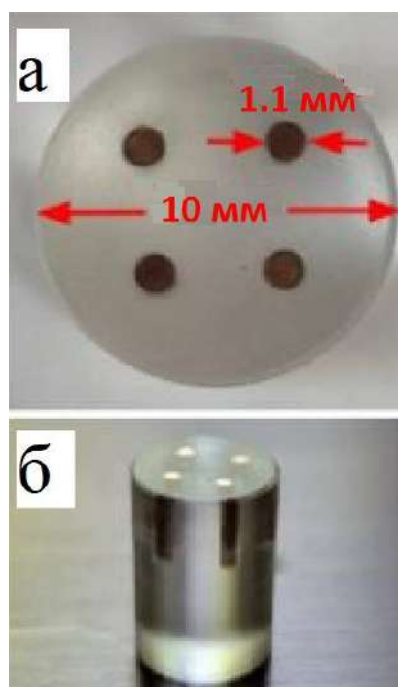


Рисунок 5.38 — Пластиковый цилиндр.

Измерения были проведены в двух режимах: монохроматическом и полихроматическом. Использовалась круговая схема сбора проекций. Угол расходимости конусного пучка был порядка 2° . Для генерации рентгеновского излучения был использован молибденовый анод, спектр испускания которого приведен на рисунке 5.39. Кристалл пирографита вырезал, установленный в тракт, линию молибдена. Красная штриховая линия (рис. 5.39) демонстрирует результат вырезания. Детектор Ximea xiRay 11 с размером пиксела $9 \times 9 \text{ мкм}^2$ был установлен в тракт для регистрации проекций. Материал сцинтиллятора $Gd_2O_2S : Tb$ [217], толщина 0.022 мм. Параметры экспериментов приведены в таблице 8.

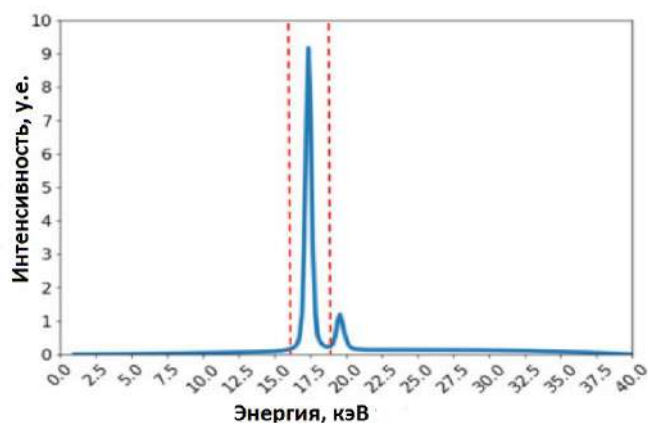


Рисунок 5.39 — Спектр испускания молибденового анода.

Таблица 8 — Параметры эксперимента

Параметр	<i>Poly</i> —	<i>Mono</i> —
Ток, мА	20	40
Напряжение, кэВ	40	40
Время, сек.	2.00	6.50
Число проекций	800	800
Пустой пучок	10	10
Темновой ток	10	10
Проекционный угол, град.	0.25	0.25
Источник-детектор, мм	1000	1000
Источник-объект, мм	950	950

На рисунке 5.41 приведены показания 750 строки детектора для проекционного угла, соответствующего направлению зондирования, представленному на рис. 5.40. Профиль для монохроматического сканирования (верхний) и полихроматического (нижний). Красные кривые – показания детектора в режиме темнового тока. Формы обоих сигналов похожи. Следует ожидать, что результаты реконструкции будут похожи. Сигналы, ослабленные на путях зондирования, пролегающих через одно или через два включения, практически не различаются. Уровень зарегистрированного сигнала в соответствующих этим путям ячейках лежит в области значений темнового тока. Наблюдается высокая степень гетероскедастичности шума в регистрируемых проекциях. Проанализируем результаты реконструкции для каждого из случаев 5.42. Для реконструкции в обоих случаях применялся один и тот же алгоритм FBP, не адаптированный под случай наличия сильно полгощающих включений. Наблюдаемые артефакты, искажившие изображения, визуально не отличимы. Вывод – полихроматичность зондирующего излучения не является основным источ-

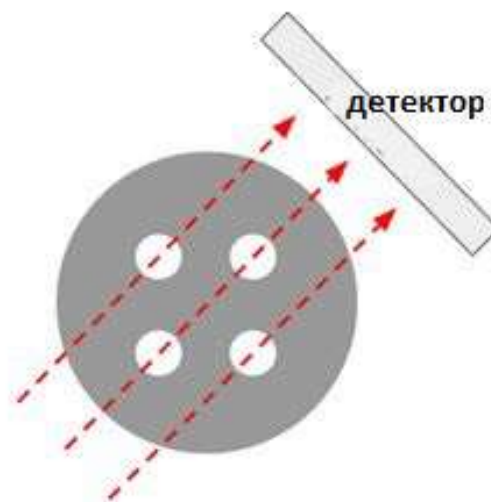


Рисунок 5.40 — Анализируемый ракурс (направление зондирования).

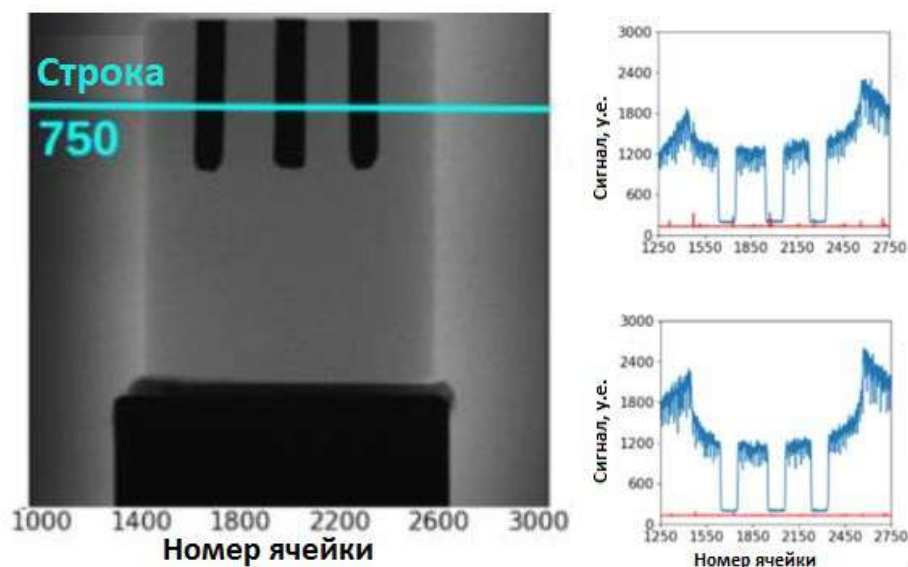


Рисунок 5.41 — Измеренная проекция для ракурса (рис. 5.40) (слева) и справа профили линейки пикселей детектора –монохроматический (верхний) и полихроматический (нижний) случаи.

ником возникновения расходящихся от центра включения контрастных полос, как принято считать среди пользователей томографов, предлагающих устанавливать фильтры в оптический тракт в ожидании уменьшить выраженность артефактов. Проблеме артефактов, возникающих при полихроматическом зондировании, посвящен раздел 5.6. Для построения цифровых изображений объектов, содержащих сильнопоглощающие включения, необходимо использовать специализированные методы. Диапазон оптических плотностей объектов, содержащих сильно поглощающие включения, очень широк. «Сильное поглощение» нельзя отнести только к объекту. Это всегда пара «объект-энергия

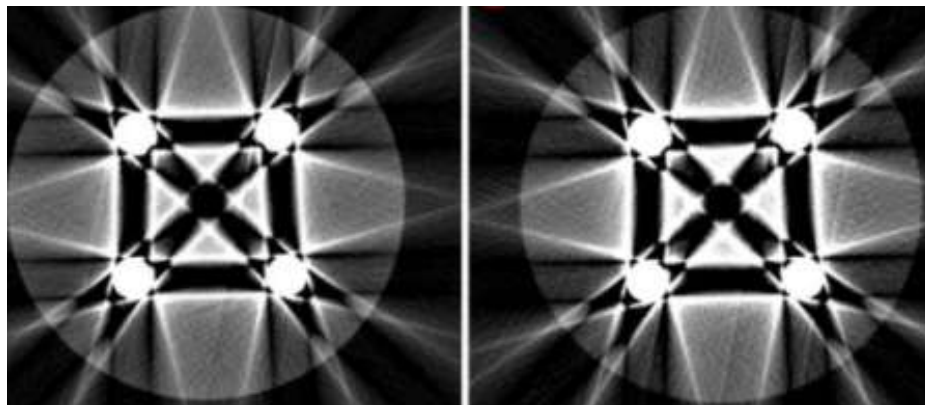


Рисунок 5.42 — Результат реконструкции сечения тестового объекта из си-
нограммы, измеренной в монохроматической моде (слева) и синограммы в
полихроматической моде (справа).

зондирующего излучения». Решить проблему, повысив энергию, удастся не все-
гда. Поскольку часто томографируются изделия, в которых состав локальных
областей не однороден по степени ослабления рентгеновского излучения. В мик-
роэлектронике состав изделий не ограничивается разнообразием материалов
активных компонентов структуры, а включает металлизированные участки.
Пример такого участка приведен на рисунке 5.43, где представлены два вер-
тикальных сечения микроструктуры. На верхнем рисунке 5.43 представлен

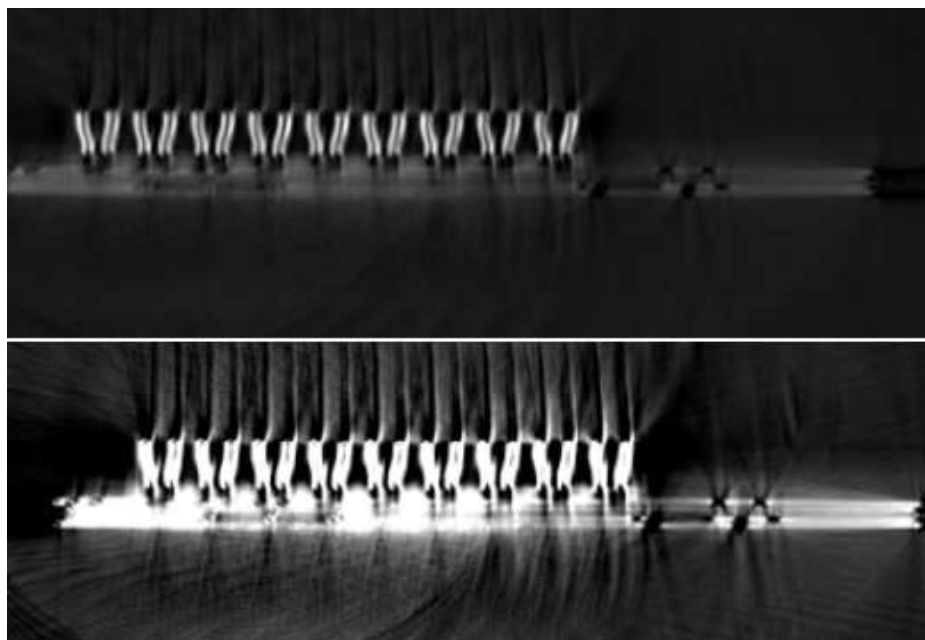


Рисунок 5.43 — Результат реконструкции участка микроструктуры. С ис-
пользованием метода, учитывающего наличие сильнопоглощающих включений
(верхний рисунок). С использованием стандартного алгоритма (нижний рису-
нок).

результат реконструкции методом, разработанным для работы с проекциями от объектов, содержащих сильнопоглощающие включения. На нижнем рисунке 5.43 представлен результат работы стандартного алгоритма реконструкции FBP.

5.6 Артефакты, возникающие при зондировании полихроматическим излучением. Автоматический метод уменьшения артефактов типа чаши

При сканировании полихроматическим излучением позиционно-чувствительный детектор без спектрального разрешения регистрирует все ослабленные объектом лучи спектра. Они имеют разные энергии. Ослабление энергетических компонент спектра шло по-разному. Т.е. изменение формы падающего на объект спектра и спектра регистрируемого пиксела детектора не линейно. Если использовать для линеаризации полихроматического сигнала перед его передачей в реконструктор выражение 1.24, используемое для линеаризации монохроматических проекций, то восстановленное изображение будет искажено. Возникающий артефакт носит название артефакта типа чаши, поскольку проявляется уменьшением значения яркости к центру изображения объекта при реконструкции сечения однородного объекта. На рисунке 5.44 приведены два цифровых изображения сечения керна. Для левого изображения линеаризация проекций была выполнена с использованием выражения 1.24, что и привело к проседанию интенсивности в центре (красный профиль под изображением). Причиной появления искажений является неравномерное ослабление энергетических компонент полихроматического спектра. Эффект неравномерного ослабления имеет название ужесточение пучка (Beam Hardening BH).

В рамках диссертационного исследования предложен метод линеаризации полихроматических проекций, после применения которого на восстановленных изображениях выраженность артефактов типа чаши уменьшается. Будем решать задачу в следующей постановке [218]. Пусть образец состоит из одного материала, концентрация которого неоднородна по объему. Тогда выражение, которое связывает величину регистрируемого сигнала и распределение концентрации можно записать в виде:

$$I(i, \varphi) = \int dE (I_0(i, E) \nu(i, E) \exp(- \int_{L(i, \varphi)} dl \mu(E) C(l))). \quad (5.28)$$

Здесь $I(i, \varphi)$ сигнал i -ой ячейки детектора для проекционного угла φ , $I_0(i, E)$ - начальная интенсивность компоненты спектра энергии E , $\nu(i, E)$ - отклик ячейки на прилетевшие кванты энергии E , $\mu(E)$ - линейный коэффициент ослабления материала на энергии E , C - локальная концентрация материала.

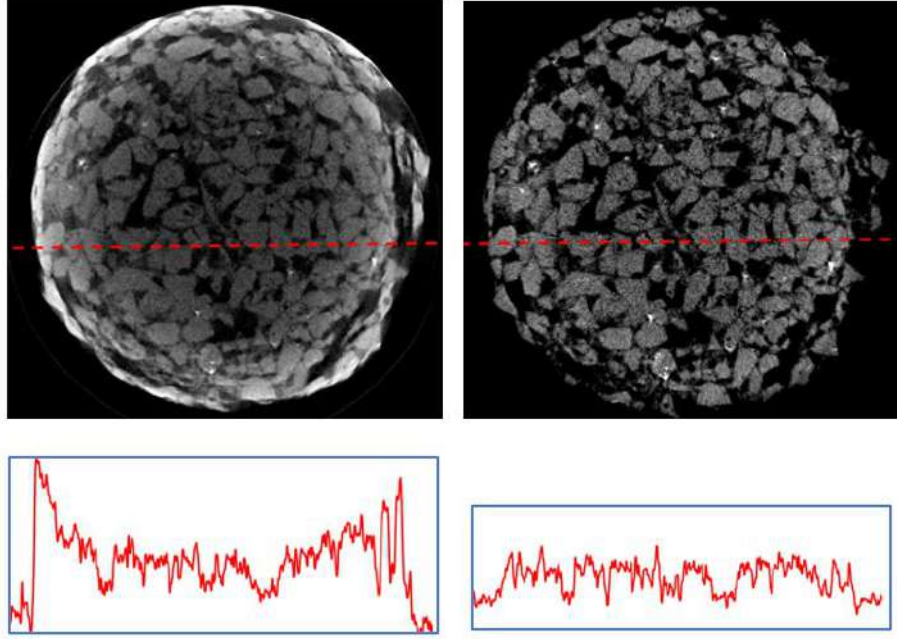


Рисунок 5.44 — Результаты реконструкции сечения керна. Слева: линеаризация выполнена без учета полихроматичности использованного излучения. Справа: линеаризация выполнена предложенным методом.

Предполагая, что распределения $(I_0(i, E), \nu(i, E), \mu(E))$ нам известны из референсных измерений, перепишем выражение 5.28 в следующем виде:

$$\mathbf{I} = f\left(-\int_{L(i, \varphi)} dl C(l)\right) = f(R(\mathbf{C})). \quad (5.29)$$

Здесь R - преобразование Радона. Чтобы восстановить распределение концентрации $\mathbf{C}$ необходимо сначала найти преобразование f^{-1} , поскольку

$$R(\mathbf{C}) = f^{-1}(\mathbf{I}), \quad (5.30)$$

а затем обратить преобразование Радона. Обобщим приведенные рассуждения на многокомпонентные по составу объекты. Будем в качестве преобразования использовать класс однопараметрических степенных функций с фиксированным масштабирующим параметром [44]. Т.е., если $\mathbf{x}$ - восстановленное изображение, то задача реконструкции может быть записана в виде

$$\mathbf{x} = R^{-1}(\mathbf{p}^*), \quad (5.31)$$

где

$$p^*(i, \varphi) = \left(\ln\left(\frac{\int dE I_0(i, E) \nu(i, \varphi, E)}{I^*(i, \varphi)}\right)\right)^\gamma. \quad (5.32)$$

Здесь I^* измерения без объекта в тракте. Воспользуемся Радоновским инвариантом для определения значения γ . Радоновский инвариант это равенство

суммарных значений, рассчитываемых по всем пикселям детектора при монохроматическом зондировании для всех проекционных углов. Рассчитаем суммы p^* по всем пикселям i для каждой полихроматической проекции SUM_φ , $\varphi = 1, \dots, K$. Среднее значение сумм SUM_φ близко к Радоновскому инварианту для монохроматического случая. Для расчета оценки γ будем минимизировать выражение:

$$\sqrt{\frac{\sum_\varphi (SUM_\varphi^\gamma - SUM_\varphi^\gamma)^2}{SUM_\varphi^\gamma}} \xrightarrow{\gamma} \min. \quad (5.33)$$

Метод состоит из трех этапов. На первом этапе определяется оптимальное значение параметра как решение оптимизационной задачи 5.33. На втором этапе корректируются полихроматические данные, чтобы приблизить их к линейной модели с помощью процедуры линеаризации 5.32. После линеаризации проекционных данных применяется алгоритм реконструкции. Для определения параметра γ используются измеренные проекционные данные $\mathbf{I}$ в качестве входных данных.

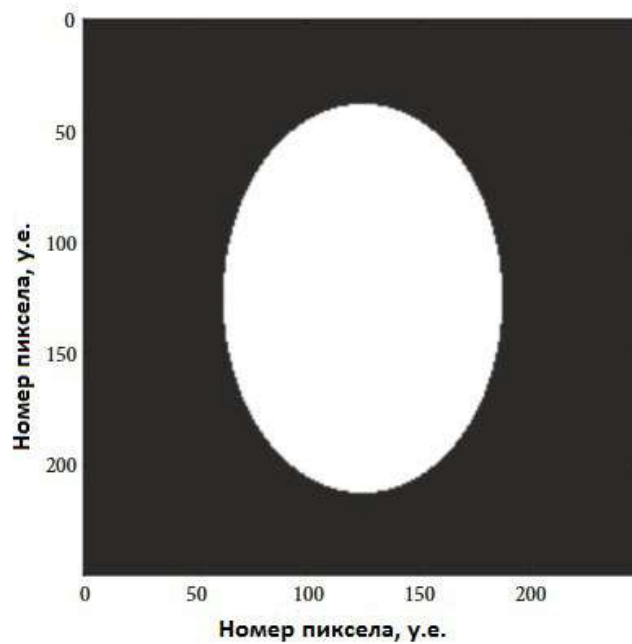


Рисунок 5.45 — Поперечное сечение фантома Fe.

Проекционные данные трехмерны ($N \times M \times K$): N - количество строк детектора, M - количество столбцов детектора, K - количество углов поворота. На начальном шаге алгоритма используется часть проекционных данных $\mathbf{I}'$, которая находится в пределах 5% расстояния от центральной проекции. Последовательно выбираются значения параметра $\tilde{\gamma}$ в некотором диапазоне $[\gamma_{min}; \gamma_{max}]$ с равномерным шагом. Каждая строка из части проекционных

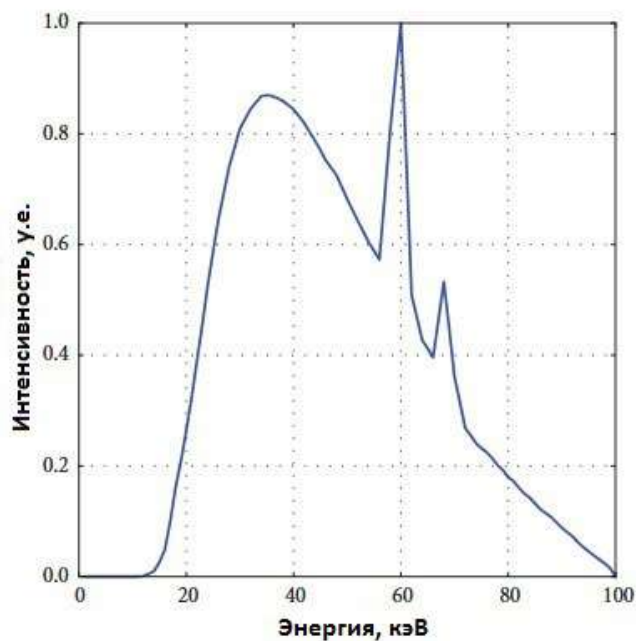


Рисунок 5.46 — Модельный спектр W анода.

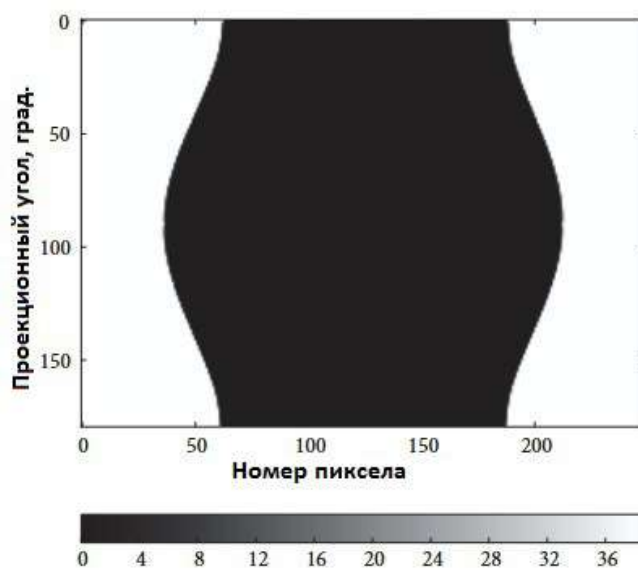


Рисунок 5.47 — Модельная синограмма.

данных P' корректируется с учетом текущего значения γ . Рассчитывается инвариант Радона для каждого угла, среднее значение инварианта для всех углов и среднеквадратичное отклонение значений инвариантов Радона для отдельных углов от среднего значения инварианта. Оптимальное значение определяется методом перебора в диапазоне D^γ . Метод перебора использован, поскольку нет очевидных причин полагать, что зависимость между значением инварианта Радона и значением параметра дифференцируема и имеет только один минимум. Для демонстрации результатов работы предложенного метода был

проведен модельный эксперимент. Размер однородного овального фантома Fe

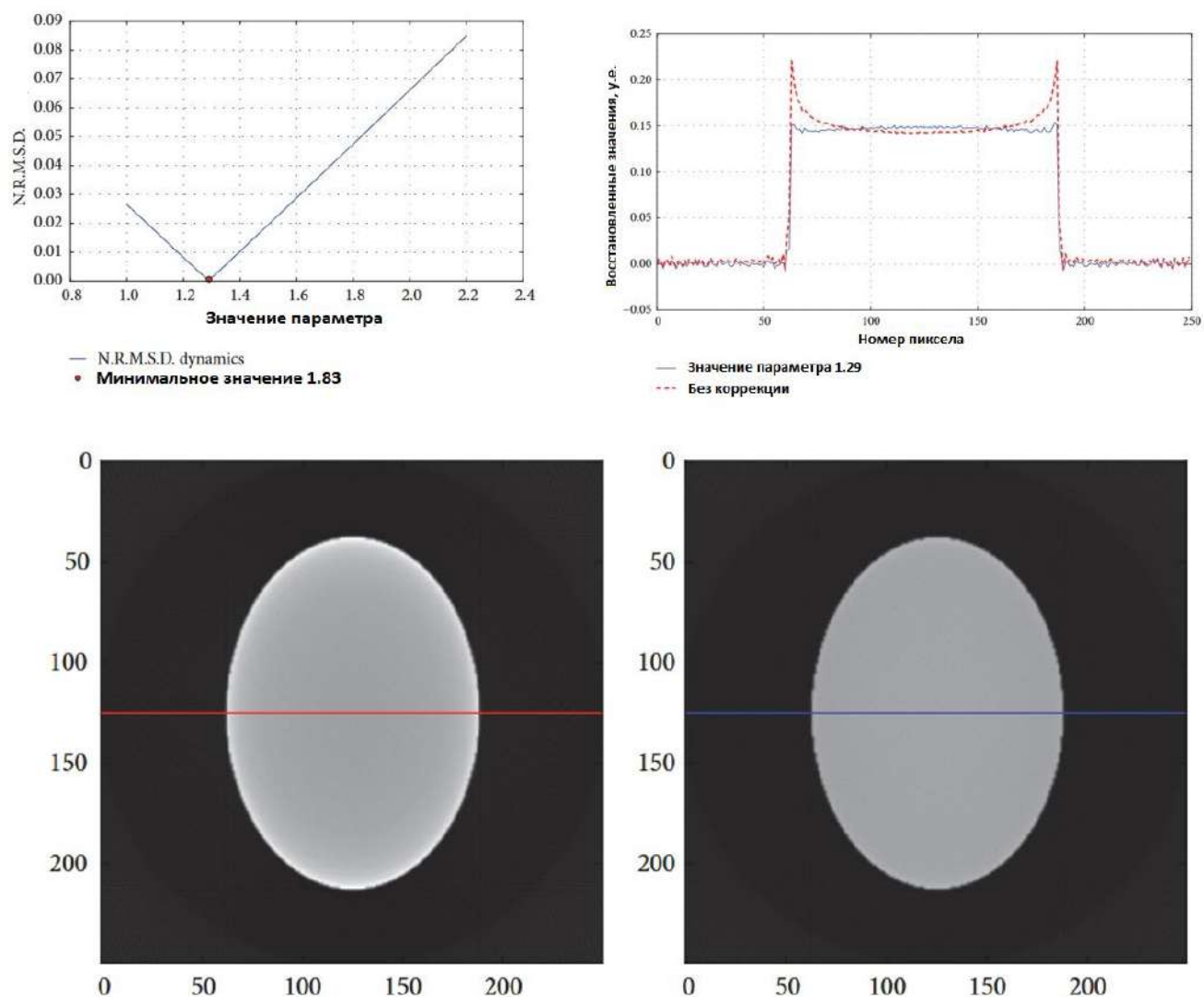


Рисунок 5.48 — Результаты применения метода коррекции полихроматических проекций. Верхний ряд: динамика величины оптимизируемого выражения (слева), профили восстановленных сечений (справа). Нижний ряд: реконструкция после линейриции методом для монохроматической моды (слева), реконструкция после линейризации предложенным методом (справа).

составляет 250 пикселей (рис. 5.45). Размер пиксела – 28 мкм. Количество равномерно расположенных проекционных углов – 180 в интервале от 0 до 180 градусов. Спектр 100 КэВ рентгеновской трубки с W анодом был рассчитан с использованием программного обеспечения TASMIP Spectra Calculator [219] (рис. 5.46). Синограмма рассчитывалась с использованием модели формирования полихроматического сигнала 5.28. Динамика значений оптимизируемого

выражения приведена на рисунке 5.48. Минимум функционала достигается при значении 1.29.

Второй эксперимент был проведен с использованием реально измеренных проекций (рис. 5.49). Результат реконструкции для полихроматических проек-

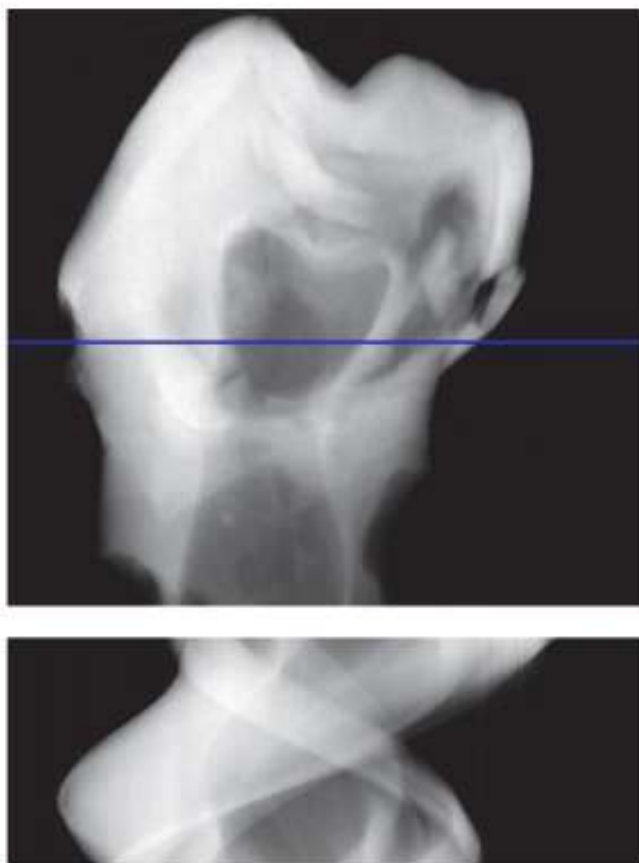


Рисунок 5.49 — Измеренная проекция (верхнее изображение) синограмма (нижнее изображение).

ций приведен на рисунке 5.51. Размер зондируемого образца $7 \times 7 \times 12$ мм³.

Для сбора данных был использован микротомограф TOMAS [220]. В качестве источника излучения использовалась рентгеновская трубка с Мо анодом. Проекции были получены с помощью 11-мегапиксельного детектора XIMEA xiRay. Параметрами режима измерения для трубки были напряжение 40 кВ, ток 20 мА и время получения каждого кадра 5 сек. Расстояние от источника до объекта составляло 1.2 м, от объекта до детектора - 0.05 м. Собрано 400 проекций с постоянным угловым шагом в 0.5 градуса. Разрешение детектора в пикселях составляло 9 μ m. Геометрическая конфигурация эксперимента такова, что рентгеновский луч можно считать параллельным, поскольку угол его расхождения составляет менее 1 градуса [152]. Для получения монохроматического луча не

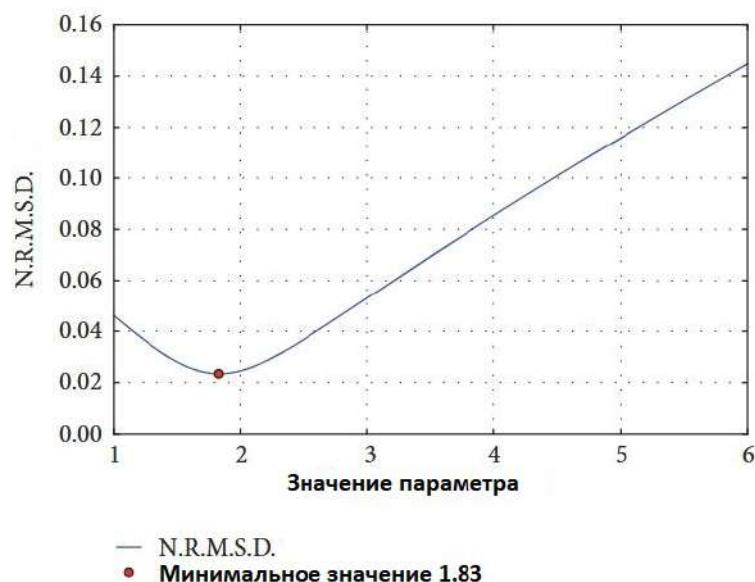


Рисунок 5.50 — Зависимость величины оптимизируемого выражения от значения параметра.

использовался фильтр или другая оптика, поэтому режим работы был полихроматическим. К зарегистрированным данным был применен предложенный метод коррекции полихроматических данных. На рисунке 5.50 показана динамика поведения значения оптимизируемого выражения для различных значений корректирующего параметра. Минимум достигается при значении параметра равном 1.83. На рисунке 5.51 приведены два результата реконструкции, выполненной алгебраическим методом. На левом верхнем рисунке представлен результат с использованием нескорректированных проекций. Наблюдается понижение восстановленного значения от внешнего края сечения к середине. На правом рисунке приведен результат реконструкции алгебраическим методом с использованием скорректированных предложенным методом проекций. Используемое для коррекции значение параметра 1.83. На нижнем рисунке представлены два профиля, соответствующие красной и синей линиям верхних рисунков. Использование предложенного метода позволило уменьшить выраженность эффекта типа чаши на реконструированных изображениях. Наличие артефактов данного вида приводит к неверной интерпретации цифрового изображения объекта, что затрудняет проведение метрологического контроля состава объекта.

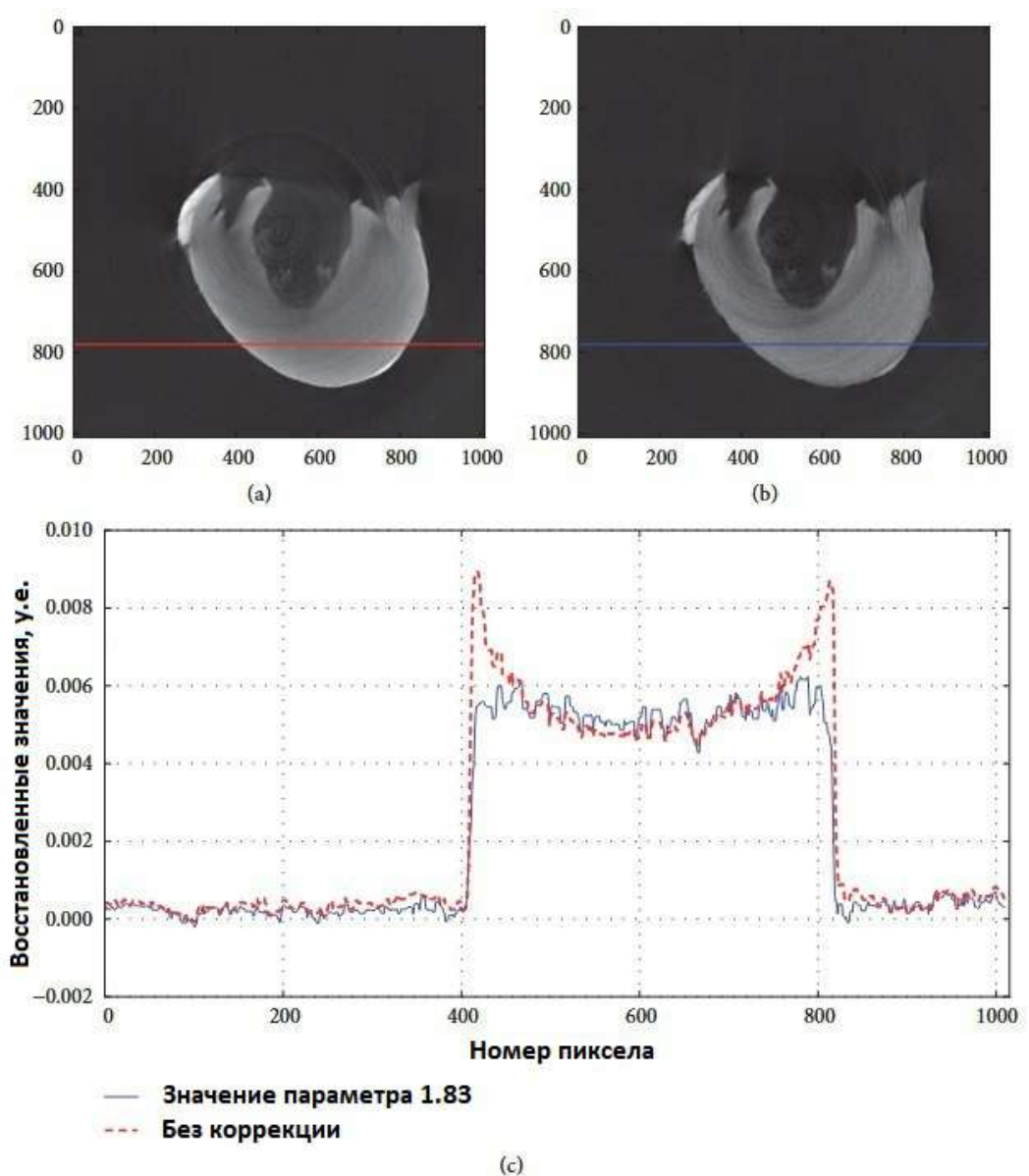


Рисунок 5.51 — Результат реконструкции: (а) без коррекции ВН, (б) с коррекцией ВН, (в) соответствующие профили восстановленных сечений.

5.7 Проблема оценки точности реконструкции

Любая задача считается решенной, если предложен алгоритм, реализующий метод и позволяющий численно построить приближенное решение с требуемой точностью. Для томографии вопрос оценки точности - вопрос не простой. Под одним названием компьютерный томограф кроется большое разнообразие машин, выполняющих съемку рентгенограмм от объекта или части объекта под разными углами (ракурсами) и проводящих реконструкцию (в некоторых случаях и автоматический анализ) 3D цифрового изображения

объекта из набора собранных томографических проекций. Чтобы подойти к определению точности, проанализируем процесс построения цифрового изображения. Цифровое изображение объекта в случае применения трансмиссионной томографии, называемой компьютерной, это пространственное распределение линейных коэффициентов ослабления рентгеновского излучения материалами зондируемого объекта. Линейный коэффициент ослабления любого материала при монохроматическом зондировании есть линейная комбинация коэффициентов всех элементов, входящих в состав данного материала. При зондировании рентгеновским спектром необходимо помнить, что каждая энергия, входящая в спектр, ослабляется материалами объекта по-своему. На рентгенограмме присутствуют все ослабленные объектом компоненты спектра. Интерпретация восстановленного цифрового изображения при полихроматическом зондировании осложняется. Принято говорить о пространственном распределении линейного «обобщенного» коэффициента ослабления спектра материалами объекта. Сравнить реконструированное значение такого коэффициента с табличным значением не удастся.

При увеличении разрешения и сохранении времени регистрации сигнала поток рентгеновских квантов, попадающих в одну ячейку детектора, уменьшается как квадрат коэффициента увеличения. В связи с этим ухудшается отношение «сигнал-шум» и, как следствие, падает контрастность регистрируемых рентгеновских изображений. Точность результата томографической реконструкции зависит не только от уровня контрастности рентгенограмм, но и от числа передаваемых в реконструктор рентгеновских проекций. Увеличение числа проекций увеличивает получаемую зондируемым объектом дозовую нагрузку и увеличивает общее время измерения. Оптимизировать выбор между временем регистрации проекции и числом проекций можно анализируя свойства планируемого к использованию алгоритма реконструкции. Последний, который таким, образом становится важной частью самого томографического комплекса. Разрешение микротомографов, функционирующих в режиме монохроматической съемки, в общем случае определяется пространственным разрешением детектора и составляет единицы мкм [221]. На синхротронных источниках, где удастся фокусировать пучки до субмикронных размеров [11], пространственное разрешение определяется не размером ячейки детектора, а размером фокального пятна. Томографическая проекция собирается посредством сканирования пучком в двух направлениях. Разрешение в этом случае

увеличивается до долей микрона. Другой путь повышения разрешения связан с использованием увеличивающих рентгенооптических элементов в оптическом тракте. Напрашивается вывод, что физический размер вокселя цифрового изображения влияет на точность реконструкции, чем больше этот размер, тем меньше источников для ошибки. Однако, это не совсем верно. Увеличение размера вокселя означает, что и объект имеет больший размер. Чтобы просветить такой объект приходится увеличивать энергию. С увеличением энергии вклад рассеяния увеличивается и применение стандартных методов реконструкции приводит к искаженным изображениям. Применение алгоритмов, оптимизированных под условия измерения и под свойства томографируемого объекта, позволяет повысить точность реконструкции, уменьшить выраженность артефактов и, как следствие, повысить достоверность результатов научных исследований, дефектоскопии, метрологического контроля. В диссертационном исследовании было показано, что 1. при использовании для зондирования полихроматического излучения результат реконструкции классическими методами искажен артефактами типа чаши, при наличии металлических включений – артефактами расходящихся полос, при неточных параметрах положения оси – изображение размывается и т.п. 2. на точность реконструкции влияют качество рентгенограмм (отношение сигнал-шум), их количество (т.е. число проекционных углов) и последовательность съемки (положение ракурсов).

Классические интегральные методы работы с томографическими данными [140], в том числе метод свёртки и обратной проекции [108], остаются самыми быстрыми методами, но требуют для достижения высокой точности большого количества равномерно распределенных по ракурсам рентгенограмм с низким уровнем шума. На рисунке 5.52 представлены результаты реконструкции, выполненной методом свёртки и обратной проекции, с использованием малого числа проекций для двух различающихся последовательностей проекционных углов [222]. На левых изображениях приведены результаты реконструкции по проекциям, собранным в круговой схеме, причем проекционные углы добавлялись последовательно. На правых изображениях приведены результаты реконструкции, выполненной из набора проекций для случайно распределенных проекционных углов. На левых изображениях результат реконструкции можно считать неудовлетворительным и легко видеть выделенные направления. Т.е. человек легко различит где реконструкция плохая, а где хорошая.

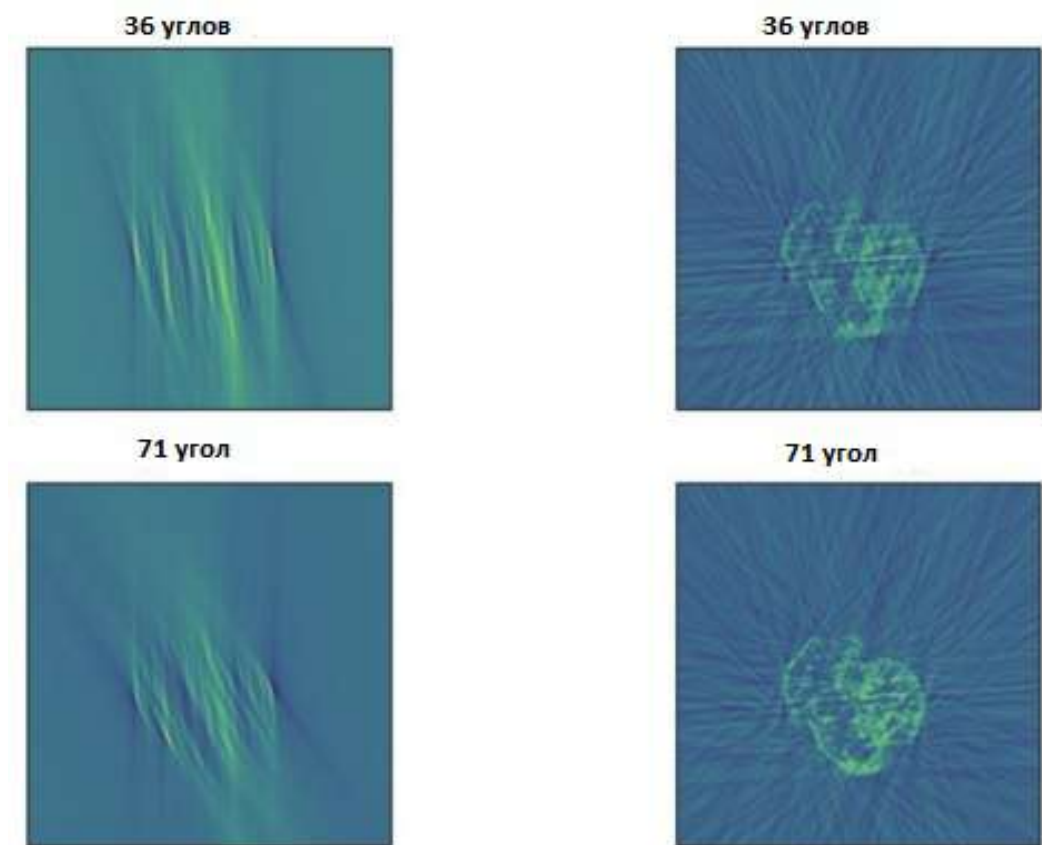


Рисунок 5.52 — Результаты реконструкции методом свертки и обратной проекции. Слева: проекционные углы взяты последовательно. Справа: случайный порядок углов.

Визуальный контроль качества реконструкции доступен в исследовательских лабораториях, где выделяемое на анализ результата время не ограничено. Если на время анализа наложены ограничения, то необходимы автоматические системы анализа восстановленных изображений. В частности, задачи автоматического анализа восстановленных изображений возникают в ситуациях, когда требуется определить момент остановки съемки. При построении системы автоматического анализа необходимо использовать количественные критерии оценки качества изображений. Чтобы продемонстрировать тот факт, что выбор критерия является самостоятельной задачей, обратимся к рисунку, на котором приведена динамика изменения результата реконструкции (рис. 5.52) с использованием величины среднеквадратичного отклонения. Проследим динамику изменения восстановленных изображений с увеличением числа проекционных углов, используемых для реконструкции. Зависимости, приведенные слева, получены следующим образом. Текущее изображение, восстановленное по фиксированному числу проекций n , сравнивается с изображением, восстанов-

ленным по числу проекций $n + 10$. Зависимости, представленные на правом изображении, построены для изображений, восстановленных по числу проекций n и $n + 1$. Использование величины среднеквадратичного отклонения в

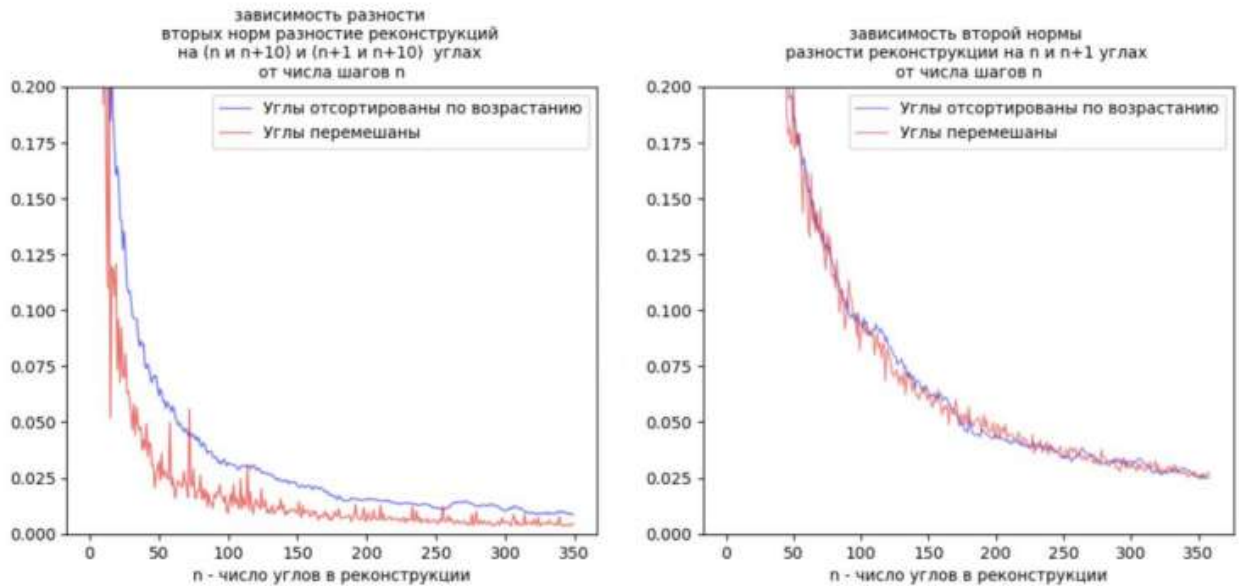


Рисунок 5.53 — Результаты реконструкции методом свертки и обратной проекции. Слева сравниваются результаты реконструкции по n и $n + 10$ углам, справа — по n и $n + 1$ угол.

качестве критерия оценки качества реконструкции допустимо в системе, построенной на основе левого рисунка, и не допустимо в системе, реализующей алгоритм с правого рисунка.

Если идеальное изображение или физический фантом в наличии, то оценить точность алгоритма реконструкции можно, используя проекции модельного эксперимента или результат измерения с использованием морфометрических фантомов. После того, как проекции измерены или рассчитаны и реконструкция выполнена будем применять методы геометрической морфометрии, позволяющие сравнивать объекты по форме. Результат реконструкции, т.е. восстановленное цифровое изображение, сравнивается с цифровым изображением использованного фантома. Применяется какой-либо оптимизационный метод, чтобы определить наилучшее возможное пространственное соответствие одного изображения с другим. Стратегии поиска размерного соответствия часто базируются на использовании маркеров. Маркеры, которые обычно представляют собой сферы (шарики из нержавеющей стали, полые пластиковые шарики, заполненные водным раствором, золотые семена и и т. д.), разработаны таким образом, чтобы их можно было легко обнаружить на изображениях. Наиболее

важным этапом этих методов является идентификация или сегментация маркеров, которая выполняется вручную или с использованием методов обработки изображений. После того, как изображения совмещены, проводится их сравнение, которое может базироваться непосредственно на анализе значений яркости, градиентов или на анализе признаков (точек, контуров, участков поверхностей) [223]. Под яркостью понимается значение в пикселе. Для автоматической количественной оценки точности реконструкции вводится понятие метрики. Для сравнения 2-х изображений используются метрики MSE (Mean squared Error) [224], RMSE (Root Mean squared Error) [224], NRMSE (Normalized Root Mean squared Error), PSNR (Peak Signal-to-Noise Ratio) [224], SSIM (Structural Similarity Index Measure) [216].

Обозначим идеальное изображение объекта (фантома) – $\mathbf{C}_{ideal}$ и восстановленное изображение $\mathbf{C}_{rec}$. Размер изображений $N \times N$. Тогда MSE рассчитывается с использованием выражения:

$$MSE(\mathbf{C}^{ideal}, \mathbf{C}^{rec}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (c_{ideal}(i,j) - c_{rec}(i,j))^2, \quad (5.34)$$

метрика RMSE – с использованием выражения:

$$RMSE(\mathbf{C}^{ideal}, \mathbf{C}^{rec}) = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (c_{ideal}(i,j) - c_{rec}(i,j))^2}, \quad (5.35)$$

метрика NRMSE – с использованием выражения:

$$NRMSE(\mathbf{C}^{ideal}, \mathbf{C}^{rec}) = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (c_{ideal}(i,j) - c_{rec}(i,j))^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_{ideal}(i,j)^2}}. \quad (5.36)$$

Для расчета метрики PSNR используется выражение:

$$PSNR(\mathbf{C}^{ideal}, \mathbf{C}^{rec}) = 10 \log_{10}(\max(\mathbf{C}^{rec})/MSE). \quad (5.37)$$

Здесь $c_{ideal}(i,j), c_{rec}(i,j)$ – значения (яркость) в пикселе (i,j) для идеального и восстановленного изображения, соответственно. Используемое выражение для метрики SSIM:

$$SSIM(\mathbf{C}^{ideal}, \mathbf{C}^{rec}) = \frac{(2\mu_{ideal}\mu_{rec} + K_1)(2\sigma_{ideal}^{rec} + K_2)}{(\mu_{ideal}^2 + \mu_{rec}^2 + K_1)(\sigma_{ideal}^2 + \sigma_{rec}^2 + K_2)}. \quad (5.38)$$

Здесь μ_{ideal}, μ_{rec} – средние значения для идеального и восстановленного изображений, соответственно. $\sigma_{ideal}, \sigma_{rec}$ – значения стандартного отклонения на основании несмещённой оценки дисперсии для идеального и восстановленного изображений, соответственно, $\sigma_{ideal}^{rec} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (c_{ideal}(i,j) - \mu_{ideal})(c_{rec}(i,j) - \mu_{rec})$. При точность оценивается не попиксельным сравнением, а на использовании признаков, то оценка точности реконструкции дополнительно зависит от точности сегментации изображения [225], поскольку признаки необходимо найти и локализовать. Методы оценки точности чувствительны к шуму на изображении и к форме самих признаков. Из-за наличия шумовой неадаптивной компоненты на восстановленном цифровом изображении прямое применение пороговых методов может исказить оценку. Для демонстрации влияния этапа сегментации на оценку точности восстановленных цифровых изображений объектов ниже рассмотрен реальный пример сегментации цифрового изображения пористой мембраны.

По химическому составу мембраны разделяют на керамические, стеклянные, графитовые, металлические и композиционные. К керамическим и металлокерамическим мембранам проявлен сегодня повышенный интерес, так как они обладают рядом преимуществ [226; 227]. Первое преимущество – их высокая химическая стойкость в химически и биологически агрессивных средах. Следует отметить, что наиболее высокую химическую стойкость имеют керамические и металло- керамические мембраны на основе оксидов алюминия. Вторым преимуществом является их высокая термическая стойкость. Керамические и металлокерамические мембраны сохраняют свои свойства при нагреве до 1000°C, могут периодически прокаливаться при температуре 500°C для удаления загрязнений или подвергаться стерилизации паром при температуре 120°C. Третье свойство, выделяющее керамические и металлокерамические мембраны, это возможность получения данных мембран со специальными свойствами, например, каталитическими, или обладающими повышенной механической прочностью, а также возможность создания гидрофобных или гидрофильных мембран. Керамические мембраны для микрофльтрации получают спеканием дисперсных порошков (в основном, оксидов) с добавками силикатов, гидроксидов, карбонатов, и др. с целью формирования ячеистой структуры. Образец для исследований был изготовлен в Институте Структурной Макрокинеки и Проблем Материаловедения им. А.Г. Мержанова РАН (Черноголовка) [228]. Для оптимизации технологического процесса изготов-

ления пористых мембран с целью получения требуемых свойств последних, проводят количественную оценку их характеристик, таких как пористость, удельная поверхность, размер пор, репрезентативный объем. Расчет этих характеристик образца проводился на цифровом восстановленном изображении. В отсутствие доступа к методу томографии используются различные методы исследования. Методы растровой и просвечивающей электронной микроскопии позволяют получить информацию о морфологии, кристаллической структуре и элементном составе приповерхностного слоя [229]. Метод растровой электронной микроскопии (РЭМ) позволяет определить размеры порядка $10\text{--}100\text{ \AA}$ и выше, но связан с большой сложностью подготовки образцов. Чтобы получить информацию о разных частях объема, из объемного образца готовят набор тонких срезов, которые изучаются последовательно. Для оценки общего объема сквозных пор применяют метод пузырька. Это способ капиллярного вытеснения, в котором выдавливание смачивающей жидкости из пор происходит за счет давления подаваемого газа. Обычно используют в области радиусов пор $r > 10^4\text{ \AA}$. Метод ртутной порометрии позволяет дополнительно изучить распределение пор по размерам. Обычно используют в области радиусов пор r от 20 до $10^6\text{ \AA}$. Способ является токсичным из-за ртути, кроме того при измерении малых размеров пор необходимы большие давления, что может разрушать образцы. 4-х точечный метод БЭТ (Брунауэра-Эммета-Теллера) применяется для измерения удельной поверхности пористых материалов [228]. В методе БЭТ по экспериментальной зависимости адсорбции от давления при постоянной температуре (изотерма адсорбции), используя уравнение, связывающее величину давления и величину адсорбции (уравнение БЭТ), рассчитывают суммарную площадь поверхности адсорбента любой формы и пористости.

В проведенном исследовании в процессе создания мембран порошки были исследованы на растровом электронном микроскопе LEO 1450 с энергодисперсионной системой INCA Energy 300. Фазовый анализ готовых образцов проводился на дифрактометре ДРОН-3М. Морфология среза исследована методом РЭМ. Величина среднего диаметра открытых пор определялась с помощью ртутного порозиметра и методом пузырька согласно ГОСТ 26849-86. Пористость образцов определялась методом гидростатического взвешивания, регламентированного ГОСТ 18898-89. Удельная поверхность порошков и готовых образцов измерялась методом БЭТ на приборе Sorbi-M. В качестве газа-носителя использован газообразный гелий высокой чистоты по ТУ 0271-001-45905715-02 (марка

60, объемная доля не менее 99.9999%). Для изготовления каталитически активных мембран с заданными параметрами использовался порошок Al_2O_3 крупной фракции Электрокорунд с частицами размером до 600 мкм. Из этих частиц был сформирован каркас мембраны с порами размером около 30 мкм. Для спекания прочного образца в исходный порошок Al_2O_3 вводились порошкообразные добавки окиси магния производства завода Красный химик ГОСТ 4526-75 и карбида кремния, получаемого методом СВС, а также, кремний органическая связка, которая при увеличении температуры образует мелкодисперсную активную для спекания фазу в виде SiO_2 . Последняя добавка была введена для увеличения прочности мембраны. Добавки вводились в следующих весовых соотношениях: Al_2O_3 - 225 г, MgO - 7.5 г, SiC - 15 г, SiO_2 - 7.5 г. Порошки смешивали в шаровой мельнице с шарами из Al_2O_3 в течение 1 ч. Компактирование смеси порошков проводилось методом одностороннего прессования с последующим спеканием в вакууме. При температурах спекания порошков в области 1300-1450°C образовывалась жидкая фаза эвтектического состава, содержащая оксид магния и карбид кремния в виде клиноэнстатита, которая смачивает частицы Al_2O_3 , образуя прочный пористый каркас. Результаты рентгенофазового анализа полученных образцов четко демонстрируют рефлексы от фазы α – Al_2O_3 , структуры шпинели MgAl_2O_4 и смешанного оксида гексагональной структуры инделита $\text{Mg}_2\text{Al}_4\text{Si}_5\text{O}_{18}$. РЭМ-изображения и результаты рентгено-спектрального микроанализа образца на основе Al_2O_3 представлены на рис. 5.54 и в табл. 9.

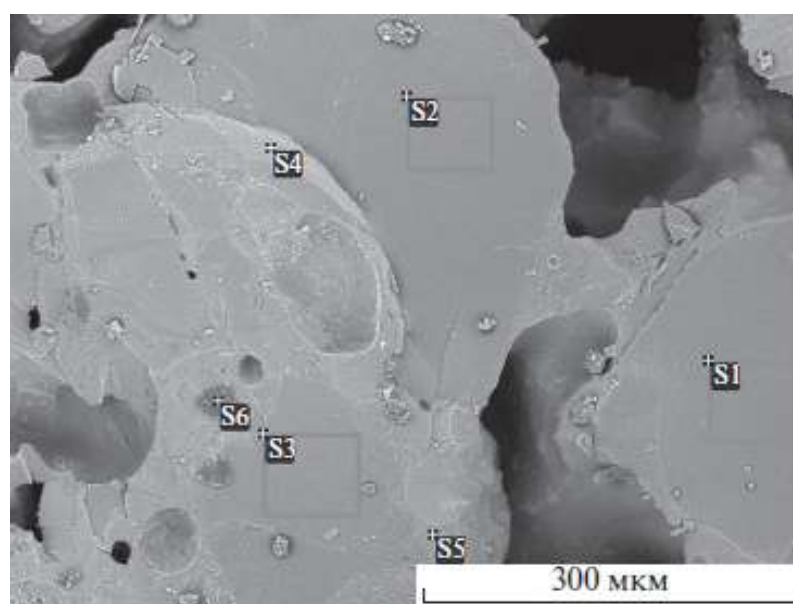


Рисунок 5.54 — РЭМ-изображение образца на основе Al_2O_3

Таблица 9 — Результаты микрорентгеноспектрального анализа образца (нормированные)

Спектр	C	O	Mg	Al	Si
S1	8.00	50.99	-	41.01	-
S2	7.10	50.37	-	42.53	-
S3	5.27	53.16	-	41.57	-
S4	19.37	53.91	-	24.73	1.99
S5	8.09	51.15	2.39	12.89	25.48
S6	64.14	24.12	-	9.28	2.46

Как следует из рис. 5.55, максимальный размер частиц Al_2O_3 составляет 600 мкм. Плотность полученного материала - 3.4 г/см³. Значение пористости синтезированного образца, измеренное методом гидростатического взвешивания - 30.5%. Диаметр открытых пор образца, определенный с помощью ртутного порозиметра и методом определения точки пузырька составил ~ 30 мкм. Измерение удельной поверхности исследуемого пористого образца на приборе Sorbi-M методом БЭТ дало значение 0.2 ± 0.01 м²/г.

Для исследования внутренней морфологической структуры пористой металлокерамической мембраны, было проведено измерение на лабораторном микротомографе [230]. Размер пиксела детектора 9 мкм. Схема микротомографа представлена на рис. 5.56. Измерения проводились в схеме с полихроматическим зондированием. В использованном лабораторном томографе источник излучения и детектор неподвижны, образец вращается вокруг своей оси. Угловой шаг - 0.5 градуса. Полный угол поворота 200 градусов. Была использована следующая геометрия: расстояние источник-образец составляло 1.2 м, расстояние образец-детектор - 0.05 м. Напряжение, подаваемое на рентгеновскую трубку с Мо анодом, составило 40 кВ, ток - 20 мА. Время экспозиции - 5 секунд на кадр. Детектор XIMEA xiRay 11 применялся для регистрации ослабленного в образце излучения. Было измерено 400 томографических проекций. Метод обратного проецирования с фильтрацией [231] использован для реконструкции. Результатом томографической реконструкции являлось цифровое изображение, описывающее морфологическую структуру образца. Вертикальное и горизонтальное сечения восстановленного цифрового изображения представлены на рисунке 5.57.

Для расчета интегральных характеристик измеренного образца, таких как пористость, удельный объем и распределение пор по размерам необходимо было бинаризовать результат реконструкции. Для этого последовательно выполнялись операции фильтрации шумов и бинаризации (бинарной сегментации).

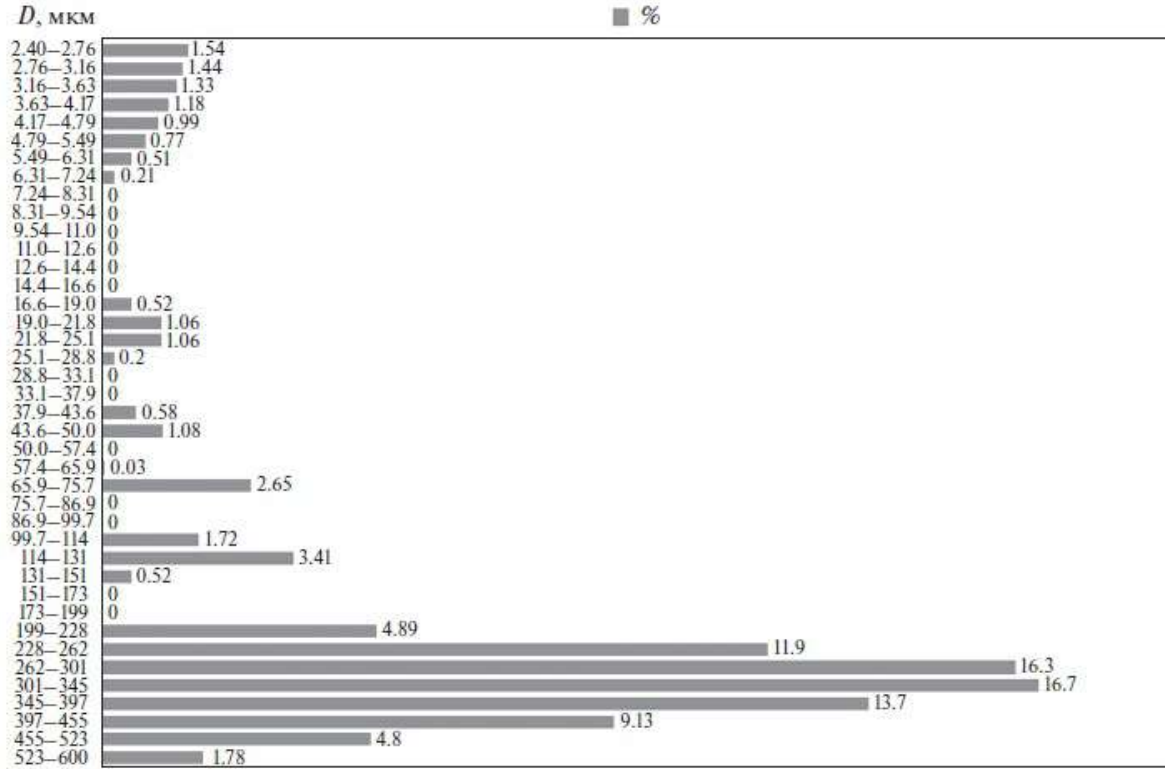


Рисунок 5.55 — Распределение частиц по размерам.

Поскольку величина пористости рассчитывается как отношение величины пустого объема к величине заполненного материалом объема, целью операции бинаризации является разбиение всех вокселей серого восстановленного 3D-изображения на два класса: материал и пустота. Метод Оцу для несбалансированных классов [232] использовался для поиска глобального порога бинаризации по гистограмме восстановленного изображения (рис. 5.58). Положение красной линии, согласно критерию Оцу, является решением следующей оптимизационной задачи:

$$\sum_{j=1}^2 \omega_j(k) \lg(\omega_j(k)) - \lg(\sigma_W^2(k)) \rightarrow \max_k \quad (5.39)$$

где k - значение порога, $\omega_1(k)$ и $\omega_2(k)$ - объемные доли классов, $\sigma_W^2(k)$ - внутри-классовая дисперсия, вычисляемая как взвешенное среднее дисперсий яркостей

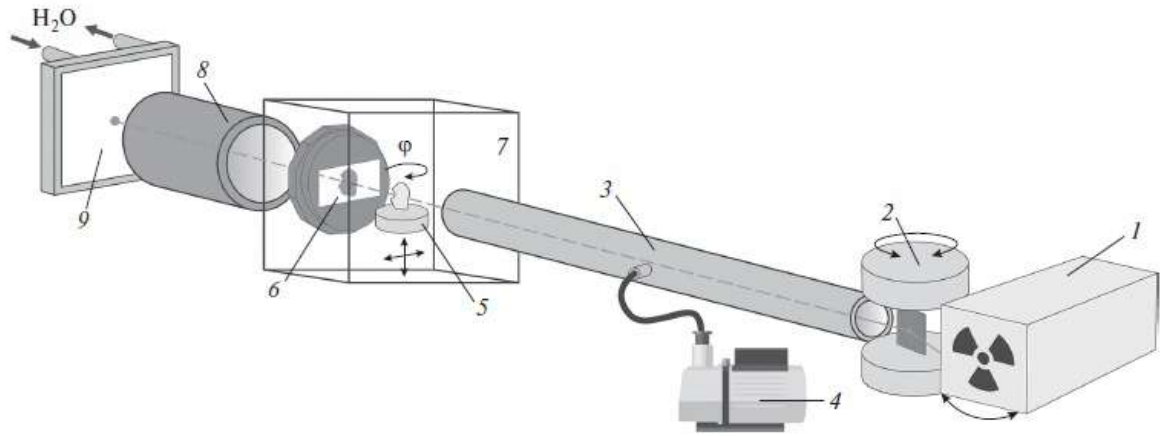


Рисунок 5.56 — Схема рентгеновского микротомографа: 1 - источник рентгеновского излучения (рентгеновская трубка), 2 - блок монохроматора, 3 - вакуумный путь (коллиматор), 4 - вакуумный насос, 5 - изучаемый образец в системе позиционирования, 6 - рентгеновский детектор XIMEA xiRAY 11, 7 - зона локальной радиационной защиты, 8 - сцинтиллятор и оптическая система формирования изображения, 9 - сенсор рентгеновского излучения с системой считывания и охлаждения.

вокселей внутри двух классов $\sigma_1^2(k)$ и $\sigma_2^2(k)$:

$$\sigma_W^2(k) = \sum_{j=1}^2 \omega_j(k) \sigma_j^2(k) \quad (5.40)$$

Результатом бинаризации является 3D-изображение $A(x, y, z)$, совпадающее по размеру со входным изображением $I(x, y, z)$, для которого значения в каждом вокселе рассчитываются согласно выражению:

$$A(x, y, z) = \begin{cases} 1 & , \text{if } I(x, y, z) > k^* \\ 0 & , \text{else} \end{cases} \quad (5.41)$$

где k^* - оптимальное значение порога. Таким образом, на бинаризованном изображении материалу соответствуют белые воксели, пустотам - черные. Участок горизонтального сечения, вырезанный из наиболее неоднородной области восстановленного объема, и результат его бинаризации представлены на рис. 5.59. Размер и положение выбранного участка в координатах (рис. 5.57) (x от 250 до 750, y от 250 до 750, $z = 950$). Следует обратить внимание, что на рисунке 5.59б в области изображения (350 : 450, 150 : 250) просматриваются так называемые висячие камни. Т.е. наблюдаются вкрапления материала объемом несколько

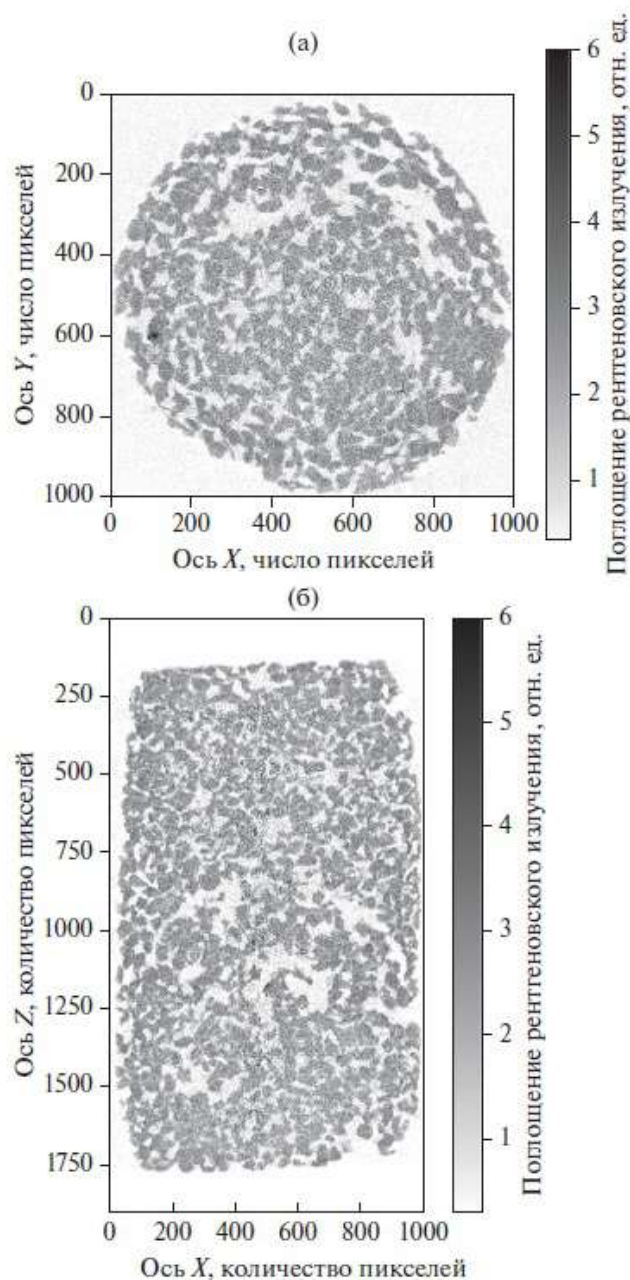


Рисунок 5.57 — Горизонтальное (а) и вертикальное (б) сечение восстановленного объема.

вокселей в области поры, не соединенные со стенками объекта. Ситуация с наличием висячих камней в объеме рассматривается как не физичная.

Также следует отметить большое количество наблюдаемых одновоксельных закрытых пор. Оба этих артефакта (висячие камни и одновоксельные поры) проявляются в результате бинаризации изображения и являются следствием наличия не аддитивного шума на изображении. Предложенный критерий оценки качества бинаризации результата томографической реконструкции базируется на минимизации количества висячих камней и одновоксельных пор. Для сохранения на изображении границ объектов билатеральный фильтр, ком-

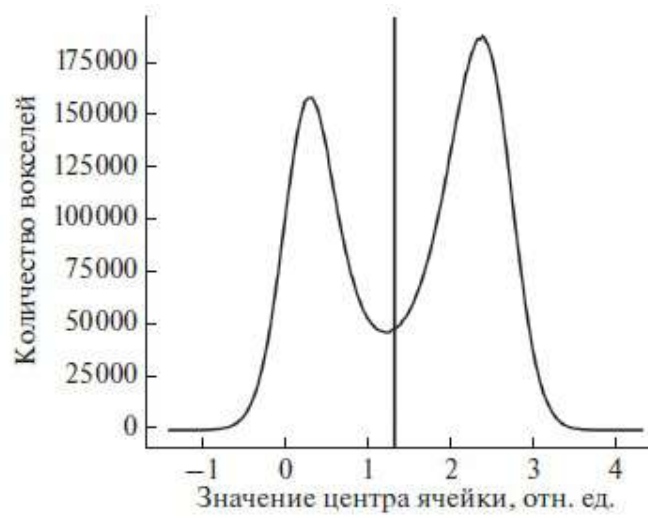


Рисунок 5.58 — Гистограмма восстановленного объема в серых тонах.

бинирующий пространственную и яркостную фильтрацию:

$$B(x, y) = \frac{\sum_{x'=x-w_x}^{x+w_x} \sum_{y'=y-w_y}^{y+w_y} A(x', y') [|A(x', y') - A(x, y)| < \Delta]}{\sum_{x'=x-w_x}^{x+w_x} \sum_{y'=y-w_y}^{y+w_y} [|A(x', y') - A(x, y)| < \Delta]} \quad (5.42)$$

был использован. Здесь $B(x, y)$ - результат фильтрации, $A(x, y)$ - фильтруемое сечение, w_x - размер окна в направлении X , w_y - размер окна в направлении Y , Δ - порог по интенсивности, подбираемый эмпирически. Поскольку процедуры фильтрации и последующей бинаризации полного объема являются затратными по времени вычислений, расчеты для выбора оптимальных значений параметров фильтра выполнялись на репрезентативном объеме варьированием величины окна и порога билатерального фильтра. Размер репрезентативного объема определялся перед началом расчетов с окнами разных размеров. Репрезентативным выбран такой размер объема, начиная с которого отклонение от среднего значения удельной поверхности не сильно варьируется при увеличении размера объема. Значение удельной поверхности рассчитывалось стереологическим методом. После нескольких расчетов, стартующих в разных направлениях и из разных начальных точек, в качестве репрезентативного был выбран размер 0.0025 м, что примерно соответствует объему $250 \times 250 \times 250$ вокселей. Характерный пример динамики поведения величины удельной поверхности приведен на рис. 5.60.

После определения размера репрезентативного объема все эксперименты, связанные с определением оптимальных параметров билатерального фильтра,

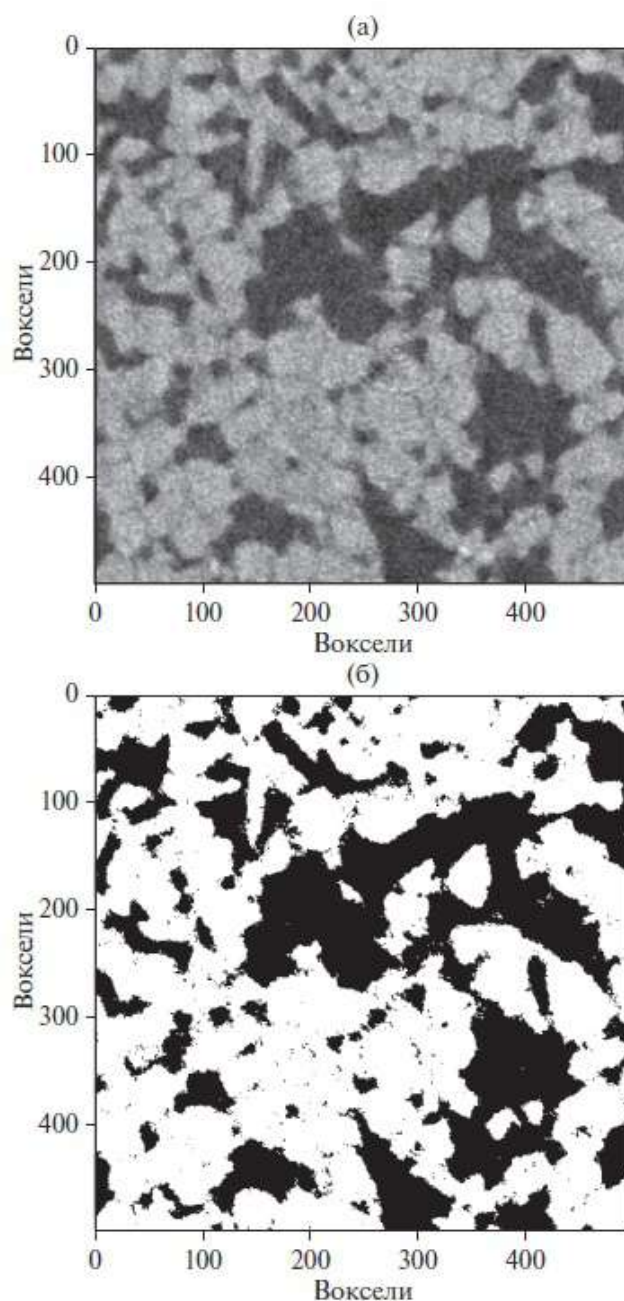


Рисунок 5.59 — Участок горизонтального сечения восстановленного изображения (а). Результат применения операции бинаризации (б).

выполнялись на этом объеме. Оптимальным был выбран такой размер окна, при котором наблюдается минимальное количество “висячих камней” и фантомных закрытых пор, а для оптимального порога по интенсивности значение критерия Оцу должно быть максимально. Этим требованиям в нашем случае соответствуют значения: $w_x = w_y = 5$, $\Delta = 0.65$. После применения операции бинаризации на полном (не репрезентативном) объеме количество «висячих камней» сократилось с 0.013% (без фильтрации) до 0.001% (выполнена фильтрация с выбранными параметрами). Изменение количества закрытых пор

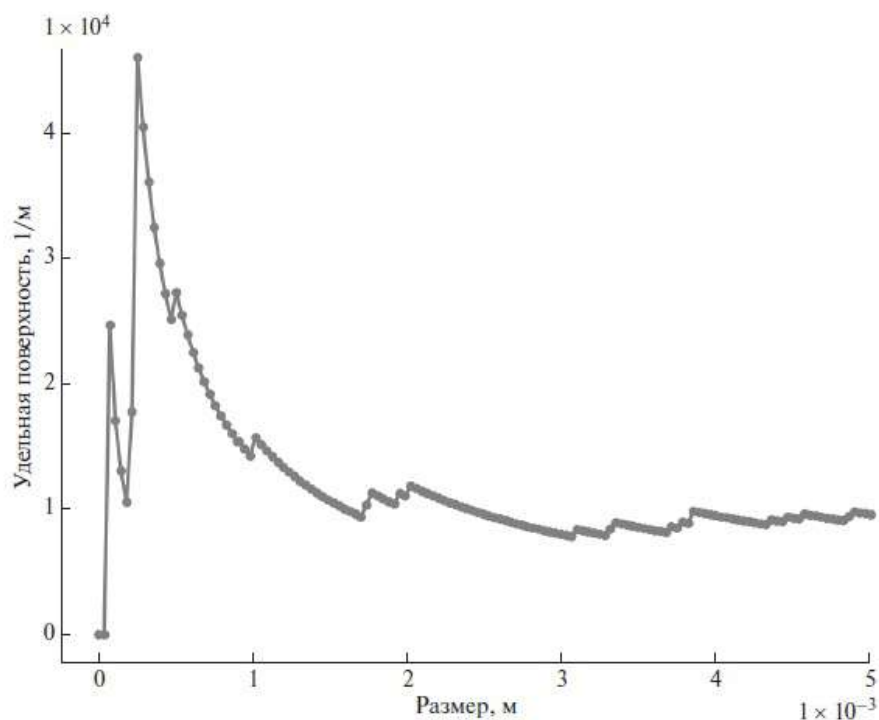


Рисунок 5.60 — Динамика поведения величины удельной поверхности в зависимости от размера анализируемого объема.

одновоксельного размера (9 мкм) до фильтрации и после фильтрации с выбранными параметрами проиллюстрировано на рис. 5.61.

На рис. 5.59 приведен участок горизонтального сечения восстановленного изображения после фильтрации (9а) и бинаризации (9б). На бинаризованном изображении хорошо заметно исчезновение «висячих камней» и значительное уменьшение количества одновоксельных пор по сравнению с неотфильтрованным изображением (рис. 5.59б). Описанные далее методики расчета пористости, удельной поверхности и распределения пор по размерам применялись к полному (не репрезентативному) бинарному объему, участок которого представлен на рис. 5.62.

Для расчета пористости использован метод прямого подсчета элементарных объемов. Величина пористости рассчитывается как отношение объема пор к суммарному объему пор и материала. Объем материала определяется подсчетом числа белых вокселей V_m , в то время как для подсчета объема пор необходимо разделить черные воксели пор и внешнего (окружающего восстановленный объем образца) пространства. Для этих целей к бинарному изображению применялась операция морфологического замыкания [233] с размером окна, много большим характерного размера пор. В результате этой операции все поры «закрашиваются», в то время как внешняя пустота сохра-

няется. Количество белых вокселей V_t на замкнутом изображении определяет суммарный объем материала и пор, т.е. пористость рассчитывалась согласно выражению:

$$porosity = (V_t - V_m)/V_t \quad (5.43)$$

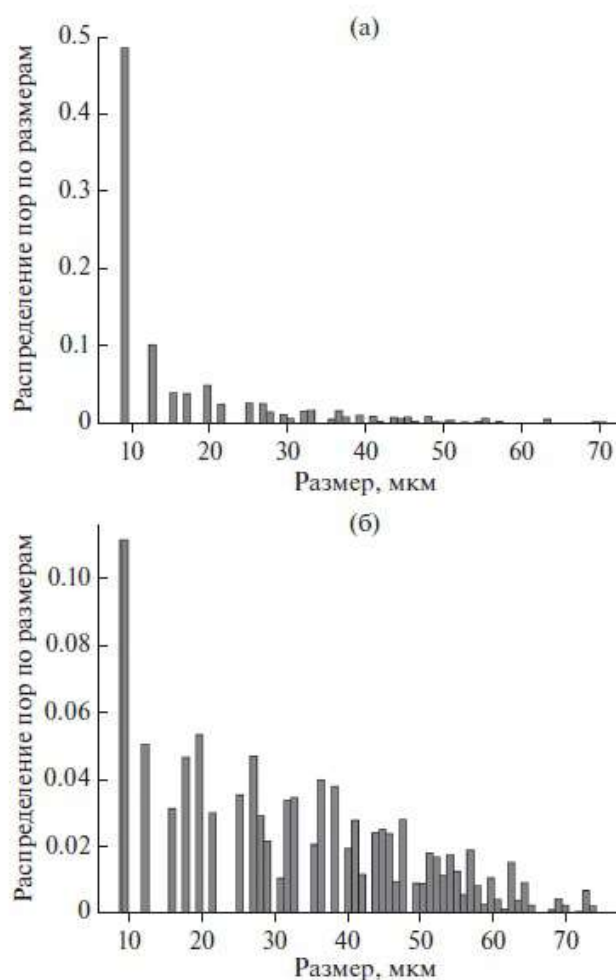


Рисунок 5.61 — Распределение закрытых пор по диаметру поры (в вокселях), (а) - исходное, (б) - после применения билатерального фильтра.

Рассчитанное значение пористости составило 31.4%, что находится в хорошем соответствии со значением, полученным методом гидростатического взвешивания (30.5%).

Для расчета удельной поверхности были использованы стереологический подход и метод марширующих кубов [234]. В стереологическом подходе согласно второму основному стереометрическому соотношению [235; 236], значение удельной поверхности в 2 раза больше среднего числа пересечений пространственных поверхностей случайной секущей на единице длины. Рассчитанные значения удельной поверхности лежат в диапазоне $0.35 \times 10^{-2} - 0.56 \times 10^{-2} \text{ м}^2/\text{г}$ ($0.8 \times$

$10^4 - 1.3 \times 10^4 \text{ м}^{-1}$). Значение удельной поверхности, рассчитанное с привлечением метода марширующих кубов (использована реализация из библиотеки обработки изображений *scikit-image*), составило $0.35 \times 10^{-2} \text{ м}^2/\text{г}$ ($0.8 \times 10^4 \text{ м}^{-1}$). Полученные значения не совпали с результатом измерения удельной поверхности методом БЭТ. Рассчитанная величина оказалась в 50 раз меньше. Это объясняется различием пространственного разрешения использованных методов. При использовании прибора *Sorbi-M* речь идет об атомном разрешении, в то время как пространственное разрешение томографического метода составляло 9 мкм.

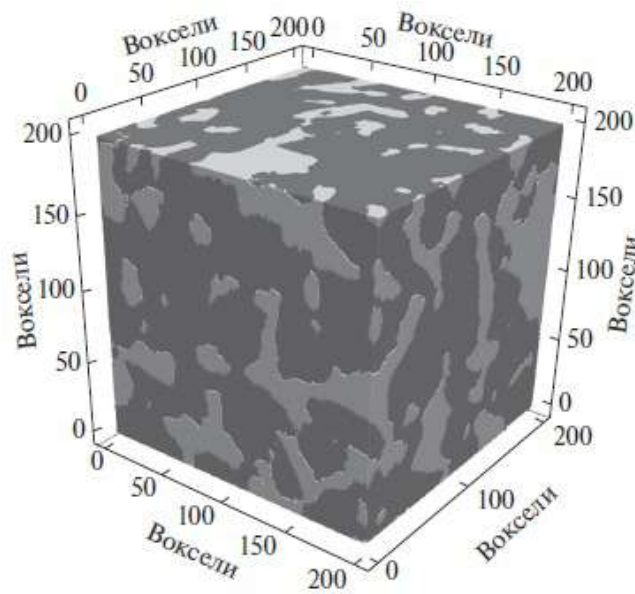


Рисунок 5.62 — Участок восстановленного объема после выполнения операций фильтрации и бинаризации, темным цветом обозначен материал пористого фильтра, светлым - поры.

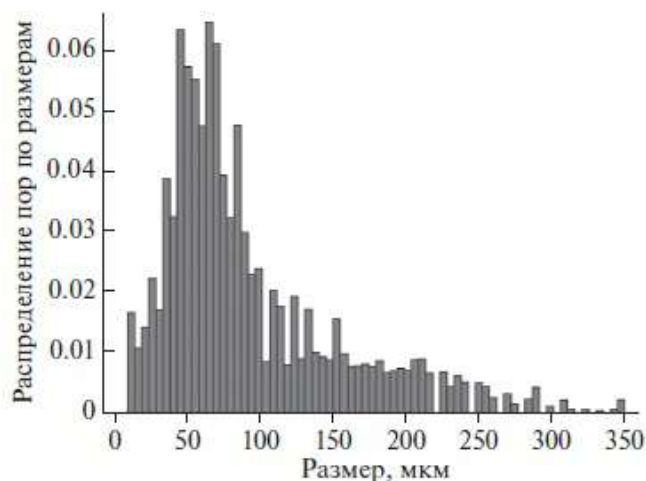


Рисунок 5.63 — Распределение пор по размерам.

Распределение пор по размерам, представленное на рис. 5.63, получено с помощью программного обеспечения PoreSpy. Основное количество пор имеет размер от 35 до 90 микрон. Изменение параметров технологического процесса создания мембран влечет за собой изменение их морфологической структуры, что, в свою очередь, меняет пористость. Визуализация результата технологического процесса предоставляет возможность оценивать влияние того или иного параметра технологического процесса на внутреннюю структуру мембраны, и таким образом, оптимизировать процесс создания мембран.

Как показано выше, сегментация цифровых изображений является самостоятельной задачей. Оптимизированный под свойства томографируемого объекта и под условия томографической съемки метод сегментации не является обычно универсальным.

Для анализа размера пор и контроля их распределения в ходе диссертационного исследования был предложен метод, основанный на использовании многомасштабного анализа [162] реконструированного цифрового изображения объекта. В качестве оценки точности реконструкции использован коэффициент корреляции между вейвлет-преобразованиями изображения фантома и реконструированного изображения на масштабах, соответствующих анализируемому признаку изображения фантома. Данный метод подойдет для оценки точности при применении томографии в качестве метрологического инструмента контроля. Поскольку отклонение в размерах отдельных частей изделия не только меняет его эксплуатационные характеристики, но может уменьшать срок эксплуатации изделия, то контроль размеров особенно выжтен при эксплуатации изделия в экстремальных режимах. Точность результата реконструкции цифрового изображения объекта из набора рентгеновских томографических проекций в многомерном пространстве может характеризоваться абсолютным значением коэффициента корреляции Пирсона между идеальным изображением объекта (фантомом) C_{ideal} и восстановленным изображением C_{rec} [237]:

$$cor(C_{rec}, C_{ideal}) = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_{rec}^*(i, j) c_{ideal}^*(i, j)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_{rec}^*(i, j)^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_{ideal}^*(i, j)^2}}. \quad (5.44)$$

Здесь N латеральный размер изображения, $c_{rec}(i, j)$ и $c_{ideal}(i, j)$ - значения яркости в пикселе (i, j) для восстановленного и идеального изображений, соответственно, $c_{rec}^*(i, j) = c_{rec}(i, j) - \mu_{rec}$ и $c_{ideal}^*(i, j) = c_{ideal}(i, j) - \mu_{ideal}$. Пусть стоит следующая задача: используя метод рентгеновской томографии выполнить

метрологический контроль упорядочения структуры пористого пространства (определить отклонения в положении макропор) [238] или выполнить контроль морфологии структуры (размер и форма пор) [239]. Тогда форма, размер и/или положение пор являются оцениваемыми параметрами. Высокая точность реконструкции в этом случае означает, что на цифровом изображении контролируемой структуры с высокой точностью должны быть определено отклонение формы пор, размера пор и расстояния между порами от заданных значений. Чтобы оценить работу предложенного метода был проведен модельный

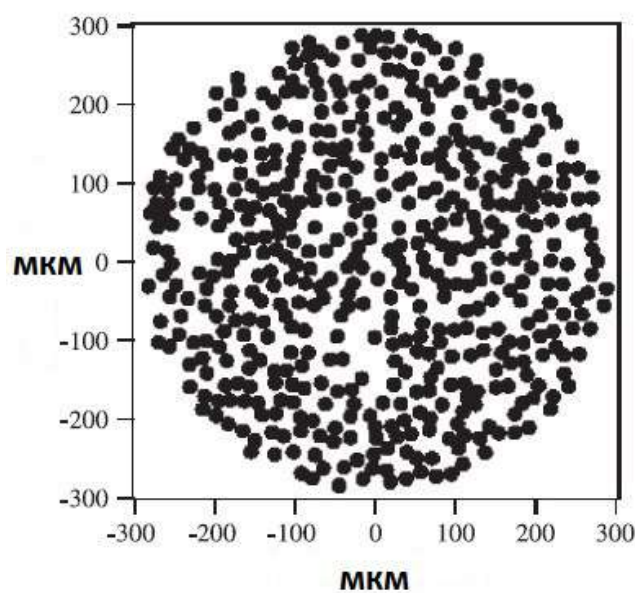


Рисунок 5.64 — Изображение фантома, использованное для расчета проекций в модельном эксперименте.

эксперимент. Эксперимент включал в себя следующие этапы: подбор и описание фантома, расчет модельных томографических проекций, выполнение реконструкции с использованием двух алгоритмов реконструкции, применение вейвлет преобразования к фантому и реконструированному изображению и сравнение результатов выполненного преобразования. Для реконструкции изображений были использованы метод свертки и обратной проекции и алгебраический метод. Фантом представлял собой цилиндр, заполненный полимером, прозрачным для зондирующего излучения, со случайно распределенными круглыми зернами диоксида кремния. Средний диаметр зерна 20 микрон плотность распределения 1768 зерен/мм² (рис. 5.64). Использованное для расчетов проекций значение плотности ρ 2.53 г/см³). Радиус цилиндра 300 мкм,

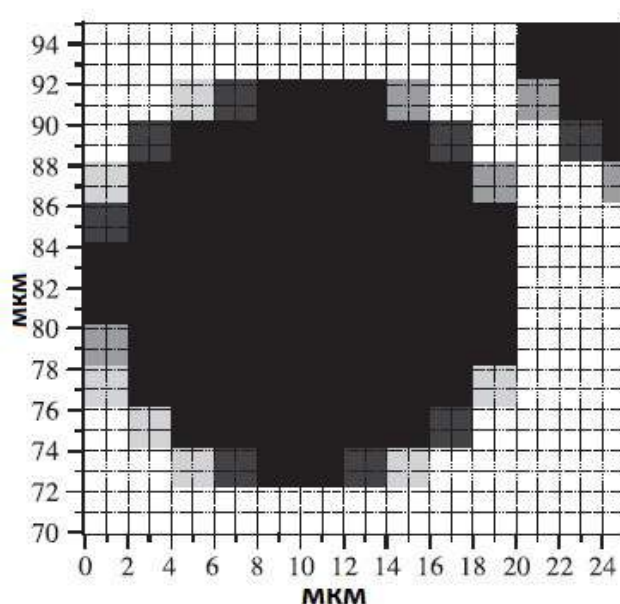


Рисунок 5.65 — Увеличенное изображение одного зерна.

количество зерен SiO_2 – 500. Были рассчитаны проекции для случая зондирования монохроматическим параллельным пучком в круговой схеме сбора проекций. Энергия рентгеновского излучения 15 кэВ. Рассчитано 300 томографических проекций. Размер ячейки детектора 2 микрона. Программный комплекс RegART использовался для реконструкции. Рассчитаем коэффициент

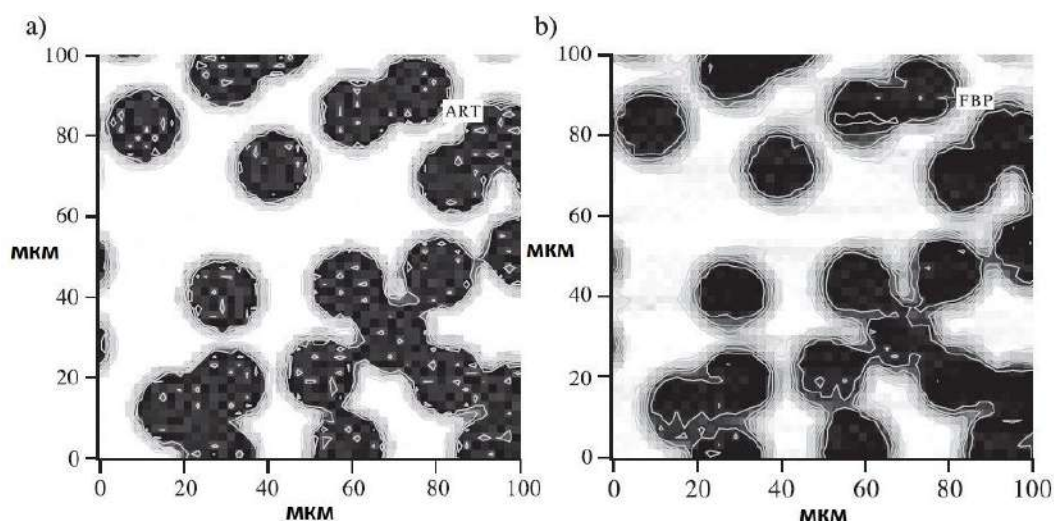


Рисунок 5.66 — (а) Результат реконструкции алгебраическим методом ART с наложенными изолиниями (участок). (б) Результат реконструкции интегральным методом FBP с наложенными изолиниями (участок).

корреляции между исходным и восстановленным изображениями. Изображения идентичны, если значение коэффициента равно 1. На рисунках 5.66а и рис. 5.66б представлены изображения, реконструированные методами свертки

и обратной проекции и алгебраическим (30 итераций), соответственно. Рассчитанные значения $cor_{FBP} = 0.97$ и $cor_{ART} = 0.99$, соответственно. Полученные значения подтверждают вывод, сделанный в разделе 4.3 о том, что алгебраические методы реконструкции при большем времени, требуемом для расчетов, по сравнению с интегральными, позволяют восстанавливать цифровые изображения объектов с более высокой точностью.

Рассчитаем вейвлет-преобразование изображения фантома 5.64 и реконструированных интегральным и алгебраическим методами изображений 5.68 для масштабов, соответствующих размеру зерна и расстоянию до ближайшего соседа. Значение коэффициента корреляции между изображениями, результатами вейвлет преобразования, фантома и восстановленного изображения теперь является маркером качества реконструкции признаков изображения. Следуя определению Морле-Гроссмана [240] непрерывного вейвлет-преобразования для функции $c(x) \in L^2(R)$, пространство всех квадратично интегрируемых функций определяется следующим образом:

$$W(a,b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} c(x) \psi^* \left(\frac{x-b}{a} \right) dx, \quad (5.45)$$

где $W(a,b)$ - коэффициент вейвлета функции $c(x)$, $\psi(x)$ - материнский вейвлет, $a(> 0)$ - параметр масштаба, b - параметр сдвига. Было показано [241], что $c(x)$ можно восстановить с использованием выражения:

$$\rho(x) = \frac{1}{K\psi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{\sqrt{a}} W(a,b) \psi \left(\frac{x-b}{a} \right) \frac{dad b}{a^2}, \quad (5.46)$$

где

$$K\psi = \int_0^\infty \frac{\hat{\psi}(\omega)\hat{\psi}(\omega)}{\omega} d\omega = \int_{-\infty}^0 \frac{\hat{\psi}(\omega)\hat{\psi}(\omega)}{\omega} d\omega \quad (5.47)$$

Реконструкция возможна только если $K\psi$ определена (условие допустимости). Будем использовать ступенчатую функцию Хаара:

$$\begin{cases} \psi(x) = 1 & \text{if } 0 \leq x < \frac{1}{2} \\ \psi(x) = -1 & \text{if } \frac{1}{2} \leq x < 1 \\ \psi(x) = 0 & \text{if otherwise} \end{cases} \quad (5.48)$$

в качестве материнского вейвлета для вычисления вейвлет-преобразования. Если изображения, для которых рассчитывается вейвлет-преобразование, дискретизованы, соответственно, значения материнского вейвлета также дискретизуются. Диапазон частот нового вейвлет-пространства ограничен размером

пиксела изображения. Выбираем два основных значения: размер зерна (диаметр) и расстояние до ближайшего соседа. Рассчитаем вейвлет-преобразования с величиной параметра a = размер зерна. Результаты вейвлет преобразования представлены на рисунке 5.67 для изображения фантома (слева), изображения, реконструированного с использованием алгебраического метода (в центре) и для реконструированного с применением интегрального метода (справа). Значения коэффициента корреляции для алгебраического метода реконструкции $cor_{ART} = 0.99$ и для метода свертки и обратной проекции $cor_{FBP} = 0.98$, соответственно. Теперь основной вклад в рассчитываемое значение коэффициента дает размер зерен. Изменим метрику. Воспользуемся метрикой MSE (см. выражение 5.34) для оценки точности реконструкции. Рассчитанные значения

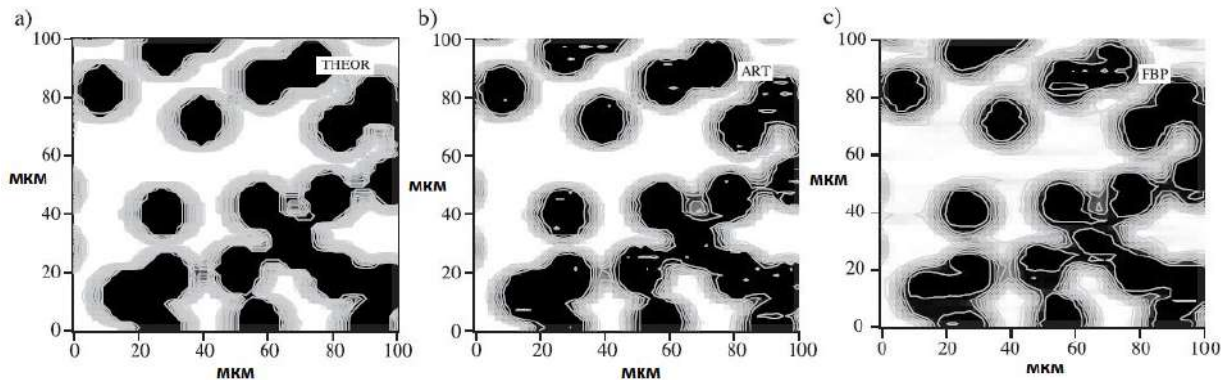


Рисунок 5.67 — Результат вейвлет-преобразования с наложенными изолиниями (участок). Параметр масштаба a = размер зерна. а) для изображения фантома, б) - для изображения, восстановленного алгебраическим методом, с) для изображения, восстановленного интегральным методом.

для реконструированного алгебраическим методом изображения и для изображения, восстановленного с использованием интегрального метода свертки и обратной проекции, равны 0.02 и 0.09, соответственно. Правомерно сделать вывод, что для выбранной схемы сканирования и данного типа объектов, алгебраический метод реконструкции является лучшим выбором, если стоит задача количественного анализа отклонения размера зерен от заданного размера или задача анализа пространственного распределения зерен. Обратим внимание, что значения MSE согласуются со значениями коэффициентов корреляции, но разница в числовых величинах уже значительнее. Анализ чувствительности метрик и выбор наилучшей для каждого конкретного случая применения томографа является самостоятельной задачей.

В последние годы производительность микроэлектронных устройств была улучшена за счет оптимизации процессов создания устройств в целом, межсоединений и структур упаковки. Для гетерогенной интеграции микрочипов, которая использует новейшие технологии упаковки (для все более сложной укладки кристаллов и современных архитектур чиплетов) создаются новые подходы к созданию металлических межсоединений на кристалле и сетей распределения питания. Для проверки на наличие дефектов, устранения неисправностей, анализа физических отказов, мониторинга процесса выхода годных изделий, оценки качества и т.п. высокоразрешающая визуализация внутренней структуры оказывается полезным инструментом. Высокорастворимая томографическая рентгеновская съемка может предоставить информацию о скрытых структурах и дефектах в непрозрачных микрочипах или гетерогенно интегрированных микроэлектронных изделиях неразрушающим способом. Для получения цифрового изображения необходимо зарегистрировать некоторое количество проекций и выполнить реконструкцию по ним. Сколько проекций надо зарегистрировать для инспекции конкретного узла? Продемонстрируем, что ответ на этот вопрос зависит от типа решаемой задачи. Обратимся к рисунку 4.45. Визуально анализируя результат выполненной по 10 проекциям реконструкции можно сделать выводы о наличии трех включений. Для задачи дефектоскопии этого может оказаться достаточным. Удастся обнаружить включение и локализовать его, т.е. определить местоположение. На реконструкции по 130 проекциям проявились и самые мелкие включения, т.е. точнее визуализирована структура. По этому результату уже можно строить модель морфологической структуры или проводить метрологический контроль. В диссертационном исследовании

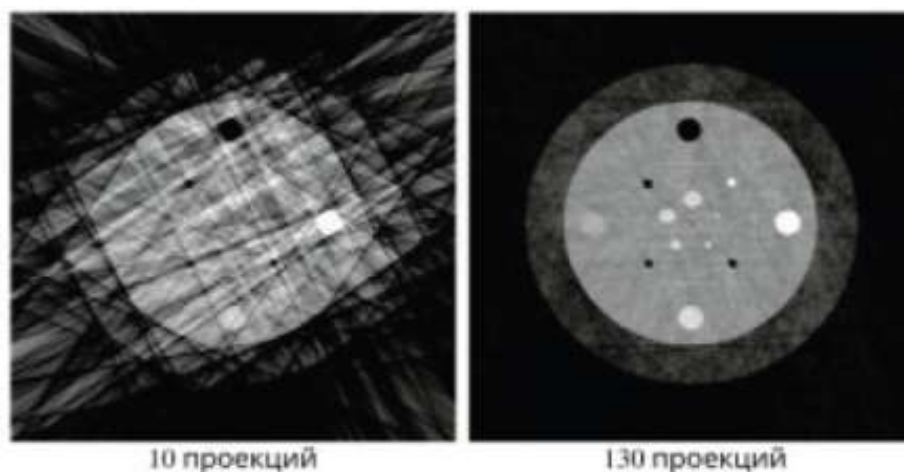


Рисунок 5.68 — (а) Результат реконструкции ART по 10 (слева) и 130 (справа) проекционным углам.

довании предложено оценку точности реконструкции связывать с назначением томографа.

Сегодня полное время для построения заключения о проведенном томографическом исследовании, т.е. время, затрачиваемое на съемку большого количества проекций, реконструкцию и анализ восстановленного изображения, слишком велико для достижения пропускной способности, необходимой для промышленного конвейерного использования. Существует острая потребность в сокращении полного времени построения заключения. О технологии мониторинговой реконструкции, сокращающей время измерения и реконструкции, говорилось в предыдущих разделах. Для конвейерного контроля следует разделять задачи дефектоскопии и метрологии. Для метрологических задач необходимо измерять значения определенного свойства или характеристики. Свойство может включать форму, размер, положение и/или другой атрибут объекта в пределах образца или размеры образца в целом. Суммируя сказанное выше приходим к следующим выводам.

Первый вывод может быть сформулирован так. Автоматический анализ цифрового изображения детали/изделия с целью построения его трехмерной модели с последующим документированием и задача дефектоскопии в режиме реального времени для отбраковки негодных изделий требуют разных подходов к оценке точности используемых в томографе алгоритмов реконструкции. Обнаружение дефекта может не являться конечной целью процесса контроля, а важным оказывается определить и оценить его местоположение. В частности, если дефект расположен на допустимой глубине от поверхности, то он может быть удален во время шлифовки на следующих этапах производства готового изделия. Если глубина залегания превышает допустимую, то изделие отбраковывается. В некоторых случаях решение по отбраковке принимается после характеристики дефекта. Тогда при решении задачи дефектоскопии возникает этап распознавания типа дефекта. Он может быть реализован разными способами – как решение задачи гомеоморфности предъявленному изображению дефекта (с использованием топологических инвариантов), использование процедуры скелетонизации и т.п. Получение скелетного представления не является в данном случае самоцелью, но помогает в дальнейшем выделить характеристики дефекта, такие как особые точки и структуры контура. Второй вывод – подходы к распознаванию дефекта в случае необходимости должны быть инкорпорированы в процесс оценки точности реконструкции. Если назначением томографа

является оценка характеристик объекта, рассчитываемых по результатам реконструкции, например скорость протекания динамических процессов в структуре или построение заключения о возможности интеграции нескольких технологических процессов при изготовлении изделия, то приходим к третьему выводу. При использовании томографов в качестве одного из блоков системы принятия финального решения критерии оценки точности алгоритмов реконструкции должны дополняться требованиями системы, реализующей процедуру принятия решения.

В качестве заключения дадим формальное описание подходов к субъективной и объективной оценке точности реконструируемых изображений. Одной из широко используемых оценок является оценка, основанная на восприятии человека, восприятии специалиста, работающего в одной из двух областей. Первая связана с производством приборов, формирующих изображение, вторая – с областью использования приборов. Данный подход к оценке качества не требует обязательного наличия идеального изображения для попарного сравнения, не требует этапа совмещения двух изображений, может базироваться на использовании опыта профессионала или группы профессионалов, т.е. на экспертной оценке. В качестве количественного показателя при проведении тестирования на целевой аудитории может использоваться показатель MOS (Mean Opinion Score) [242] или, так называемый, R-фактор [243]. Оценка проводится по конкретным характеристикам (например, размытость, шум, артефакты). Данный подход предлагается использовать в том случае, если визуальный контроль результатов томографии будет выполнять квалифицированный оператор. Объективные подходы к оценке точности, т.е. подходы, не требующие экспертной оценки, могут базироваться на использовании референсных (или эталонных) изображений или не требовать таковых. Начнем с первых. В томографии в качестве референсных изображений часто использую результат реконструкции, выполненной из проекций, собранных от физического фантома на томографе в идеальных условиях. Фантомом можно назвать любой синтетический объект, содержащий в своем объеме структуры известной геометрии и с известным составом. Идеальными условиями измерения считаются условия, при которых число проекционных углов удовлетворяет теореме Котельникова, проекции имеют высокое отношение сигнал/шум. Последнее условие зависит от элементного локального состава фантома и энергетического состава спектра, предполагаемого для зондирования. Для объективной количественной оценки точности

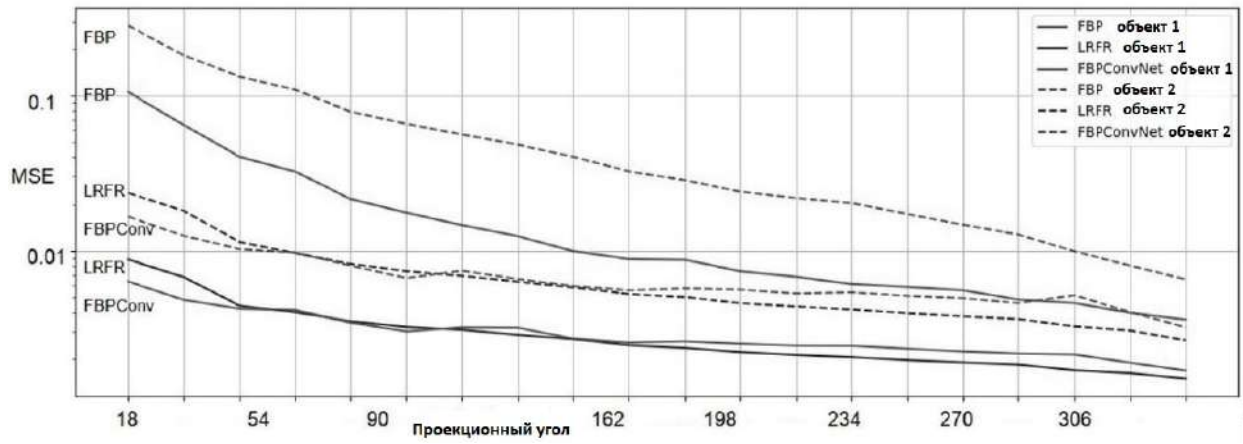


Рисунок 5.69 — Динамика ошибки MSE для 3-х алгоритмов и 2-х объектов.

реконструкции могут быть использованы метрики, например, MSE, PSNR, SSIM. Наблюдение за динамикой поведения выбранной (или построенной) метрики (в зависимости от числа проекций (рис. 5.69), уровня шума на проекциях и т.п.) позволит выбрать оптимальный алгоритм реконструкции для решения конкретной задачи в зависимости от назначения томографа. Предложено томографы разбить на три группы. К первой отнесены томографы, предназначенные для построения 3D цифровых изображений томографируемых объектов. Ко второй группе относятся томографы, применяемые для дефектоскопии или метрологического контроля. Для таких аппаратно-программных комплексов рекомендованы два типа подходов к оценке точности реконструкции. В первом подходе метрика M дополняется частью, связанной с типом дефекта:

$$M(C_{ideal}, C_{rec}) = \alpha F^1(C_{ideal}, C_{rec}) + \beta F^2(C_{ideal}, C_{rec}) \quad (5.49)$$

В линейной комбинации первое слагаемое является взвешенной суммарной по-пиксельной невязкой F^1 значений яркости восстановленного и референсного изображений в пространстве расстояний, а второе F^2 - взвешенной невязкой в параметрическом пространстве моделей дефекта. Веса α и β определяются эмпирически. Анализировать можно не полный восстановленный объем, а его часть, содержащую дефект. Анализ включает этапы: обнаружение дефекта, сравнение обнаруженного дефекта с моделью дефекта, принятие решения об отбраковке. Т.е. метод реконструкции из проекций, собранных в требуемых условиях, должен позволять обнаруживать дефект. Локальная область с дефектом формально описывается в терминах модели дефекта. При этом правило обнаружения дефекта и модель дефекта могут быть согласованы или не согласованы, модель дефекта и модель принятия решения об отбраковке должны быть

согласованы. Второй подход базируется на расчете метрик от преобразованного восстановленного изображения, например расчет метрик на некотором масштабе результата вейвлет преобразования. К третьей группе отнесены томографы, являющиеся частью многоступенчатой системы принятия решения. Например, томограф, используемый для изучения движения жидкости [244] или газа через пористую структуру с целью исследования фильтрационных свойств, степени проницаемости или теплопередачи. К третьей группе можно отнести томограф для наблюдения за условиями образования дефекта и его распространением вглубь структуры. В таких системах модель оценки точности алгоритмов реконструкции превращается в модель ответа системы принятия решения. Последняя может ограничиваться линейной комбинацией суммарной попиксельной невязки между изображениями в целом и невязки в параметрическом пространстве моделей дефекта, но в некоторых применениях может дополняться требованиями модели оценки движения [225].

5.8 Заключение

Метод рентгеновской компьютерной томографии позволяет визуализировать внутреннюю морфологическую структуру объекта без разрушения самого объекта. Из собранных под разными углами рентгеновских проекций восстанавливается 3D цифровое изображение объекта. Цифровое изображение – это распределение некоторой характеристики, включенной в модель описания объекта. Если измерение рентгеновских проекций проводилось в условиях, отличных от идеальных, то применение стандартных методов реконструкции приведет к искажению цифровых изображений. Искажения называются артефактами реконструкции. Идеальные условия измерения – количество измеренных проекций удовлетворяет теореме Котельникова, проекции имеют хорошее отношение сигнал-шум, все локальные области, интересующие пользователя томографа, дают на проекции высокий контраст, в объекте нет сильно поглощающих локальных областей, зондирование ведется монохроматическим излучением, для регистрации ослабленного объектом излучения используется идеальный позиционно-чувствительный детектор, все параметры съемки передаются в реконструктор без искажения. В ходе проведения диссертационного исследования были созданы методы, позволяющие уменьшить выраженность артефактов, обусловленных отклонением условий измерения проекций от идеальных. Также предложен метод оценки точности реконструкции с учетом задачи, решаемой с использованием томографического комплекса. Аппаратно-программные томографические комплексы используются для определения внутренней морфологической локальной структуры неизвестных объектов, проведения дефектоскопии или метрологического контроля готовых изделий, изучения динамических процессов, протекающих в объектах и т.п. Исследование внутренней структуры устройства может проводиться с разным пространственным разрешением, т.е. на разных масштабах [177]. Для построения цифрового изображения объекта из набора томографических проекций в томографических комплексах может предлагаться на выбор линейка алгоритмов томографической реконструкции. Использование томографов для решения разнотипных задач (изучение структуры, дефектоскопия, контроль и т.д.) предъявляет разные требования к алгоритмам реконструкции. Дополнительно к требованиям по точности могут возникнуть требования по времени вычислений или требова-

ния к объему памяти. При наличии квалифицированных операторов томографа оценка точности может базироваться на экспертной оценке. Томографические комплексы в диссертации предложено разделить на три группы согласно назначению и использовать соответствующие группе подходы к оценке точности реконструкции. Цель использования томографов первой группы – построить 3D цифровое изображение зондируемого физического объекта. Томографы этой группы находят применение в задачах определения структуры неизвестных природных или созданных человеком объектов, в задачах реинжиниринга, задачах организации разномасштабных измерений на одном приборе, задачах организации съемки как изделия в целом, так и его отдельных частей с разных ракурсов и т.д. Для оценки точности используемых в данных аппаратно-программных комплексах алгоритмов реконструкции применимы два интегральных подхода. В первом суммарно оцениваются отклонений значений яркости вокселей восстановленного объема от значений яркости референсного объема (MSE, PSNR, SSIM и т.п.). Во втором – анализируется суммарная ошибка репроецирования, т.е. отклонение реально измеренных проекций от проекций, рассчитанных с использованием восстановленного распределения значений ослабления рентгеновского излучения материалами изделия в случае, если фантом не доступен. Последний подход легко применим для случаев монохроматического зондирования и требует дополнительных оценок для применения в измерительных схемах с полихроматическим излучением или в томографических схемах с установленными в измерительном тракте оптическими элементами. Ко второй группе отнесены томографы-дефектоскопы и томографы для метрологического контроля. К третьей группе принадлежат томографы, являющиеся частью многоступенчатой системы принятия решения, например, томографы для определения условий образования дефекта и наблюдения за динамикой деградации структуры.

Выводы

Цель проведенного исследования заключалась в создании и исследовании вычислительных методов рентгеновской диагностики для определения атомной структуры материалов, локальной морфологической структуры и состава изделий микро- и наноэлектроники.

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Разработан метод вейвлет-анализа протяженной (дальней) тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (EXAFS-спектров) с контролем размера ячейки спектральных характеристик, позволяющий в геометрической модели окружения ионизируемого атома определить радиусы ближайших координационных сфер и их элементный состав. Предложенный метод исключает этап подгонки параметров геометрической модели, необходимый при использовании для анализа спектров метода Фурье. Использование предложенного метода сокращает в десятки раз время проведения исследования атомной структуры новых материалов, способных преодолеть ограничения полупроводниковой технологической платформы. Использование предложенного метода для анализа EXAFS-спектров позволило уточнить детали атомной структуры выращенной высокотекстурированной эпитаксиальной сверхрешетки $GeTe(1 \text{ нм})/Sb_2Te_3(3 \text{ нм})$. С помощью предложенного метода анализа EXAFS спектров уточнена структура слоистых двойных гидроксидов, используемых в качестве двумерных нанореакторов или в качестве двумерных модельных систем для изучения процессов переноса энергии.
2. Разработан вычислительный метод определения двумерного профиля протонных и рентгеновских микропучков, базирующийся на математической обработке карт флуоресцентных сигналов, формируемых при сканировании ортотропных структур, нанесенных на тонкую подложку, сфокусированными протонными или рентгеновскими микропучками. Знание формы профиля микропучка (пространственного распределения количества протонов или пространственного распределения интенсивности рентгеновского излучения в фокальной плоскости фокусирующей системы) позволяет до 5 раз повысить пространственное

- разрешение сканирующего метода. При использовании микропучков для оценки чистоты поверхности, исследования локального состава и/или структуры поверхности и приповерхностных слоев повышение пространственного разрешения позволяет уточнить количественные оценки регистрируемых флуоресцентных сигналов, описывающие пространственное распределение и силу источников флуоресценции. При использовании микропучков для микроструктурирования поверхностей в литографии знание формы микропучка позволяет оптимизировать процессы управления пучком для повышения качества элементов формируемой микроструктуры.
3. Построена параметрическая модель оценки точности результатов томографической реконструкции с учетом функционального назначения томографа. Использование модели позволяет комбинировать метрики оценки качества реконструкции с учетом условий поставленной для томографа задачи: исследование, проведение дефектоскопии, метрологического контроля или использование томографа в качестве одной из частей многоступенчатой системы принятия решения.
 4. Разработан вычислительный метод рентгеновской флуоресцентной томографии, базирующийся на модели формирования рентгенофлуоресцентных проекций, уточненной в части учета поглощения излучения в объеме образца, и позволяющий, в отличие от ранее известных методов, оценивать пространственное распределение химических элементов в объеме образца без систематического занижения значений по причине ослабления сигнала. Применение метода для изучения ионных каналов в растениях и их роли в дальнем транспорте ионов позволило локализовать каналы для транспорта элементов K, Fe, Cu, As, Y и Zr. В рамках изучения процесса повторного осаждения на краях абляционного отверстия в вулканическом стекле исследовано распределение трех групп элементов: элементов, склонных к лазерноиндуцированному фракционированию, сидерофильных и литофильных элементов, а также летофильных элементов, не демонстрирующие фракционирования, что позволило оптимизировать процесс лазерной абляции.
 5. Разработан метод томографической реконструкции цифрового изображения объекта *RegART* с регуляризацией в виде нелинейного оператора. Метод позволил на 7% повысить точность томографической

реконструкции при работе с рентгеновскими проекциями, собранными в условиях ограниченной дозовой нагрузки, по сравнению со стандартными методами. Для случаев высокого уровня шума на проекциях предложены формы нелинейных фильтров, при малом числе проекционных углов предложено использовать нейросетевой регуляризатор. Использование предложенного метода регуляризации при малоракурсной съемке, понижающей дозовую нагрузку до 10 раз, позволило повысить точность реконструкции на порядок по сравнению с опубликованной ранее нейросетевой моделью, обученной для задачи реконструкции.

6. Разработан метод томографической реконструкции цифровых изображений объекта для определения локального состава многокомпонентного объекта с использованием одного стандартного набора рентгеновских полихроматических проекций. Ранее для определения локального состава предлагалось использовать сканирование несколькими различающимися по энергетическому составу спектрами. Это в разы увеличивает дозовую нагрузку на изделие, что может приводить к повреждению изделий. На примере двухкомпонентного объекта показано, что применение предложенного метода позволяет восстановить отдельное распределение для каждой из компонент.
7. Разработан метод томографической реконструкции, обеспечивающий большую точность по сравнению с ранее известными за счет уменьшения искажений, обусловленных полихроматическим зондированием, недостаточным уровнем калибровки узлов томографа и наличием сильно поглощающих включений в объекте. Автоматический метод линейаризации полихроматических проекций, не требующий проведения дополнительных референсных измерений, позволяет уменьшить выраженность артефактов типа чаши до 5 раз. Метод автоматической коррекции параметров положения оси вращения позволяет автоматически определять значения параметров с точностью определения параметров вручную. Его использование позволяет избежать размытия границ областей на восстановленном изображении. Метод реконструкции цифровых изображений объектов, содержащих сильно поглощающие включения, уменьшает выраженность артефактов, возникающих в виде ярких полос, расходящихся от места нахождения

включения и образующих область тени. Это позволяет анализировать детали изображения, попавшие в область тени.

В заключение следует отметить, что сегодня в микроэлектронике при планарной (2D) сборке и монтаже изделий применяются классические оптические методы контроля. Рентгенографические методы позволяют визуализировать внутренние области, однако по мере увеличения количества слоев в структуре задача интерпретации и анализа изображений становится более сложной как для оператора, так и для специализированного ПО. При 2.5D сборке и монтаже элементов через промежуточную подложку-интерпозер или при использовании нескольких локальных интерпозеров (мостов-коммутаторов), аналогично случаю 3D сборки высокой плотности, необходимо контролировать положение, структуру и морфологические формы элементов в объеме. Рентгеновские томографические методы превосходят возможности оптических и рентгенографических методов контроля и могут применяться на разных этапах производства и эксплуатации [245].

Рентгеновский компьютерный томограф - это аппаратно-программный комплекс, который включает: источник рентгеновского излучения; детектор, регистрирующий ослабленное объектом рентгеновское излучение в виде изображений-проекций; систему приводов и сенсоров для получения проекций при разных взаимных положениях источника, объекта и детектора; программный комплекс, который чаще всего проводит КТ реконструкцию и анализ результатов реконструкции, но в случае необходимости может быть дополнен библиотеками сбора и анализа проекций. Результатом КТ реконструкции является 3D цифровое изображение объекта, представимое в виде воксельного объема. В каждом вокселе хранится цифровое значение, которое характеризует ослабление рентгеновского излучения источником физическим локальным объемом, соответствующим вокселу. Для визуального контроля геометрических отклонений деталей объема или локализации дефектов специальными программами-просмотрщиками строится и предъявляется пользователю 3D цифровое изображение объема или отдельные 2D виртуальные срезы. Воксельные данные могут быть проанализированы автоматически ПО томографа или передаваться в стороннее ПО для выделения поверхностей и областей, оценки расстояний, углов и т.п. Пространственное разрешение единицы микрон, демонстрируемое сегодня на лабораторных микротомографах [246] позволит, в частности, на этапах отладки технологии создания систем в корпусе контролировать толщину

проводников, исследовать поля деформаций вокруг токопроводящих каналов, анализировать качество пассивации поверхностей и металлизации отверстий, контролировать геометрию отдельных элементов металлизированной разводки, определять пространственное расположение внутренних металлизированных RDL слоев, контролировать соответствие слоев топологическим нормам и т.д.

Выполнение дефектоскопии методами рентгеновской томографии во время испытаний надежности на различных этапах разработки технологического процесса обеспечит обратную связь с моделями прогнозируемой надежности, позволит существенно сократить сроки НИР и ОКР этапов. Помимо обнаружения трещин, наплывов, нарушения контактов томограф позволяет контролировать качество многоуровневой сборки для разных технологий изготовления подложки при разных методах интеграции (TSV, VIP и т.д.), упаковку структур на гибких носителях на этапе монтажа в корпус.

Методы анализа результатов рентгеновской томографии являются мощным инструментом реверс-инжиниринга (обратного инжиниринга), когда воксельный объем преобразуется в набор пространственных областей и поверхностей САПР-модели. При этом интеллектуальные методы построения ключевых виртуальных срезов, автоматический трекинг и методы распознавания позволяют формировать точную 3D модель пространственного размещения компонент и элементов схемы. Несанкционированной модификации может быть подвержен любой тип компонент и модулей. Томография позволяет проводить контроль. Результаты томографии в соответствующем пространственном разрешении позволяют сравнивать наблюдаемую структуру объекта с эталонным описанием, тем самым выявляя факты наличия модификаций на физическом уровне. Особенно важными такие проверки могут быть при конвейерном производстве.

В рамках автоматизированных и автоматических технологических производственных линий методы контроля на основе рентгеновской томографии могут использоваться для контроля входных компонент, проверки соблюдения технологического процесса и финального выходного контроля. Томографические инспекционные комплексы могут быть интегрированы в конвейерные и/или роботизированные системы. Входная проверка на соответствие спецификациям позволит выявить скрытый брак производителя-поставщика, наличие механических повреждений, контрафактные компоненты, а также компоненты

с внедренными злоумышленниками вредоносными аппаратными закладками в виде дополнительных электронных компонент.

В методе рентгеновской томографии существует объективное противоречие между скоростью получения ответа и точностью реконструкции. При прочих равных для более высокой точности необходимо измерять больше проекций с большей экспозицией, что приводит как к увеличению времени томографирования, так и к увеличению объема сырых данных. В свою очередь увеличение объема данных увеличивает время работы реконструирующих алгоритмов, при этом более точные и устойчивые методы реконструкции вычислительно являются более сложными, чем быстрые и грубые. Таким образом, выбор режима сканирования и метода реконструкции всегда является поиском оптимального соотношения между временем и точностью реконструкции при заданных характеристиках томографической установки и доступных вычислительных ресурсах. Одним из вариантов уменьшения времени получения воксельного объема является предложенная недавно технология томографии под контролем реконструкции или, так называемая, мониторинговая реконструкция под управлением искусственного интеллекта, которая в режиме реального времени оценивает качество результата и оптимизирует общее время за счет своевременного останова [102].

Поскольку рентгеновский томограф - это аппаратно-программный комплекс, с ростом разрешения возрастают требования к программной части. Это связано с тем, что программное обеспечение должно парировать ошибки позиционирования, вибрационные эффекты, которые либо принципиально неустранимы, либо требуют применения узкоспециализированных высокоточных механических и сенсорных узлов. Это увеличивает времена контроля методами рентгеновской томографии, и понижает общую доступность томографического оборудования. Нестабильность характеристик источника рентгеновского излучения в ходе томографического сканирования может приводить к пересветам или затенениям измеренных проекций. Эти скачки яркости приводят к ошибкам реконструкции в виде появления выделенных направлений и не соответствующих реальной физической структуре показателей ослабления в объеме. Ячейки детектора характеризуются нелинейным откликом, что приводит к появлению на реконструкции кольцевых артефактов, которые проявляются в виде системы характерных концентрических перепадов коэффициента ослабления [182]. Наличие сильнопоглощающих (металлических)

областей в сканируемом объеме приводит к появлению ярких и темных полос на реконструкции. При дрожании или смещении объекта в процессе регистрации проекций наблюдается двоение объекта и другие искажения на реконструкции. Если реконструирующее ПО не учитывает отклонение спектра реального источника рентгеновского излучения от используемого в линейной модели монохроматического, то на реконструированном изображении появляются характерные искажения, которые проявляются в виде нелинейного искажения коэффициента ослабления рентгеновского излучения материалом объекта, что хорошо заметно в однородных областях объекта. Искажения таких типов бывают выражены в разной степени и могут служить причиной существенного снижения качества работы автоматических методов обработки и анализа реконструированных данных.

Разработанное на основе методов, предложенных в диссертационном исследовании, программное обеспечение STE [46] может служить платформой для целевой разработки томографических комплексов, предназначенных для контроля морфологической структуры микроэлектронных компонент, локального контроля 'систем в корпусе', инспекции готовых изделий. На рис. 5.70 представлен интерфейс STE.



Рисунок 5.70 — Интерфейс программного обеспечения для томографической реконструкции STE.

На рисунке 5.71 представлено 3D цифровое изображение изделия, построенное с применением предложенных в работе методов реконструкции. Как инструмент дефектоскопии метод томографии позволяет проводить виртуальный послойный контроль внутренней структуры компонент. На рисунке 5.72

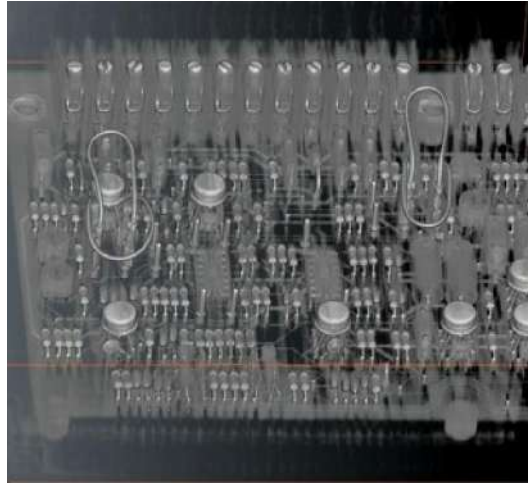


Рисунок 5.71 — 3D цифровое изображение объекта, восстановленное с использованием программного обеспечения STE.

представлены два виртуальных сечения данного изделия в плоскостях XOY и XOZ.



Рисунок 5.72 — Два виртуальных сечения цифрового изображения объекта, представленного на рис. 5.71. Слева - сечение в плоскости XY, справа - сечение в плоскости XZ.

Все результаты выполненного диссертационного исследования вошли в состав двух программных продуктов.

1. НАМА - авторская платформу-независимая исполняемая программа на Фортране для вейвлет-анализа модельных и реальных EXAFS-спектров, выложенная для открытого использования на сайте ESRF

<https://esrf.fr/UsersAndScience/Experiments/CRG/BM20/Software/Wavelets/HAMA>.

2. STE - кросс-платформенный программный продукт, в который помимо прочих включены реализованные алгоритмы, непосредственно разработанные в рамках диссертационного исследования или базирующиеся на предложенных методах и подходах [141]. Данное программное обеспечение может служить платформой для целевой разработки комплексов для локального контроля «систем в корпусе» при отладке производства или инспекции готовых изделий.

В завершение мне хотелось бы выразить благодарность и большую признательность моим коллегам Николаеву Д.П, Асадчикову В.Е., Арлазарову В.Л, Арлазарову В.В. и Зайцеву С.И. за поддержку и все комментарии, полученные мною при обсуждении с ними результатов. Также я благодарю Николаеву С.Д. и Емельянова С.О. за помощь в работе по набору текста, Бузмакова А.В. за предоставленные образцы и обсуждение результатов, а также авторов шаблона *Russian-Phd-LaTeX-Dissertation-Template* за помощь в оформлении диссертации. Я также благодарю всех людей, которые сделали настоящую работу возможной.

Словарь терминов

ART: Algebraic Reconstruction Technique – алгебраический метод реконструкции [107]

ВН: Beam hardening – эффект преимущественного поглощения низкоэнергетических рентгеновских фотонов в объектах, смещающий усредненное значение энергии спектра

EXAFS : Extended X-ray Absorption Fine Structure - дальняя тонкая структура спектра

FBP : Filtered Back Projection – метод свертки и обратного проецирования (интегральный метод послойной реконструкции [108])

FDK: Feldkamp-Davis-Kress –интегральный метод реконструкции [109]

NRMSE: Normalized root mean square error – критерий оценки качества

MOS: Mean opinion score – критерий оценки качества

MPI: Mean projection image – усредненная проекция

MSE: Mean square error – критерий оценки качества

PIXE : Particle Induced X-ray Emission – метод регистрации флуоресценции, индуцированной протонным пучком

PSNR: Peak signal-to-noise ratio – критерий оценки качества

RMSE: Root mean square error – критерий оценки качества

ROI: Region of interest – рассматриваемая локальная область

SART: Simultaneous Algebraic Reconstruction – алгебраический метод реконструкции [111]

SIRT: Simultaneous Iterative Reconstruction Technique – алгебраический метод реконструкции [110]

SSIM: Structural similarity index measure – критерий оценки качества

STE: Smart Tomo Engine – программное обеспечение для моделирования рентгеновских сигналов и выполнения томографической реконструкции

XCIST: X-ray-based Cancer Imaging Simulation Toolkit – программное обеспечение для моделирования рентгеновских сигналов

АПК: Аппаратно-программный комплекс

БЭТ: Метод Брунауэра-Эммета-Теллера – метод определения удельной площади поверхности твердых материалов

КТ: компьютерная томография

ПО: программное обеспечение

FEFF: употребляется в тексте как программа для моделирования EXAFS спектров [\[21\]](#)

Список литературы

1. Recent advances, properties, fabrication and opportunities in two-dimensional materials for their potential sustainable applications [Текст] / A. Hayat [et al.] // Energy Storage Materials. — 2023. — Vol. 59. — P. 102780.
2. Романов, Н. С. Двумерные материалы [Текст] / Н. С. Романов. — Большая российская энциклопедия, 2022.
3. Toward an Understanding of the Reversible Li-CO₂ Batteries over Metal-N₄-Functionalized Graphene Electrocatalysts [Текст] / Y. Liu [et al.] // ACS Nano. — 2022. — Vol. 16, no. 1. — P. 1523—1532.
4. Cobalt in Nitrogen-Doped Graphene as Single-Atom Catalyst for High-Sulfur Content Lithium-Sulfur Batteries [Текст] / Z. Du [et al.] // Journal of the American Chemical Society. — 2019. — Vol. 141, no. 9. — P. 3977—3985.
5. Boosting Hydrogenation of CO₂ Using Cationic Cu Atomically Dispersed on 2D γ -Al₂O₃ Nanosheets [Текст] / P. Chen [и др.] // Angewandte Chemie. — 2025. — T. 137, № 25.
6. Applications of X-ray fluorescence microscopy with synchrotron radiation: From biology to materials science [Текст] / S. Sala [и др.] // Radiation Physics and Chemistry. — 2025. — T. 229.
7. Ordered Transfer from 3D-Oriented MOF Superstructures to Polymeric Films: Microfabrication, Enhanced Chemical Stability, and Anisotropic Fluorescent Patterns [Текст] / L. Brandner [и др.] // Advanced Materials. — 2024. — T. 36, № 46.
8. Elemental analysis of NIST SRM air particulate on filter media using four different types of PIXE [Текст] / K. Saitoh [и др.] // International Journal of PIXE. — 2024. — T. 32, № 1. — C. 15—22.
9. *Malmqvist, K.* Comparison between PIXE and XRF for applications in ART and archaeology [Текст] / K. Malmqvist // Nuclear Instruments in Physics Research. — 1986. — T. 14. — C. 86—92.

10. Analytical Techniques for Elemental Analysis: LIBS, LA-TOF-MS, EDX, PIXE, and XRF: A Review [Текст] / М. Baig [и др.] // Proceedings of the Pakistan Academy of Sciences: A. Physical and Computational Sciences. — 2024. — Т. 61, № 2. — С. 015007.
11. Development of the Nanobeam X-ray Experiments instrument at PAL-XFEL [Текст] / H. Kim J. and Hyun [et al.] // Journal of Synchrotron Radiation. — 2025. — Vol. 32. — P. 466—473.
12. *Goyal, D.* X-Ray Tomography for Electronic Packages [Текст] / D. Goyal // ISTFA 2000. — 10.2000. — С. 49—54.
13. X-Ray Tomography for Electronic Packages [Текст] / S. Wang [и др.] // Proceedings Volume 5677 Testing, Reliability, and Application of Micro- and Nano-Material Systems III. — 2005.
14. *Intel, D.* X-Ray Tomography for Electronic Packages [Текст] / D. Intel, D. Goyal // Proceedings of Reliability Physics Symposium (IRPS). — 2010. — С. 252—258.
15. From PCB to BEOL: 3D X-Ray Microscopy for Advanced Semiconductor Packaging [Текст] / C. Hartfield [и др.] // 2018 IEEE International Symposium on the Physical and Failure Analysis of Integrated Circuits (IPFA). — 2018. — С. 1—7.
16. *Rehr, J.* Theoretical approaches to x-ray absorption fine structure [Текст] / J. Rehr, R. Albers // Reviews of Modern Physics. — 2020. — Т. 72, № 3.
17. *Куис, Д.* Рентгеновская и фотоэлектронная спектроскопии [Текст] / Д. Куис, П. Витязь, Н. Свидинович. — Вышэйшая школа, 2016. — URL: https://ozlib.com/818843/tehnika/rentgenovskaya_fotoelektronnaya_spektroskopii.
18. EXAFS-спектроскопия – новый метод структурных исследований [Текст] / И. Боровский [и др.] // Успехи физических наук. — 1986. — Т. 149, № 2.
19. *Sayers, D. E.* New Technique for Investigating Noncrystalline Structures: Fourier Analysis of the Extended X-Ray—Absorption Fine Structure [Текст] / D. E. Sayers, E. A. Stern, F. W. Lytle // Physical Review Letters. — 1971. — Vol. 27, no. 18. — P. 1204—1207.

20. *Teo, B. K.* EXAFS: Basic Principles and Data Analysis [Текст] / B. K. Teo. — Heidelberg : Springer-Verlag, 1986.
21. Real-space multiple-scattering calculation and interpretation of x-ray-absorption near-edge structure [Текст] / A. L. Ankudinov [et al.] // Physical Review B. — 1984. — Vol. 58, no. 1. — P. 7565—7576.
22. *Шарков, М.* Новый метод обработки данных спектроскопии EXAFS и его применение [Текст] / М. Шарков, К. Погребницкий, М. Бойко // Журнал технической физики. — 2011. — Т. 81, № 9.
23. *Funke, H.* Wavelet analysis of extended x-ray absorption fine structure data [Текст] / H. Funke, A. C. Scheinost, M. Chukalina // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. — 2005. — Vol. 71, no. 9. — P. 094110.
24. *Funke, H.* A new FEFF-based wavelet for EXAFS data analysis [Текст] / H. Funke, M. Chukalina, A. C. Scheinost // Journal of Synchrotron Radiation. — 2007. — Vol. 14, no. 5. — P. 426—432.
25. *Ishii, K.* PIXE and Its Applications to Elemental Analysis [Текст] / K. Ishii // Quantum Beam Science. — 2019. — Vol. 3, no. 2. — P. 1—12.
26. *Gonnah R. and Parker, J.* Synchrotron X-ray nanoprobe and correlative electron microscopy reveal the role of surface chemistry of self-assembling peptides in calcium phosphate nucleation [Текст] / J. Gonnah R. and Parker, R. Davies, A.-J. M. // Faraday Discussions. — 2025.
27. Nanoscale imaging by cylindrical microstructure-assisted microscopy [Текст] / T. Sano [et al.] // Japanese Journal of Applied Physics. — 2025. — Vol. 64, 03SP44.
28. Use of micro-PIXE for elemental characterization and iron uptake evaluation in zebrafish larvae exposed to iron oxide nanoparticles [Текст] / M. Caloni [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2019. — No. 477. — P. 1—6.
29. *Grime, G.* The new external beam facility of the Oxford scanning proton microprobe [Текст] / G. Grime, M. Abraham, M. Marsh // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. — 2001. — Vol. 181. — P. 66—70.

30. *Chukalina, M. V.* Mathematical reconstruction of sample microstructures obtained from PIXE elemental maps [Текст] / M. V. Chukalina, U. Wätjen // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2001. — Vol. 181, no. 1. — P. 249—253.
31. Quantitative PIXE microanalysis of thick specimens [Текст] / J. Campbell [и др.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. — 1993. — Т. 77. — С. 95—109.
32. *Bagatolli, L.* Fluorescence Spectroscopy: Basic Foundations and Methods [Текст] / L. Bagatolli ; ed. by A. Müllertz, Y. Perrie, T. Rades. — New York, NY : Springer US, 2016.
33. *Williams, E. T.* PIXE analysis with external beams: Systems and applications [Текст] / E. T. Williams // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1984. — Vol. 3, no. 1. — P. 211—219.
34. *Ziegler, J. F.* The Stopping and Range of Ions in Matter [Текст] / J. F. Ziegler, J. P. Biersack ; ed. by D. A. Bromley. — Boston, MA : Springer US, 1985. — P. 93—129.
35. *Лидер, В.* Рентгеновская микроскопия [Текст] / В. Лидер // Успехи физических наук. — 2017. — Т. 187, № 2. — С. 201—219.
36. Confinement of methylammonium lead bromide nanocrystals in metal-organic frameworks as a stable scintillator for high-performance X-ray imaging [Текст] / H. Wu [et al.] // Chemical Engineering Journal. — 2024. — Vol. 491. — P. 152098.
37. A review, bibliography and tabulation of K, L and higher atomic shell X-ray fluorescence yields [Текст] / J. Hubbell [et al.] // Journal of Physical and Chemical Reference Data. — 1994. — Vol. 23, no. 2. — P. 339—364.
38. X-ray fluorescence microtomography: experiment and reconstruction [Текст] / A. S. Simionovici [et al.] // Developments in X-Ray Tomography II. Vol. 3772. — 1999. — P. 304—310.
39. X-ray data booklet [Текст] / A. Thompson [et al.] ; ed. by A. Thomson. — Lawrence Berkley National Laboratory University of California CA 94720, 2009.

40. *Kak, A. C.* Principles of computerized tomographic imaging [Текст] / A. C. Kak, M. Slaney. — New York : IEEE Press, 1988.
41. Efficient and effective regularised ART for computed tomography [Текст] / A. Buzmakov [et al.] // 2011 Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. — 2011. — P. 6200—6203.
42. *Helgason, S.* The Radon Transform [Текст] / S. Helgason. — Springer Nature Link, 1999.
43. *Boisseau, P.* Fluorescence tomography using synchrotron radiation at the NSLS [Текст] / P. Boisseau, L. Grodzins // Hyperfine Interact. — 1987. — Т. 33. — С. 283—292.
44. *Ингачева, А.* Исследование свойств полиномиальной корректирующей функции полихроматических лучевых интегралов в задаче компьютерной томографии [Текст] / А. Ингачева, М. Чукалина, Д. Николаев // Труды института системного анализа Российской академии наук (ИСА РАН). — 2021. — Т. 71, № 1. — С. 92—100.
45. CT metal artifacts simulation under x-ray total absorption [Текст] / M. Shutov [et al.] // Proc. SPIE. Sixteenth International Conference on Machine Vision (ICMV 2023). Vol. 13072. — 2024. — 130720Z.
46. Smart Tomo Engine novel tomography reconstruction tool [Текст] / M. Shutov [et al.] // Synchrotron and free electron laser radiation: generation and application (SFR-2022). — 2022. — P. 35—36.
47. XCIST-an open access x-ray/CT simulation toolkit [Текст] / M. Wu [et al.] // Physics in Medicine and Biology. — 2022. — Vol. 67. — P. 194002.
48. CatSim: a new computer assisted tomography simulation environment [Текст] / B. De Man [et al.] // Medical Imaging 2007: Physics of Medical Imaging. Vol. 6510. — SPIE, 2007. — 65102G.
49. High-performance 4-nm-resolution X-ray tomography using burst ptychography [Текст] / T. Aidukas [и др.] // Nature. — 2024. — Т. 632, № 8023. — С. 81—88.
50. Nanotomography in the chemical, biological and materials sciences [Текст] / P. Midgley [et al.] // Chemical Society Reviews. — 2007. — No. 36. — P. 1477—1494.

51. A High-Flux Compact X-ray Free-Electron Laser for Next-Generation Chip Metrology Needs [Текст] / J. B. Rosenzweig [и др.] // Instruments. — 2024. — Т. 8, № 1.
52. Research Status and Progress on Non-Destructive Testing Methods for Defect Inspection of Micro-Electronic Packaging [Текст] / Y. Chen [et al.] // Journal of Electronic Packaging. — 2024. — Vol. 146, no. 3. — P. 030801.
53. Exploring the process-microstructure-thermal properties relationship of resin-reinforced Ag sintering material for high-power applications via 3D FIB-SEM nanotomography [Текст] / X. Hu [и др.] // Materials & Design. — 2024. — Т. 244. — С. 113185.
54. Adaptive multi-beam X-ray ptychography [Текст] / M. Astrand [и др.] // Opt. Express. — 2024. — Т. 32, № 13. — С. 22771—22780.
55. Monitored tomographic reconstruction - An advanced tool to study the 3D morphology of nanomaterials [Текст] / K. Bulatov [и др.] // Nanomaterials. — 2021. — Т. 11, № 10.
56. Dual-energy crystal-analyzer scheme for spectral tomography [Текст] / D. Zolotov [et al.] // Journal of Applied Crystallography. — 2020. — Vol. 53, no. 3. — P. 781—788.
57. *Huang, X. R. LauePt*, a graphical-user-interface program for simulating and analyzing white-beam X-ray diffraction Laue patterns [Текст] / X. R. Huang // Journal of Applied Crystallography. — 2010. — Vol. 43, no. 4. — P. 926—928.
58. *Efimov, A. I.* An algorithm for multistage projective transformation adjustment for image superimposition [Текст] / A. I. Efimov, A. I. Novikov // Computer Optics. — 2016. — Vol. 40, no. 2. — P. 258—265.
59. *Shemiakina, J.* The usage of points and lines for the calculation of projective transformation by two images of one plane object [Текст] / J. Shemiakina // Информационные технологии и Вычислительные системы. — 2017. — № 3. — С. 79—91.
60. Fast projective image rectification for planar objects with Manhattan structure [Текст] / J. Shemiakina [et al.] // Twelfth International Conference on Machine Vision (ICMV 2019). Vol. 11433. — SPIE, 2020. — 114331N.

61. Document localization algorithms based on feature points and straight lines [Текст] / N. Skoryukina [et al.] // Tenth International Conference on Machine Vision (ICMV 2017). Vol. 10696. — SPIE, 2018. — 106961H.
62. *Симонов, Е. Н.* Разработка вычислительного алгоритма реконструкции объемных изображений в рентгеновской компьютерной томографии с применением голографических методов [Текст] / Е. Н. Симонов, Д. В. Аврамов // Вестник ЮУрГУ. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. — 2018. — Т. 18, № 4. — С. 5—15.
63. Propagation-based x-ray phase-contrast tomography of mastectomy samples using synchrotron radiation [Текст] / Т. Е. Gureyev [et al.] // Medical Physics. — 2019. — Vol. 46, no. 12. — P. 5478—5487.
64. A partial-dithering strategy for edge-illumination x-ray phase-contrast tomography enabled by a joint reconstruction method [Текст] / Y. Chen [et al.] // Physics in Medicine & Biology. — 2020. — Vol. 65, no. 10. — P. 105007.
65. *Чуи, К.* Введение в вэйвлеты [Текст] / К. Чуи. — Мир, Москва, 2000.
66. *Чукалина, М. В.* Подход к решению задачи анализа EXAFS-спектров на базе использования всплеск-преобразования [Текст] / М. В. Чукалина, Х. Функе // Известия Российской академии наук. Серия физическая. — 2005. — Т. 69, № 2. — С. 233—236.
67. *Chui, С.* введение в вэйвлеты [Текст] / С. Chui. — м., Мир, 2001.
68. *Chukalina, M. V.* Wavelet analysis and its application in tunneling and x-ray spectroscopy [Текст] / M. V. Chukalina, Y. V. Dubrovskii, H. Funke // Low Temperature Physics. — 2004. — Vol. 30, no. 11. — P. 930—936.
69. Topological Phase Buried in a Chalcogenide Superlattice Monitored by Helicity-Dependent Kerr Measurement [Текст] / R. Mondal [и др.] // ACS Applied Materials and Interfaces. — 2018. — Т. 10, № 31. — С. 26781—26786.
70. Novel nanocomposite-superlattices for low energy and high stability nanoscale phase-change memory [Текст] / X. Wu [et al.] // Nature Communications. — 2024. — Vol. 15, no. 13.
71. Revisiting the Local Structure in Ge-Sb-Te based Chalcogenide Superlattices [Текст] / B. Casarin [et al.] // Scientific Reports. — 2016. — Vol. 6, no. 22353. — P. 1—8.

72. Interface formation of two- and three-dimensionally bonded materials in the case of GeTe-Sb₂Te₃ superlattices [Текст] / J. Momand [и др.] // *Nanoscale*. — 2015. — Т. 7. — С. 19136—19143.
73. Engineering the Topological Surface States in the (Sb₂)_m-Sb₂Te₃ Superlattice Series [Текст] / J. Johannsen [и др.] // *Phys. Rev. B*. — 2015. — Т. 91, вып. 20. — С. 201101.
74. *Leszczynski, M.* The properties of (Pb, Ge)Te single crystals grown from vapour phase [Текст] / M. Leszczynski, A. Szczerbakow, G. Karczewski // *Journal of Crystal Growth*. — 1994. — Т. 135, № 3. — С. 565—570.
75. *Da Silva, J.* Insights into the structure of the stable and metastable (GeTe)_m(Sb₂Te₃)_n compounds [Текст] / J. Da Silva, A. Walsh, H. Lee // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Т. 78, вып. 22. — С. 224111.
76. *Ravel, B.* Data analysis for X-ray absorption spectroscopy using IFEFFIT [Текст] / B. Ravel, M. Newville // *Journal of synchrotron radiation*. — 2005. — Vol. 12. — P. 537—541.
77. Ferroelectric Order Control of the Dirac-Semimetal Phase in GeTe-Sb₂Te₃ Superlattices [Текст] / J. Tominaga [и др.] // *Advanced Materials Interfaces*. — 2014. — Т. 1, № 1300027. — С. 1—7.
78. *Chukalina, M.* Data vizualization: From X-ray measurements to the atomic structure via wavelet [Текст] / M. Chukalina // *20th European Conference on Modelling and Simulation: Modelling Methodologies and Simulation Key Technologies in Academia and Industry, ECMS 2006*. — 2006. — P. 430—433.
79. *Brindley, G.* A crystal-chemical study of Mg, Al and Ni, N hydroxy-perchlorates and hydroxycarbonates [Текст] / G. Brindley, S. Kikkawa // *American Mineralogist*. — 1979. — Т. 64, № 7/8. — С. 836—843.
80. Anion and Cation Order in Iodide-Bearing Mg/Zn–Al Layered Double Hydroxides [Текст] / L. Aimoz [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry C*. — 2012. — Vol. 116, no. 9. — P. 5460—5475.
81. Low divergent MeV-class proton beam with micrometer source size driven by a few-cycle laser pulse [Текст] / P. Singh [et al.] // *Scientific Reports*. — 2022. — Vol. 12. — P. 8100.

82. Optimization and testing of microfocus pulsed X-ray source [Текст] / J. Bai [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2025. — Vol. 1075. — P. 170394.
83. *Klimova, N.* Diffraction Losses in a Stack of Diamond X-Ray Lenses [Текст] / N. Klimova, A. Snigirev // Photonics. — 2024. — Vol. 11, no. 12. — P. 1097.
84. *Чукалина, М.* Восстановление формы рентгеновского зонда по рентгенофлуоресцентным картам [Текст] / М. Чукалина, Д. Николаев // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. — 2011. — Т. 77, № 8. — С. 30—33.
85. *Waetjen, U.* A Novel Micro-Structured Reference Material for Ion and Microbeam Analysis [Текст] / U. Waetjen, I. Barsony, C. Duecsoe // Mikrochimica Acta. — 2000. — Vol. 132. — P. 521—525.
86. The Oxford submicron nuclear microscopy facility [Текст] / W. Grime [и др.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B-beam Interactions With Materials and Atoms. — 1991. — Т. 53. — С. 54—62.
87. A novel micro-structured reference material for microbeam analysis [Текст] / U. Wätjen [и др.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B-beam Interactions With Materials and Atoms. — 2000. — Т. 161. — С. 359—365.
88. Nuclear microprobe analysis and imaging: Current state of the art performances [Текст] / F. Watt [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 1998. — Vol. 136, no.138. — P. 313—317.
89. X-ray Si-based Integrated Lens System for Wide Range of Hard Synchrotron Radiation [Текст] / I. Snigireva [et al.] // AIP Conference Proceedings, Synchrotron Radiation Instrumentation. Vol. 705. — 2004. — P. 708—711.
90. Two-dimensional X-ray focusing by grazing incidence phase Fresnel zone plates in Kirkpatrick-Baez scheme [Текст] / I. Schelokov [et al.] // Optics Communications. — 1998. — Vol. 155. — P. 115—124.
91. Two-Dimensional Hard X-Ray Beam Compression by Combined Focusing and Waveguide Optics [Текст] / A. Jarre [et al.] // Physical Review Letters. — 2005. — Vol. 94. — P. 074801-1—074801-4.

92. Focusing high-energy x rays by compound refractive lenses [Текст] / A. Snigirev [et al.] // Applied Optics. — 1998. — Vol. 37, no. 4. — P. 653—662.
93. Two-dimensional X-ray focusing by off-axis grazing incidence phase Fresnel zone plate on the laboratory X-ray source [Текст] / M. Grigoriev [et al.] // Optics Communications. — 2017. — Vol. 385. — P. 15—18.
94. Energy dependence of x-ray beam size produced by polycapillary x-ray optics [Текст] / A. Das [et al.] // X-ray Spectrometry. — 2025. — Vol. 54, no. 2.
95. Ultrahigh-Resolution X-ray Tomography [Текст] / W. S. Haddad [et al.] // Science. — 1994. — Vol. 266, no. 5188. — P. 1213—1215.
96. Nano X-ray Computed Tomography System [Текст] / K. G. Kim [et al.] // World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering 2006. — 2007. — P. 1417—1420.
97. Calibration of High-Resolution X-Ray Tomography With Atomic Force Microscopy [Текст] / A. R. Kalukin [et al.] // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. — 2000. — Vol. 105, no. 6. — P. 867—874.
98. *Chevrier, D.* Nanobeam-scanning X-ray Fluorescence Microscopy Reveals the Elemental Composition of Dense Intracellular Bodies in Biomineralizing Cocolithophores [Текст] / D. Chevrier, S. Gautam, A. Scheffel // Faraday Discuss. — 2025.
99. *Чукалина, М.* Формирование и обработка изображений лабораторного сканирующего флуоресцентного микроскопа высокого разрешения [Текст] / М. Чукалина, И. Щелоков, Д. Николаев // Материалы конференций IEEE AIS 06 и CAD-2006. Т. 2. — 2006. — С. 406—411.
100. X-ray computed tomography [Текст] / P. J. Withers [et al.] // Nature Reviews Methods Primers. — 2021. — Vol. 1, no. 1. — P. 18.
101. X-ray tomography: the way from layer-by-layer radiography to computed tomography [Текст] / V. L. Arlazarov [et al.] // Computer Optics. — 2021. — Vol. 45, no. 6. — P. 897—906.
102. Monitored Reconstruction: Computed Tomography as an Anytime Algorithm [Текст] / K. Bulatov [et al.] // IEEE Access. — 2020. — Vol. 8. — P. 110759—110774.

103. *Agulleiro, J. I.* Fast tomographic reconstruction on multicore computers [Текст] / J. I. Agulleiro, J. J. Fernandez // Bioinformatics. — 2010. — Т. 27, № 4. — С. 582—583.
104. Novel algebraic reconstruction technique for faster and finer CT reconstruction [Текст] / S. Saha [et al.] // Fifth International Conference on Machine Vision (ICMV 2012): Computer Vision, Image Analysis and Processing. Vol. 8783. — 2013. — P. 878307.
105. *Inoue, H.* Efficient tomographic reconstruction for commodity processors with limited memory bandwidth [Текст] / H. Inoue // 2016 IEEE 13th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI). — 2016. — P. 747—750.
106. Influence of noise-reduction techniques in sparse-data sample rotation tomographic imaging [Текст] / V. Balasubramani [et al.] // Applied Optics. — 2021. — Vol. 60, no. 10. — B81—B87.
107. *Gordon, R.* A tutorial on art (algebraic reconstruction techniques) [Текст] / R. Gordon // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 1974. — Vol. 21, no. 3. — P. 78—93.
108. *Shepp, L. A.* The Fourier reconstruction of a head section [Текст] / L. A. Shepp, B. F. Logan // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 1974. — Vol. 21, no. 3. — P. 21—43.
109. *Feldkamp, L. A.* Practical cone-beam algorithm [Текст] / L. A. Feldkamp, L. C. Davis, J. W. Kress // Journal of the Optical Society of America A. — 1984. — Vol. 1, no. 6. — P. 612—619.
110. The use of simultaneous iterative reconstruction technique for electrical capacitance tomography [Текст] / S. Bangliang [et al.] // Chemical Engineering Journal. — 2000. — Vol. 77, no. 1. — P. 37—41.
111. *Andersen, A. H.* Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique (SART): A Superior Implementation of the Art Algorithm [Текст] / A. H. Andersen, A. C. Kak // Ultrasonic Imaging. — 1984. — Vol. 6, no. 1. — P. 81—94.
112. *Cormack, A.* Representation of a function by its line integrals with some radiological applications [Текст] / A. Cormack // Journal of Applied Physics. — 1964. — Т. 10, № 35. — С. 2908—2912.

113. *Hogan, J. P.* Fluorescent computer tomography: a model for correction of X-ray absorption [Текст] / J. P. Hogan, R. A. Gonsalves, A. S. Krieger // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 1991. — Vol. 38, no. 6. — P. 1721—1727.
114. Internal elemental microanalysis combining x-ray fluorescence, Compton and transmission tomography [Текст] / B. Golosio [et al.] // Journal of Applied Physics. — 2003. — Vol. 94, no. 1. — P. 145—156.
115. *Brown, D.* Absorption and emission cross-sections, Stark energy levels, and temperature dependent gain of Yb:QX phosphate glass [Текст] / D. Brown, N. Tomasello, C. Hancock // Optics Express. — 2021. — Vol. 29, no. 21. — P. 33818—33835.
116. Конфокальный коллиматор для радионуклидной диагностики и рентгенофлуоресцентного анализа [Текст] / С. Зайцев [и др.] // Приборы и техника эксперимента. — 2020. — № 3. — С. 147—151.
117. *Вацюк, А.* Алгебраические методы реконструкции в задачах томографии [Текст] / А. Вацюк, А. Ингачева, М. Чукалина // Сенсорные системы. — 2018. — Т. 32, № 1. — С. 83—91.
118. *Chukalina, M. V.* Signal formation, simulation and inverse problem in scanning fluorescent X-Ray microscopy using focused beams for analysis of the surface relief [Текст] / M. V. Chukalina, N. G. Ushakov, S. I. Zaitsev // Scanning Microscopy. — 1997. — Vol. 11, no. 2. — P. 311—318.
119. Monte Carlo simulation of X-ray fluorescence spectra: Part 4. Photon scattering at high X-ray energies [Текст] / L. Vincze [et al.] // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy. — 1999. — Vol. 54, no. 12. — P. 1711—1722.
120. Monte Carlo simulation of x-ray fluorescence and scattering tomography experiments [Текст] / L. Vincze [et al.] // Developments in X-Ray Tomography II. Vol. 3772. — SPIE, 1999. — P. 328—339.
121. *Hua, Y.* Studies on pure element intensities, mass absorption coefficients and parameters n and n_0 for energy-dispersive X-ray fluorescence analysis [Текст] / Y. Hua // Journal of Trace and Microprobe Techniques. — 2001. — Vol. 19, no. 1. — P. 35—44.

122. X-ray microtome by fluorescence tomography [Текст] / A. Simionovici [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. — 2001. — Vol. 467/468. — P. 889—892.
123. Imaging by parabolic refractive lenses in the hard X-ray range [Текст] / B. Lengeler [et al.] // Journal of Synchrotron Radiation. — 1999. — Vol. 6. — P. 1153—1167.
124. X-ray fluorescence micro-tomography of an individual fluid inclusion using a third generation synchrotron light source [Текст] / B. Ménez [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2001. — Vol. 181, no. 1. — P. 749—754.
125. New results in x-ray computed fluorescence tomography [Текст] / A. S. Simionovici [et al.] // Developments in X-Ray Tomography III. Vol. 4503. — 2002. — P. 222—229.
126. Bacteria in the Tatahouine meteorite: nanometric-scale life in rocks [Текст] / P. Gillet [et al.] // Earth and Planetary Science Letters. — 2000. — Vol. 175, no. 3. — P. 161—167.
127. Analysis of X-ray spectra by iterative least squares (AXIL): New developments [Текст] / B. Vekemans [et al.] // X-ray Spectrometry. — 1994. — Vol. 23, no. 6. — P. 278—285.
128. A Hardware and Software System for Tomographic Research: Reconstruction via Regularization [Текст] / M. V. Chukalina [et al.] // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. — 2019. — No. 2. — P. 150—154.
129. Алгебраический метод реконструкции в решении томографических задач [Текст] / М. Чукалина [и др.] // Рентгеновская оптика – 2012. — 2012. — С. 132—134.
130. Рентгеновская микротомография с использованием лабораторного источника: техника измерений и сравнение алгоритмов реконструкции [Текст] / М. В. Чукалина [и др.] // Измерительная техника. — 2008. — № 2. — С. 19—24.
131. Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E = 50 - 30,000$ eV, $Z = 1 - 92$ [Текст] / Henke [et al.] // Atomic Data and Nuclear Data Tables. — 1992. — Vol. 54. — P. 181—342.

132. *Chukalina, M.* ART in X-ray tomo: image noise reduction [Текст] / M. Chukalina, D. Nikolaev, A. Simionovici // Book of Proceedings. 21th European Conference on Modelling and Simulation. — 2007. — P. 309—312.
133. *Gilbert, P.* Iterative methods for the three-dimensional reconstruction of an object from projections [Текст] / P. Gilbert // Journal of Theoretical Biology. — 1972. — Vol. 36, no. 1. — P. 105—117.
134. Laboratory Computed X-Ray Tomography - A Nondestructive Technique for 3D Microstructure Analysis of Materials [Текст] / E. Zschech [et al.] // Practical Metallography. — 2018. — Vol. 55, no. 8. — P. 539—555.
135. Нелинейный алгебраический метод компьютерной томографии при немонохроматическом источнике [Текст] / В. Прун [и др.] // 39-я междисциплинарная школа-конференция Информационные технологии и системы 2015. — 2015. — С. 536.
136. The xraylib library for X-ray-matter interactions. Recent developments [Текст] / T. Schoonjans [et al.] // Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy. — 2011. — Vol. 66, no. 11. — P. 776—784.
137. Алгебраическая реконструкция в условиях недостатка памяти графического процессора в задаче компьютерной томографии [Текст] / М. Чукалина [и др.] // Сенсорные системы. — 2019. — Т. 33, № 2. — С. 166—172.
138. На пути к контролируемой томографической реконструкции, сравнение сходимости алгоритмов на синтетических данных [Текст] / Ж. Солдатова [и др.] // Труды института системного анализа Российской академии наук (ИСА РАН). — 2022. — Т. 72, № 3. — С. 10—18.
139. Fast and flexible X-ray tomography using the ASTRA toolbox [Текст] / V. W. Aarle [et al.] // Optics Express. — 2016. — Vol. 24, no. 22. — P. 25129—25147.
140. *Наттерер, Ф.* Математические аспекты компьютерной томографии [Текст] / Ф. Наттерер. — Москва : Мир, 1990. — 288 с.
141. Компьютерная томография для решения задач материаловедения: программа для томографической реконструкции STE [Текст] / М. Чукалина [и др.] // Третья Международная Конференция Физика конденсированных состояний ФКС-2023, посвящённая 60-летию ИФТТ РАН. — 2023. — С. 36.

142. Performance evaluation of an 85-cm-bore X-ray computed tomography scanner designed for radiation oncology and comparison with current diagnostic CT scanners [Текст] / J. Garcia-Ramirez [et al.] // International Journal of Radiation Oncology, Biology, Physics. — 2002. — Vol. 52, no. 4. — P. 1202—3.
143. Quality control of CT image using American College of Radiology (ACR) phantom [Текст] / Z. Mansour [et al.] // The Egyptian Journal of Radiology and Nuclear Medicine. — 2016. — Vol. 47, no. 5. — P. 1—7.
144. *Correia, J.* A Novel High Resolution Positron Emission Tomography System for Measurement of Bone Metabolism [Текст] / J. Correia // DTIC ADA420885. — 2003.
145. syris a flexible and efficient framework for X-ray imaging experiments simulation [Текст] / T. Farago [et al.] // Journal of Synchrotron Radiation. — 2017. — Vol. 1, no. 24. — P. 1283—1295.
146. Hough Transform: Underestimated Tool In The Computer Vision Field [Текст] / L. Nikolaev [et al.] // Proceedings of 22th European Conference on Modelling and Simulation. — 2008. — P. 238—243.
147. Вычислительно эффективный вариант алгебраического метода компьютерной томографии [Текст] / В. Е. Прун [и др.] // Автоматика и телемеханика. — 2013. — С. 86—97.
148. Generation of fast reconstruction algorithms for computed tomography with arbitrary geometry set-up [Текст] / P. Kulagin [et al.] // Synchrotron and Free electron laser Radiation: generation and application. — 2022. — P. 52—53.
149. *Otsu, N.* A Threshold Selection Method from Gray-Level Histograms [Текст] / N. Otsu // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. — 1979. — Vol. 9, no. 1. — P. 62—66.
150. *Jagatheeswari, P.* Contrast Stretching Recursively Separated Histogram Equalization for Brightness Preservation and Contrast Enhancement [Текст] / P. Jagatheeswari, S. Kumar, M. Rajaram // International Conference on Advances in Computing, Control, and Telecommunication Technologies. — 2009. — С. 111—115.

151. A conjugate gradient weighted least squares reconstruction method with region of interest correction for cone-beam rotational computed laminography [Текст] / C. Wang [et al.] // NDT and E International. — 2025. — Vol. 103396.
152. *Mueller, K.* Fast and accurate three-dimensional reconstruction from cone-beam projection data using algebraic methods [Текст] / K. Mueller. — The Ohio State University, 1998.
153. *Schwindenhammer, P.* Microelectronics failure analysis using laser ablation of composite materials in system in package [Текст] / P. Schwindenhammer, P. Poirier, P. Descamps // Proceedings of 8th Electronics Packaging Technology Conference. — 2006. — P. 752—759.
154. Effect of ambient on the dynamics of re-deposition in the rear laser ablation of a thin film [Текст] / R. Kumar [и др.] // Optics and Laser Technology. — 2025. — Т. 181. — С. 111954.
155. *Worthington, M.* An introduction to geophysical tomography [Текст] / M. Worthington // First Breack. — 1984. — Vol. 2, no. 11. — P. 21—43.
156. *Casali, F.* X-ray digital radiography and computed tomography for cultural heritage [Текст] / F. Casali // Archeometriai Muhely. — 2006. — Vol. 1. — P. 24—32.
157. An X-ray tomography facility for IC industry at STMicroelectronics Grenoble [Текст] / S. Bord [et al.] // Microelectronic engineering. — 2002. — Vol. 1, no. 61. — P. 1069—75.
158. Nano-Tomography: Tomography to Understand the Full Structure of Nanowire [Текст] / D. Bell [et al.] // Microscopy and Microanalysis. — 2004. — Vol. 10. — P. 1202—3.
159. Complexity-Preserving Transposition of Summing Algorithms: A Data Flow Graph Approach [Текст] / D. V. Polevoy [et al.] // Problems of Information Transmission. — 2024. — Vol. 60, no. 4. — P. 344—362.
160. Robust technique for representative volume element identification in noisy microtomography images of porous materials based on pores morphology and their spatial distribution [Текст] / M. Grigoriev [et al.] // Thirteenth International Conference on Machine Vision. Vol. 11605. — 2021. — 116051J.

161. Построение устойчивых признаков детекции и классификации объектов, не обладающих характерными яркостными контрастами [Текст] / С. А. Гладилин [и др.] // Информационные технологии и вычислительные системы. — 2014. — Т. 1. — С. 53—60.
162. X-ray tomography: how to evaluate the reconstruction quality? [Текст] / М. Chukalina [et al.] // Spectrochimica Acta Part B. — 2004. — Vol. 59. — P. 1755—1758.
163. Рентгеновская томография: факторы, влияющие на результат реконструкции [Текст] / М. Чукалина [и др.] // Сборник докладов Симпозиума Нанофизика и наноэлектроника. — 2005. — С. 294—295.
164. Бузмаков, А. Разработка программного обеспечения для моделирования работы лабораторного рентгеновского микротомографа. [Текст] / А. Бузмаков, М. Чукалина, Я. Шабельникова // Труды конференций AIS'07, CAD-2007. Т. 3. — 2007. — С. 24—27.
165. Рентгеновская томография как метод дефектоскопии: о проблеме сильно-поглощающих включений [Текст] / М. Гильманов [и др.] // Российский форум Микроэлектроника-2024, 10-я научная конференция ЭКБ и микроэлектронные модули. — 2024. — С. 878—879.
166. Чукалина, М. В. Проблемы полуавтоматического анализа серых томографических изображений: анализ причин и пути решения [Текст] / М. В. Чукалина, В. Арлазаров, Н. Д.П // Медицинская физика (ТКМФ-7) Сборник тезисов VII Троицкой конференции с международным участием. Москва. — 2020. — С. 173—174.
167. Zeng, G. L. On Few-View Tomography and Staircase Artifacts [Текст] / G. L. Zeng // IEEE Transactions on Nuclear Science. — 2015. — Т. 62, № 3. — С. 851—858.
168. Few-View CT reconstruction method based on deep learning [Текст] / J. Zhao [и др.] // 2016 IEEE Nuclear Science Symposium, Medical Imaging Conference and Room-Temperature Semiconductor Detector Workshop (NSS/MIC/RTSD). — 2016. — С. 1—4.
169. Reprojection-Based Numerical Measure of Robustness for CT Reconstruction Neural Network Algorithms [Текст] / A. Smolin [et al.] // Mathematics. — 2022. — Vol. 10, no. 22. — P. 4210—17643.

170. *Hu Z. and. Zheng, H.* Improved total variation minimization method for few-view computed tomography image reconstruction [Текст] / H. Hu Z. and. Zheng // BioMed Eng OnLine. — 2014. — Vol. 13, no. 70.
171. Neural network regularization in the problem of few-view computed tomography [Текст] / A. V. Yamaev [et al.] // Computer Optics. — 2022. — Vol. 46, no. 3. — P. 422—428.
172. Analyzing and Improving the Image Quality of StyleGAN [Текст] / T. Karras [и др.] // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). — 2020.
173. *Bracewell, R.* Image reconstruction in radio astronomy [Текст] / R. Bracewell. — Springer, 1979.
174. Low-dose CT for the detection and classification of metastatic liver lesions: Results of the 2016 Low Dose CT Grand Challenge [Текст] / C. H. McCollough [et al.] // Medical Physics. — 2017. — Vol. 44, no. 10. — e339—e352.
175. *Adler, J.* Learned Primal-Dual Reconstruction [Текст] / J. Adler, O. Okttem // IEEE Transactions on Medical Imaging. — 2018. — Vol. 37, no. 6. — P. 1322—1332.
176. *Wang, Z.* Multiscale structural similarity for image quality assessment [Текст] / Z. Wang, E. P. Simoncelli, A. C. Bovik // The Thirty-Seventh Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers. Т. 2. — 2003. — С. 1398—1402.
177. Томография на разных масштабах как метод неразрушающего рентгеновского контроля в микроэлектронике [Текст] / М. Чукалина [и др.] // Вторая объединённая конференция Электронно-лучевые технологии и рентгеновская оптика в микроэлектронике. КЭЛТ-2023. Черноголовка 13–16 ноября 2023 года). — 2023. — С. 268—269.
178. Stripe and ring artifact removal with combined wavelet — Fourier filtering [Текст] / B. Munch [и др.] // Optics Express. — 2009. — Май. — Т. 17. — С. 8567—8591.
179. *Vo, N.* Preprocessing techniques for removing artifacts in synchrotron-based tomographic images [Текст] / N. Vo, R. Atwood, M. Drakopoulos // Proceedings Volume 11113, Developments in X-Ray Tomography XII. Т. 1111311. — 2019. — С. 1—4.

180. Percentage of ring artifacts correction (PRAC): a quantitative specific evaluation metric for the effect of ring artifacts correction in X-ray CT images [Текст] / Y. Zou [и др.] // Optics Express. — 2025. — Июль. — Т. 33. — С. 33844—33858.
181. Adaptive automated sinogram normalization for ring artifacts suppression in CT [Текст] / D. Kazimirov [et al.] // Optics Express. — 2024. — Vol. 32, no. 10. — P. 17606—17643.
182. Artifacts suppression in biomedical images using a guided filter [Текст] / I. Bukreeva [et al.] // Thirteenth International Conference on Machine Vision. Vol. 11605. — SPIE, 2021. — 116050S.
183. *Шутов, М.* Методы моделирования кольцевых артефактов в компьютерной томографии [Текст] / М. Шутов, М. Гильманов, А. Игначев // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. — 2022. — С. 113—114.
184. Ring artifact suppression in X-ray computed tomography using a simple, pixel-wise response correction [Текст] / L. Croton [и др.] // Optics Express. — 2019. — Май. — Т. 27. — С. 14231—14245.
185. Ring-artifacts removal for photon-counting CT [Текст] / К. An [и др.] // Optics Express. — 2020. — Т. 28, № 17.
186. Fully automatic online geometric calibration for non-circular cone-beam CT orbits using fiducials with unknown placement [Текст] / Y. Ma [et al.] // Medical Physics. — 2024. — Vol. 51. — P. 3245—3264.
187. *Frank, J.* Fiducial Marker and Hybrid Alignment Methods for Single- and Double-axis Tomography [Текст] / J. Frank, D. Mastronarde. — Springer Science, 2006.
188. *Frank, J.* Alignment by Cross-Correlation [Текст] / J. Frank, B. McEwen ; ed. by J. Frank. — Springer, 1992.
189. *Wong, A.* Robust Multimodal Registration Using Local Phase-Coherence Representations [Текст] / A. Wong, J. Orchard // Journal of Signal Processing Systems. — 2009. — Vol. 54. — P. 89—100.
190. Phase tomography from x-ray coherent diffractive imaging projections [Текст] / M. Guizar-Sicairos [et al.] // Optics Express. — 2011. — Vol. 19. — P. 21345—21357.

191. Joint iterative reconstruction and 3D rigid alignment for X-ray tomography [Текст] / K. Pande [et al.] // Optics Express. — 2022. — Vol. 30, no. 6. — P. 8898—8916.
192. *Graetz, J.* Auto-calibration of cone beam geometries from arbitrary rotating markers using a vector geometry formulation of projection matrices [Текст] / J. Graetz // Physics in Medicine and Biology. — 2021. — Vol. 66, no. 7. — P. 075013.
193. Mean projection image application to the automatic rotation axis alignment in cone-beam CT [Текст] / D. Kazimirov [et al.] // Proc. SPIE. Fifteenth International Conference on Machine Vision (ICMV 2022). Vol. 12701. — 2023. — 127011G.
194. Robust Automatic Rotation Axis Alignment Mean Projection Image Method in Cone-Beam and Parallel-Beam CT [Текст] / D. Kazimirov [et al.] // Proceedings of Sixteenth International Conference on Machine Vision (ICMV 2023). Vol. 13072. — 2024. — P. 1307212.
195. *Vacek, E.* Fast and noise-tolerant determination of the center of rotation in tomography [Текст] / E. Vacek, C. Jacobsen // Journal of Synchrotron Radiation. — 2021. — T. 29. — C. 488—495.
196. *Stern, E. A.* Extended x-ray-absorption fine-structure technique. III. Determination of physical parameters [Текст] / E. A. Stern, D. E. Sayers, F. W. Lytle // Physical Review B: Solid State. — 1975. — Vol. 11, no. 12. — P. 4836—4846.
197. *Kalender, W. A.* Reduction of CT artifacts caused by metallic implants. [Текст] / W. A. Kalender, R. Hebel, J. Ebersberger // Radiology. — 1987. — Vol. 164, no. 2. — P. 576—577.
198. *Luzhbin, D.* Model Image-Based Metal Artifact Reduction for Computed Tomography [Текст] / D. Luzhbin, J. Wu // Journal of Digital Imaging. — 2020. — Vol. 33, no. 1. — P. 71—82.
199. Virtual monoenergetic images and post-processing algorithms effectively reduce CT artifacts from intracranial aneurysm treatment [Текст] / D. Zopf [и др.] // Scientific Reports. — 2020. — T. 10, № 1. — C. 6629.

200. CT metal artefact reduction for hip and shoulder implants using novel algorithms and machine learning: A systematic review with pairwise and network meta-analyses [Текст] / K. Amadita [et al.] // Radiography. — 2025. — Vol. 31, no. 1. — P. 36—52.
201. Сравнение алгоритмов выделения области интереса на компьютерных томограммах легких [Текст] / Т. А. Пашина [и др.] // Компьютерная оптика. — 2020. — Т. 44, № 1. — С. 74—81.
202. Brain dual energy computed tomography and intracranial coils - can the metal artifacts be reduced? [Текст] / H. Mellander [et al.] // EuroSafe Imaging 2020. — 2020. — P. 1.
203. *Coleman, A. J.* A beam-hardening correction using dual-energy computed tomography [Текст] / A. J. Coleman, M. Sinclair // Physics in Medicine & Biology. — 1985. — Vol. 30, no. 11. — P. 1251.
204. *Herman, G. T.* Correction for beam hardening in computed tomography [Текст] / G. T. Herman // Physics in Medicine & Biology. — 1979. — Vol. 24, no. 1. — P. 81.
205. *Hammersberg, P.* Correction for beam hardening artefacts in computerised tomography. [Текст] / P. Hammersberg, M. Mangard // Journal of X-ray Science and Technology. — 1998. — Vol. 8, no. 1. — P. 75—93.
206. Blind deconvolution combined with level set method for correcting cupping artifacts in cone beam CT [Текст] / S. Xie [et al.] // Medical Imaging 2017: Image Processing. Vol. 10133. — 2017. — 101331Z.
207. Exploratory research into reduction of scatter and beam hardening in industrial computed tomography using convolutional neural networks. 9th Conference on Industrial Computed Tomography (iCT) [Текст] / R. Pauwels [et al.] // Journal of Nondestructive Testing. Vol. 24. — 2019.
208. Metal artifact reduction by dual energy computed tomography using monoenergetic extrapolation [Текст] / F. Bamberg [et al.] // European Radiology. — 2011. — Vol. 21, no. 7. — P. 1424—1429.
209. Suppression of metal artefacts in CT using virtual singograms and corresponding MR images [Текст] / A. Anderla [et al.] // Current Science. — 2017. — Vol. 112, no. 7. — P. 1505—1511.

210. *Oehler, M.* Statistical Image Reconstruction for Inconsistent CT Projection Data [Текст] / M. Oehler, T. M. Buzug // Methods of Information in Medicine. — 2007. — Vol. 46, no. 3. — P. 261—269.
211. A Way To Reduce The Artifacts Caused By Intensely Absorbing Areas In Computed Tomography [Текст] / M. V. Chukalina [et al.] // ECMS 2015 Proceedings. — 2015. — P. 527—531.
212. CT metal artifact reduction by soft inequality constraints [Текст] / M. Chukalina [et al.] // Eighth International Conference on Machine Vision (ICMV 2015). Vol. 9875. — 2015. — P. 98751C.
213. Laboratory X-ray Microtomography: Ways of Processing Experimental Data [Текст] / A. V. Buzmakov [et al.] // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. — 2019. — Vol. 83, no. 2. — P. 146—149.
214. *Хейфец, А. Л.* 3D модели и алгоритмы компьютерной параметризации при решении задач конструктивной геометрии (на некоторых исторических примерах) [Текст] / А. Л. Хейфец // Вестник ЮУрГУ. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. — 2016. — Т. 16, № 2. — С. 24—42.
215. *Lehmann, E. L.* Theory of Point Estimation (2nd ed.) [Текст] / E. L. Lehmann, G. Casella. — New York : Springer, 1998.
216. Image quality assessment: from error visibility to structural similarity [Текст] / Z. Wang [et al.] // IEEE Transactions on Image Processing. — 2004. — Vol. 13, no. 4. — P. 600—612.
217. Microdome-gooved Gd₂O₂S:Tb scintillator for flexible and high resolution digital radiography [Текст] / P. Gu Jung [et al.] // Optics Express. — 2010. — Vol. 18, no. 14. — P. 14850—8.
218. Automatic beam hardening correction for CT reconstruction. [Текст] / M. V. Chukalina [et al.] // 31st European Conference on Modelling and Simulation (ECMS). — 2017. — P. 270—275.
219. *Punnoose, J.* Technical Note: Spektr 3.0 - A computational tool for x-ray spectrum modeling and analysis [Текст] / J. Punnoose, J. Xu, W. Zbijewski // Medical Physics. — 2016. — Т. 43, № 8. — С. 4711—4717.

220. Monochromatic computed microtomography using laboratory and synchrotron sources and X-ray fluorescence analysis for comprehensive analysis of structural changes in bones [Текст] / A. Buzmakov [et al.] // Journal of Applied Crystallography. — 2015. — Vol. 48, no. 3. — P. 693—701.
221. Gain in spatial resolution of X-ray laboratory microtomographs with enlarging X-ray optical elements [Текст] / R. A. Senin [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. — 2009. — Vol. 186, no. 1. — P. 012035.
222. Аллахвердов, Э. Поиск функции остановки, чувствительной к динамике ошибки в задаче мониторинговой реконструкции [Текст] / Э. Аллахвердов, М. Чукалина, К. Булатов // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. — 2021. — С. 114—115.
223. A review of 3D/2D registration methods for image-guided interventions [Текст] / P. Markelj [et al.] // Medical Image Analysis. — 2012. — Vol. 16. — P. 642—661.
224. Sara, U. Image Quality Assessment through FSIM, SSIM, MSE and PSNR—A Comparative Study [Текст] / U. Sara, M. Akter, M. S. Uddin // Journal of Computer and Communications. — 2019. — Янв. — Т. 07. — С. 8—18.
225. О проблемах при работе с микротомографическими изображениями пористых структур, используемыми для моделирования процессов протекания [Текст] / М. Григорьев [и др.] // Труды института системного анализа Российской академии наук (ИСА РАН). — 2021. — Т. 71, № 1. — С. 85—91.
226. P., D. D. Fuel quality issues with biogas energy - An economic analysis for a stationary fuel cell system [Текст] / D. D. P., A. Shabbir, K. Romesh // Energy. — 2012. — Vol. 44, no. 1. — P. 257—277.
227. Turning carbon dioxide into fuel [Текст] / Z. Jiang [et al.] // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 2010. — Vol. 368, no. 1923. — P. 3343—3364.
228. Формирование каталитически активных металлокерамических мембран для гибридного реактора [Текст] / В. И. Уваров [и др.] // Новые огнеупоры. — 2018. — Т. 4. — С. 133—135.
229. Керамические мембраны на основе скандий-стабилизированного ZrO_2 , полученные методом пленочного литья [Текст] / О. В. Тиунова [и др.] // Электрохимия. — 2014. — Т. 50, № 8. — С. 801.

230. Лабораторные микротомографы: конструкция и алгоритмы обработки данных [Текст] / А. В. Бузмаков [и др.] // Кристаллография. — 2018. — Т. 63, № 6. — С. 1007—1011.
231. X-ray microtomography using a laboratory source: Measurement technique and comparison of reconstruction algorithms [Текст] / M. V. Chukalina [et al.] // Measurement Techniques. — 2008. — Vol. 51, no. 2. — P. 136—145.
232. *Kurita, T.* Maximum likelihood thresholding based on population mixture models [Текст] / T. Kurita, N. Otsu, N. Abdelmalek // Pattern Recognition. — 1992. — Vol. 25, no. 10. — P. 1231—1240.
233. Characterization of hierarchical pore structures in ceramics using multiscale tomography [Текст] / F. Tariq [et al.] // Acta Materialia. — 2011. — Vol. 59, no. 5. — P. 2109—2120.
234. *Lorensen, W. E.* Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm [Текст] / W. E. Lorensen, H. E. Cline // Proceedings of the 14th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques. — Association for Computing Machinery, 1987. — P. 163—169.
235. *Petrash, J.* Tomography-based Monte Carlo determination of radiative properties of reticulate porous ceramics [Текст] / J. Petrash, P. Wyss, A. Steinfeld // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. — 2007. — Vol. 105, no. 2. — P. 180—197.
236. Tomography-Based Multiscale Analyses of the 3D Geometrical Morphology of Reticulated Porous Ceramics [Текст] / J. Petrash [et al.] // Journal of the American Ceramic Society. — 2008. — Vol. 91, no. 8. — P. 2659—2665.
237. *Jain, A. K.* Fundamentals of digital image processing [Текст] / A. K. Jain. — USA : Prentice-Hall, Inc., 1989.
238. Формирование двумерных структур фотонных кристаллов в кремнии для ближнего ИК диапазона с использованием остросфокусированных ионных пучков [Текст] / А. Вяткин [и др.] // Физика твердого тела. — 2004. — Т. 46, № 1. — С. 36—38.
239. Формирование многослойных структур с интегрированными мембранами на основе пористого кремния [Текст] / В. Болотов [и др.] // Физика и техника полупроводников. — 2020. — Т. 54, № 5. — С. 504—509.

240. *Grossmann, A.* Decomposition of Hardy Functions into Square Integrable Wavelets of Constant Shape [Текст] / A. Grossmann, J. Morlet // SIAM Journal on Mathematical Analysis. — 1984. — Vol. 15, no. 4. — P. 723—736.
241. *Starck, J. L.* Image Processing and Data Analysis [Текст] / J. L. Starck, F. Murtagh, A. Bijaoui. — Cambridge University Press, 1998.
242. Methods for subjective determination of transmission quality [Текст]. — International Telecommunication Union, 1996.
243. *Nicholson, J.* The R-Factor: A Measure of Scientific Veracity [Текст] / J. Nicholson, Y. Lazebnik // The Winnower. — 2015.
244. Iterative algorithm for 4D tomography reconstruction using a single projection per time step [Текст] / A. Buzmakov [и др.] // IEEE Access. — 2021. — Т. 10.
245. Обоснование необходимости совместного применения автоматической оптической инспекции и неразрушающего рентгеновского контроля электронных модулей [Текст] / А. А. Осипенко [и др.] // Информационные технологии. — 2017. — Т. 2, № 2. — С. 3—8.
246. Лабораторные рентгеновские микротомографы: методы предобработки экспериментальных данных [Текст] / А. В. Бузмаков [и др.] // Известия РАН. Серия физическая. — 2019. — Т. 83, № 2. — С. 194—197.

Список рисунков

1.1	Принципиальная схема сбора томографических проекций с разных ракурсов.	18
1.2	Принципиальная схема сбора сигнала [16].	20
1.3	Коэффициент поглощения [17]. E_k - энергия края поглощения ионизированного атома.	21
1.4	Массовые коэффициенты поглощения. Края поглощения для Pb выделены черным цветом, для Cd - синим цветом, для Fe - красным цветом.	22
1.5	Иллюстрация к процедуре выделения EXAFS спектра.	22
1.6	Принципиальная схема формирования осцилляций в спектре поглощения.	23
1.7	Амплитуда обратного рассеяния для атомов фосфора.	24
1.8	EXAFS спектр, взвешенный на k^3 (сплошная линия - обработанный результат измерения, пунктир - результат моделирования) [23]. . . .	24
1.9	Фурье спектр EXAFS сигнала.	25
1.10	Модель атомной структуры [24].	26
1.11	Фурье спектр EXAFS сигнала с указанием проблемных мест.	26
1.12	Флуоресцентные карты для линий фосфора, серы и железа. Метод PIXE. Сканирование проводилось протонным пучком энергии 3 мэВ. Толщина образца 60 микрон [28].	27
1.13	Принципиальная схема сбора сигнала в методе PIXE [29].	28
1.14	Принципиальная схема формирования сигнала при сканировании бесконечно тонким протонным микрозондом структуры с ортотропным профилем поверхности [30].	29
1.15	Участок ортотропной референсной структуры [30].	29
1.16	Пример участка флуоресцентной карты Ni [30].	31
1.17	Принципиальная схема формирования сигнала при сканировании бесконечно тонким рентгеновским микрозондом структуры с ортотропным профилем поверхности на кремниевой подложке. . . .	32
1.18	Флуоресцентный выход для K, L, M оболочек для $3 \leq Z \leq 110$, усредненный по подоболочкам [39].	33
1.19	Принципиальная схема формирования томографической проекции при сканировании рентгеновским микрозондом [41].	37

1.20	Сечение объекта. Распределение линейного коэффициента ослабления (слева). Синограмма, рассчитанная для диапазона проекционных углов от 0° до 180° (справа).	39
1.21	Измерительная схема, использованная для сбора рентгеновских флуоресцентных проекций на станции ID22 источника синхротронного излучения ESRF (Гренобль, Франция) [38].	40
1.22	Пространственное распределение титана [43].	41
1.23	Схема формирования рентгено-флуоресцентного сигнала при сканировании рентгеновским микрозондом [38].	41
1.24	Принципиальная схема формирования параллельных проекций. . .	44
1.25	Формирование проекций при параллельном зондировании.	44
1.26	Принципиальная схема формирования проекции при использовании конического рентгеновского пучка.	46
1.27	Модельный спектр вольфрамового анода при напряжении 100кэВ. .	47
1.28	Зависимость линейных коэффициентов ослабления рентгеновского излучения от энергии для железа и вольфрама.	47
1.29	Зависимость ослабления излучения от толщины однородного образца при зондировании монохроматическим и полихроматическим излучением [44].	48
1.30	Пластиковый цилиндр с 4 вставками.	48
1.31	Слева-направо. Результат измерения. Результат вычитания темнового тока. Результат измерения пустого пучка. Результат выполненной линеаризации.	49
1.32	Лучевые суммы (линеаризованные значения) для линейки пикселей позиционно-чувствительного детектора. А,В,С – результаты моделирования, D - результат измерения.	50
1.33	Сравнение результатов моделирования с результатом измерения. А - моделирование с использованием ПО XCIST, В - моделирование с использованием модели (1.27), С - результат измерения.	51
1.34	Схема эксперимента: 1 - система щелей; 2 - исследуемый образец (сетка); 3 - алюминиевый фильтр; 4 - камера прибора с зарядовой связью (CCD).	53

1.35	Изображения калибровочной сетки (а) рентгеновские «на просвет» и для 2-х характеристических линий. Плоскости $(\bar{1}11)$ и $(1\bar{1}1)$ соответствуют характеристическим линиям K_α и K_β Мо, соответственно; (b) результат моделирования с использованием ПО LauePt [57].	53
1.36	(а) Изображение в режиме на просвет; (b) нормированное изображение $P_{K_\alpha}^{norm}$; (с) нормированное изображение $P_{K_\beta}^{norm}$; (d) изображение после проективной коррекции $P_{K_\alpha}^{proj}$; (е) изображение после проективной коррекции $P_{K_\beta}^{proj}$	55
1.37	Трехканальное изображение калибровочной сетки. Красный канал содержит P_T^{norm} , зеленый канал содержит $P_{K_\beta}^{proj}$, а синий канал содержит $P_{K_\alpha}^{proj}$	56
1.38	(а) Изображение в режиме на просвет; (b) нормированное изображение $P_{K_\alpha}^{norm}$; (с) нормированное изображение $P_{K_\beta}^{norm}$; (d) изображение после проективной коррекции $P_{K_\alpha}^{proj}$; (е) изображением после проективной коррекции $P_{K_\beta}^{proj}$	57
1.39	Цветное изображение участка микросхемы. Красный канал содержит P_T^{norm} , зеленый канал содержит $P_{K_\beta}^{proj}$, а синий канал содержит $P_{K_\alpha}^{proj}$	57
2.1	Вид функции амплитуды обратного рассеяния фосфора.	61
2.2	Модельные сигналы (верхний рисунок), амплитуда преобразования Фурье модельных сигналов(нижний рисунок).	62
2.3	Вейвлет карты сигналов, представленных на рис. 2.2 [23]	63
2.4	Реальная (сплошная линия) и мнимая (пунктирная линия) части функции Морле.	65
2.5	Вид модельной функции для демонстрации пространственного разрешения при использовании вейвлет преобразования.	66
2.6	Результат вейвлет преобразования модельной функции 2.15. Участок изображения.	67
2.7	(Слева) EXAFS сигнал $Zn - Al$ слоистого двойного гидроксида. (Справа) Амплитуда Фурье спектра сигнала.	68
2.8	Вейвлет карта. Первая металлическая координационная сфера. Параметры Морле $\eta = 30, \sigma = 0.19$	68

- 2.9 Спектры EXAFS, взвешенные на k^2 (вставка), соответствующие значения преобразования Фурье (R) (основное окно) для образца CSLs (сплошные линии) и эталонных образцов кристаллов (пунктирные линии) $GeTe$ и Sb_2Te_3 , соответственно. (а) К- край поглощения Ge ; (b) К- край поглощения Sb 72
- 2.10 (а) – Изображение образца CSLs, полученное в электронном микроскопе. Слева – модель. Атомы Sb , Te и Ge обозначены красным, синим и зеленым кружками, соответственно. Полуцветные кружки указывают на идеальное 50%-ное перемешивание атомов Sb и Ge . Черный профиль справа – результат количественного анализа изображения. (b) – Модуль преобразования Фурье экспериментальных спектров EXAFS для центральных атомов Sb и Ge (серые кривые) и результат моделирования (Ge -черные, Sb -красные кривые). (с) Сравнение теоретических моделей с экспериментальными данными CSLs. 73
- 2.11 Результаты теоретических расчетов, проведенных согласно Томинаги и др. [77]. Атомы Sb , Te и Ge обозначены красным, синим и зеленым кружками, соответственно. (b) Фурье преобразования, рассчитанные по экспериментальным EXAFS спектрам на K -границе Ge и Sb (серые кривые) и модельным спектрам (черные кривые Ge , красные кривые Sb) для четырех моделей. 75
- 2.12 Верхние рисунки: вейвлет карты с использованием материнского вейвлета Морле. Нижние рисунки: результаты моделирования траекторий обратного рассеяния, соответствующих 1-й и 2-й оболочкам, для модели KT монокристалла $GeTe$ 76
- 2.13 Структура сверхрешетки [71]. 77
- 2.14 Таблица. Межатомные расстояния для 1-й и 2-й координационных сфер CSL, полученные в результате модельных расчетов. Атомные позиции обозначены буквами А, В и С, как показано на рис. 2.13, они определяют пары: $Ge - Ge$, $Ge - Sb$ и $Sb - Sb$ 77
- 2.15 (Слева) EXAFS сигнал $Zn - Al$ слоистого двойного гидроксида. (По центру) Амплитуда Фурье спектра сигнала. (Справа) Участок вейвлет карты для первой металлической координационной сферы. 78

2.16	Вейвлет карты, рассчитанные для второй и третьей металлических сфер. Верхний рисунок: $\eta = 15$, $\sigma = 2$. Нижний рисунок: $\eta = 9.9$, $\sigma = 0.47$	78
2.17	Иллюстрация к масштабированию окна.	79
2.18	Вейвлет карта. Вторая и третья металлические координационные сферы. Параметры Морле $\eta = 30$, $\sigma = 1$ и $\eta = 30$, $\sigma = 0.16$	80
2.19	Спектр EXAFS для однократного акта рассеяния $Zn - Zn$, $R = 6.0 \text{ \AA}$. Черным цветом показана огибающая.	80
2.20	Действительная (сплошные линии) и мнимая (пунктирные линии) части вейвлетов $FEFF - Morlert$, построенных на основе четырех модельных спектров $Zn - Al$ $r = 5.2 \text{ \AA}$ и $r = 6.0 \text{ \AA}$; $Zn - Zn$ $r = 5.2 \text{ \AA}$ и $r = 6.0 \text{ \AA}$	81
2.21	Результат анализа вейвлет-карт с использованием FEFF-Морле вейвлетов для путей $Zn-Zn$ при $r = 6.0 \text{ \AA}$, $Zn-Al$ при $r = 6.0 \text{ \AA}$, $Zn-Zn$ при $r = 5.2 \text{ \AA}$ и $Zn-Al$ при $r = 5.2 \text{ \AA}$ [24].	83
2.22	Атомная структура двойного слоистого гидроксида, спектр которого изучался.	84
2.23	Анализируемые спектры EXAFS [80].	85
2.24	Результат анализа вейвлет-карт с использованием FEFF-Морле материнских вейвлетов для путей $Zn-Zn$ при $r = 6.0 \text{ \AA}$, $Zn-Al$ при $r = 6.0 \text{ \AA}$, $Zn-Zn$ при $r = 5.2 \text{ \AA}$ и $Zn-Al$ при $r = 5.2 \text{ \AA}$ [80].	86
2.25	Орторомбическая суперячейка [80].	87
3.1	Модульный чип референсной сертифицированной структуры.	89
3.2	Сравнение результатов моделирования с результатами измерения PIXE [30].	90
3.3	Профиль края. Результат травления. Размер зерна пермаллоя $< 0.1 \text{ мкм}$ [85].	90
3.4	Карта флуоресцентных сигналов Ni . Ширина полосы пермаллоя 4 мкм	92
3.5	Результат восстановления 2D профиля микрозонда.	93
3.6	Участок горизонтального сечения карты распределения никеля.	94
3.7	Вертикальный скан. Флуоресцентный сигнал $Cu_{k\alpha}$	95
3.8	Результаты двумерной фокусировки, полученные в разных научных группах. (a) [90], (b) [91], (c) [92], (d) [93]	96

3.9	Геометрия Киркпатрика-Байеза с двумя линейными оптическими элементами в схеме [90].	96
3.10	Принципиальная схема формирования сфокусированного рентгеновского микрозонда с использованием внеосевой фазовой зонной пластинки Френеля со скользящим падением [93]	97
3.11	Пример референсной структуры	97
3.12	Иллюстрация к 4 этапам процедуры сканирования фокальной плоскости референсным объектом	100
3.13	Увеличенное изображение части референсного объекта. Положение, соответствующее 2-му этапу сканирования (рис. 3.12, б). Изображение получено со сканирующего электронного микроскопа, размер участка 150×150 мкм.	100
3.14	Схема положения уголка референсной структуры в пикселе $(i - 1), (j - 1)$ для первого этапа сканирования.	101
3.15	Смещенное вдоль строки вправо положения уголка референсной структуры из положения $(i - 1, j - 1)$ для первого этапа сканирования.	102
3.16	Смещенное положения уголка референсной структуры вниз на одну строку из положения $(i - 1, j - 1)$ для первого этапа сканирования.	103
3.17	(а): Функция распределения фотонов в фокальной плоскости. (б): Реализация модели с пуассоновским шумом. (в): Оценка шума по двум реализациям.	104
3.18	Модельный сигнал для первого этапа сканирования.	105
3.19	Верхний рисунок: восстановление по результатам только первого этапа сканирования. Нижний рисунок: восстановление по результатам 4 этапов сканирования.	105
4.1	Принципиальные схемы сбора проекций. Примеры. а) Использование микрозонда для сканирования. б) Круговая схема сканирования с коническим пучком. в) Спиральная схема сканирования с ограничением ширины поля вида. г) Все узлы измерительного тракта перемещаются и вращаются.	110
4.2	Принципиальная схема первого эксперимента по рентгено-флуоресцентной томографии [43].	115

4.3	Результаты эксперимента [43]. Модель объекта (верхний рисунок). Реконструкция распределения железа (центральный рисунок). Реконструкция распределения титана (нижний рисунок).	116
4.4	Принципиальная схема измерений в методе рентгеновской флуоресцентной томографии [114].	117
4.5	Схема регистрации флуоресцентных квантов.	119
4.6	Форма и химический состав образца, использованного для проведения модельных расчетов.	121
4.7	Реконструкция распределения железа и кальция в моделируемом образце. (а) Распределение железа без поправок на поглощение. (b) Распределение железа с учетом поглощения (аппроксимация E^{-3}). (с) Распределение железа предложенным методом. (d) Распределение кальция без поправок на поглощение. (е) Распределение кальция с учетом поглощения (аппроксимация E^{-3}) (f) Распределение кальция предложенным методом.	122
4.8	Оценка линейных коэффициентов поглощения. Аппроксимация E^{-3} (штрихпунктирная линия), с использованием предложенного метода (пунктирная линия) и теоретические значения (сплошная линия): (а) усреднение по включению 2; (b) усреднение по включению 3 (рис. 4.6).	122
4.9	Горизонтальное сечение восстановленного цифрового 3D изображения тестового капилляра.	124
4.10	Карты пространственного распределения элементов в тестовом капилляре. Горизонтальные сечения цифрового 3D изображения. . .	124
4.11	Карты (горизонтальные сечения цифрового 3D изображения) пространственного распределения фракций элементов в микрофлюидном включении синтезированного кварцевого кристалла.	125
4.12	А) Расположение исследуемого флюидного включения в синтетическом кварцевом сколе. В) Увеличенный объем, представленный на А. Состав включения при комнатной температуре: газообразная фаза воды (а), жидкая фаза (b) и твердые фазы, включая дочерний кристалл галита и непрозрачные минералы (с).	126

4.13	Рентгеновский флуоресцентный спектр включения, полученный при зондировании пучком 15 кэВ. Время сбора сигнала составило 50 секунд. Пики Рэлея и Комптона представляют упругое и неупругое рассеяние фотонов, соответственно. Наблюдаются пики <i>Fe</i> , <i>Cu</i> , <i>Zn</i> и <i>Au</i> . Пик <i>Ar</i> – из воздуха.	127
4.14	Виртуальное сечение. Результат томографической реконструкции. Пространственное распределение <i>Pb</i> , <i>Rb</i> и <i>Th</i> [125].	127
4.15	Результат реконструкции. Слева: взаимное распределение Si, Ca и Fe. Справа: взаимное распределение Si, Cr и Fe.	129
4.16	Результаты реконструкции распределения Si до и после обработки спектров. Слева: до обработки, справа: после обработки программой AXIL.	130
4.17	Принципиальная схема измерения проекции при использовании параллельного пучка для зондирования в круговой схеме сбора проекций.	131
4.18	Дискретизация пространства изображения объекта.	132
4.19	Иллюстрация к трем моделям пучка.	133
4.20	Слева - фантом Шеппа-Логана. Справа - реконструкция, выполненная программой RegART. По центру - попиксельная разница левого и правого изображений.	134
4.21	Фантом Шеппа-Логана с выбранными для сравнения участками. . .	135
4.22	Три области интереса фантома Шеппа-Логана для сравнения реконструкций.	136
4.23	Набор собранных томографических проекций.	137
4.24	Восстановленные цифровые изображения горизонтального сечения пробирки. (А) – результат предложенного метода, (В) – результат метода FBP. (Б) – центральный профиль сечения (серая кривая – алгебраический метод без регуляризации, черная кривая – предложенный метод. (Г) – центральный профиль сечения (серая кривая – метод FBP, черная кривая – предложенный метод)	138
4.25	Сравнение теоретического результата (оранжевая кривая) с результатом моделирования (синяя кривая).	141
4.26	Изображение фантома.	142

4.27	<i>a</i> - синограмма с переменным временем экспозиции; <i>б</i> - представление границы раздела значений времени экспозиции; <i>в</i> - взвешенные значения синограммы.	143
4.28	Результаты реконструкции: <i>a</i> - методом SIRT, <i>б</i> - предложенным методом.	143
4.29	<i>a</i> - модельная синограмма; <i>б</i> - иллюстрация процесса сбоя в детектировании; <i>в</i> - использованная в СЛАУ синограмма.	144
4.30	Результаты реконструкции: <i>a</i> - методом SIRT, <i>б</i> - предложенным методом.	145
4.31	<i>a</i> - модельная синограмма; <i>б</i> - иллюстрация процесса сбоя в детектировании; <i>в</i> - использованная в СЛАУ синограмма.	145
4.32	Результаты реконструкции: <i>a</i> - методом SIRT, <i>б</i> - предложенным методом.	146
4.33	Фантом, использованный в модельном эксперименте. распределение первой (<i>a</i>) и второй (<i>б</i>) компоненты. Белый цвет соответствует объекту, черный - фону.	149
4.34	Зависимость коэффициентов ослабления рентгеновского излучения компонентами фантома от энергии. Края поглощения для первого - 10 кэВ и второго - 2.5 кэВ (<i>a</i>). Спектр, использованный для расчета синограммы (<i>б</i>).	150
4.35	Модельная синограмма.	150
4.36	Результат реконструкции методом FBP (<i>a</i>). Результат реконструкции распределений первой (<i>б</i>) и второй (<i>в</i>) компонент предложенным методом.	152
4.37	Принципиальная схема томографических измерений в конусной схеме.	154
4.38	Схема разбиения на субобъемы.	157
4.39	Горизонтальное сечение цилиндрического объема.	158
4.40	Горизонтальное сечение восстановленного цифрового изображения в месте сшивки.	158
4.41	Два центральных профиля. Профиль восстановленного сечения – серая линия, профиль фантома – черная линия.	159
4.42	Результат реконструкции из измеренных проекций (участок). Вертикальное сечение восстановленного цифрового изображения. . .	159

4.43	Изображения фантомов, использованных в модельном эксперименте, размером 512x512 пикселей.	162
4.44	Изображение фантома СТР401(слева). Синограмма, рассчитанная в диапазоне проекционных углов от 0° до 180° (справа).	162
4.45	Частичные реконструкции, выполненные с использованием алгоритма FBP для объекта СТР401.	163
4.46	Динамика поведения ошибки реконструкции.	164
4.47	Модели лучей. Слева - модель луча с использованием симметричных лучей-ступенек, справа - модель, наилучшим образом приближающая прямую.	165
4.48	Слева - изображение фантома, по центру - Хаф-сумма, справа - результат реконструкции.	167
4.49	Время вычисления 30 итераций. Непрерывная кривая - функция $C(n^2 \log n)$, крестиками отмечен результат измерения времени расчета.	167
4.50	Изображение интегральной проекции с автоматически выделенной областью интереса	168
4.51	Слева – гистограмма изображения интегральной проекции. Справа – увеличенный участок изображения гистограммы.	170
4.52	Слева – изображение интегральной проекции после применения метода контрастного растяжения. Справа – бинаризованное изображение с границами.	171
4.53	Верхний ряд – изображение интегральной проекции. Выполнено а) контрастное растяжение, б) удаление шума в прямом пространстве с последующим контрастным растяжением, с) удаление шума в частотном пространстве с последующим контрастным растяжением. Нижний ряд – гистограммы, соответствующие изображениям верхнего ряда.	173
4.54	Верхний ряд – изображение интегральной проекции. Выполнено а) контрастное растяжение, б) удаление шума в прямом пространстве с последующим контрастным растяжением, с) удаление шума в частотном пространстве с последующим контрастным растяжением. Нижний ряд – Результаты бинаризации, соответствующие изображениям верхнего ряда.	174

4.55	а) Горизонтальное сечение фантома, b) синограмма с выделенным ROI (использован предложенный метод), c) реконструкция интегральным методом по полным проекциям, d) реконструкция по ROI.	175
4.56	а) Зависимость ошибки реконструкции от размера ROI, b) зависимость времени вычислений от размера ROI.	176
5.1	Источники искажений.	182
5.2	Участок восстановленного изображения. Слева - без коррекции положения оси (наблюдается двоение границ), справа - положение оси скорректировано.	184
5.3	Пример томографической реконструкции (участок). Слева - реконструкция проведена «классическим» алгоритмом. Справа - применялся алгоритм, учитывающий наличие сильнопоглощающих включений [165].	185
5.4	Иллюстрация артефактов, возникающих при использовании классических методов реконструкции в условиях малоракурсной съемки. Слева: применен стандартный метод реконструкции. Справа: использован предложенный метод реконструкции для малоракурсного случая.	189
5.5	Верхний ряд. Слева: фантом из открытого набора данных Low Dose CT Challenge [174], используемый в эксперименте. Справа: реконструкция алгебраическим методом SIRT (20 итераций), выполненная по 64 проекциям. Нижний ряд: увеличенные участки двух изображений, соответственно.	192
5.6	Синограмма, рассчитанная от фантома для 64 проекционных углов.	193
5.7	Маска, использованная для смешивания начального приближения и уточняющей добавки в Фурье пространстве	194
5.8	Верхний ряд. Слева: Реконструкция фантом предложенным методом с использованием нейросетевой модели LRFR. Справа: реконструкция фантома с использованием нейросетевой модели LPDR [175]. Нижний ряд: увеличенные участки двух изображений, соответственно.	195
5.9	Иллюстрация эффекта неоднородного отклика ячеек	197

5.10	Участок горизонтального сечения цифрового изображения объекта. Слева - реконструкция без учета неоднородного отклика пикселей позиционно-чувствительного детектора. Справа - реконструкция выполнена после автоматической коррекции проекций на неоднородный отклик [177].	198
5.11	Пример линеаризованного проекционного изображения	199
5.12	Пример синограммы.	200
5.13	Пример распределения усредненных значений синограммы.	201
5.14	Результат применения медианной фильтрации. Увеличенная часть обведена прямоугольной рамкой.	203
5.15	Эффективная площадь (оранжевая рамка) и эффективная ширина синограммы.	203
5.16	Результат применения билатерального фильтра. Увеличенная часть массива обведена прямоугольником.	207
5.17	Пример распределения значений ошибки по ширине детектора.	208
5.18	Пример скорректированной синограммы (с подавленными полосовыми артефактами).	208
5.19	Пример синограммы с коррекцией контраста.	209
5.20	Сравнение исходной и конечной контрастных синограмм: а) исходная синограмма, б) скорректированная синограмма (результат итерации цикла метода), в) попиксельная разность исходного и конечного скорректированных изображений синограмм. Попиксельная разность представлена в голубой палитре: выделены положительная и отрицательная компоненты нормализованной разности синограмм, при этом положительная компонента размещена в канале изображения, соответствующем красному цвету, а инвертированная отрицательная компонента заполняет каналы изображения, соответствующие зеленому и синему цветам.	210
5.21	Использованный в модели фантом (ideal) и результаты реконструкции для 4 наборов модельных проекций. Сверху-вниз: фантом; реконструкция по проекциям без коррекции; проекции обрабатывались предложенным методом; проекции обрабатывались методом [182]; проекции обрабатывались методом [178].	212
5.22	Результат реконструкции. Профили восстановленных сечений для контроля сохранения границ.	213

5.23	Результат реконструкции по наборам реально измеренных томографических проекций. Слева–направо: колонка с результатами реконструкции, проведенной без обработки проекций; проекции обрабатывались методом [182]; проекции обрабатывались методом [178]; проекции обрабатывались предложенным методом. . .	214
5.24	Слева - результат реконструкции после передачи в реконструктор верных параметров положения оси. Справа - пример искажения результата реконструкции, вызванного передачей неверных параметров положения оси в реконструктор.	215
5.25	Принципиальная схема для параметрической модели отклонения положения оси вращения от заданного положения.	217
5.26	Изображения объектов, участвующих в сравнении методов поиска и коррекции положения оси.	220
5.27	Результаты реконструкции, выполненной без коррекции параметров (слева), коррекция методом фазовой корреляции (по центру), коррекция предложенным методом (справа).	222
5.28	Участок сечения объекта, содержащего сильнопоглощающее включение. Реконструкция выполнена методом FDK.	223
5.29	Слева: используемый в эксперименте фантом. Справа: рассчитанная от фантома синограмма В.	226
5.30	Слева: результат реконструкции предложенным методом [212]. Справа: результат реконструкции методом без учета сигналов, лежащих в области сильного поглощения(5.24).	227
5.31	Фотография тестового образца.	227
5.32	Изображения нормированных проекций молочного зуба. (а) – без включения, (б) – со свинцовым включением. (в) и (г) – синограммы отмеченных горизонтальными линиями сечений.	228
5.33	К анализу областей интереса. (а) Реконструкция сечения зуба с включением. (б) Результат бинаризации с пороговым отсечением с операцией замыкания ROI1. (в) Результат бинаризации с пороговым отсечением ROI2. (г) Реконструкция сечения зуба без включения. (д) Результат бинаризации с пороговым отсечением с операцией замыкания. (е) Результат наложения (б) и (д).	229
5.34	Лабораторный микротомограф (фото).	229

5.35	Результат восстановления сечения зуба без включения Sample1 методами FBP (а), SIRT (б), SOFT SIRT (в), SIRT TV (г).	230
5.36	Результаты реконструкции сечения зуба со свинцовым включением методами FBP (а), SIRT (б), SOFT SIRT (в), SIRT TV (г).	231
5.37	Вертикальное сечение цифрового восстановленного изображения. . .	231
5.38	Пластиковый цилиндр.	232
5.39	Спектр испускания молибденового анода.	233
5.40	Анализируемый ракурс (направление зондирования.	234
5.41	Измеренная проекция для ракурса (рис. 5.40) (слева) и справа профили линейки пикселей детектора –монохроматический (верхний) и полихроматический (нижний) случаи.	234
5.42	Результат реконструкции сечения тестового объекта из синограммы, измеренной в монохроматической моде (слева) и синограммы в полихроматической моде (справа).	235
5.43	Результат реконструкции участка микроструктуры. С использованием метода, учитывающего наличие сильнопоглощающих включений (верхний рисунок). С использованием стандартного алгоритма (нижний рисунок).	235
5.44	Результаты реконструкции сечения керна. Слева: линеаризация выполнена без учета полихроматичности использованного излучения. Справа: линеаризация выполнена предложенным методом.	238
5.45	Поперечное сечение фантома Fe.	239
5.46	Модельный спектр W анода.	240
5.47	Модельная синограмма.	240
5.48	Результаты применения метода коррекции полихроматических проекций. Верхний ряд: динамика величины оптимизируемого выражения (слева), профили восстановленных сечений (справа). Нижний ряд: реконструкция после линеаризации методом для монохроматической моды (слева), реконструкция после линеаризации предложенным методом (справа).	241
5.49	Измеренная проекция (верхнее изображение) синограмма (нижнее изображение).	242
5.50	Зависимость величины оптимизируемого выражения от значения параметра.	243

5.51	Результат реконструкции: (а) без коррекции ВН, (б) с коррекцией ВН, (в) соответствующие профили восстановленных сечений.	244
5.52	Результаты реконструкции методом свертки и обратной проекции. Слева: проекционные углы взяты последовательно. Справа: случайный порядок углов.	247
5.53	Результаты реконструкции методом свертки и обратной проекции. Слева сравниваются результаты реконструкции по n и $n + 10$ углам, справа – по n и $n + 1$ угол.	248
5.54	РЭМ-изображение образца на основе Al_2O_3	252
5.55	Распределение частиц по размерам.	254
5.56	Схема рентгеновского микротомографа: 1 - источник рентгеновского излучения (рентгеновская трубка), 2 - блок монохроматора, 3 - вакуумный путь (коллиматор), 4 - вакуумный насос, 5 - изучаемый образец в системе позиционирования, 6 - рентгеновский детектор XIMEA xiRAY 11, 7 - зона локальной радиационной защиты, 8 - сцинтиллятор и оптическая система формирования изображения, 9 - сенсор рентгеновского излучения с системой считывания и охлаждения.	255
5.57	Горизонтальное (а) и вертикальное (б) сечение восстановленного объема.	256
5.58	Гистограмма восстановленного объема в серых тонах.	257
5.59	Участок горизонтального сечения восстановленного изображения (а). Результат применения операции бинаризации (б).	258
5.60	Динамика поведения величины удельной поверхности в зависимости от размера анализируемого объема.	259
5.61	Распределение закрытых пор по диаметру поры (в вокселях), (а) - исходное, (б) - после применения билатерального фильтра.	260
5.62	Участок восстановленного объема после выполнения операций фильтрации и бинаризации, темным цветом обозначен материал пористого фильтра, светлым - поры.	261
5.63	Распределение пор по размерам.	261
5.64	Изображение фантома, использованное для расчета проекций в модельном эксперименте.	263
5.65	Увеличенное изображение одного зерна.	264

5.66	(a) Результат реконструкции алгебраическим методом ART с наложенными изолиниями (участок). (b) Результат реконструкции интегральным методом FBP с наложенными изолиниями (участок).	264
5.67	Результат вейвлет-преобразования с наложенными изолиниями (участок). Параметр масштаба a = размер зерна. а) для изображения фантома, б) - для изображения, восстановленного алгебраическим методом, с) для изображения, восстановленного интегральным методом.	266
5.68	(a) Результат реконструкции ART по 10 (слева) и 130 (справа) проекционным углам.	267
5.69	Динамика ошибки MSE для 3-х алгоритмов и 2-х объектов.	270
5.70	Интерфейс программного обеспечения для томографической реконструкции STE.	280
5.71	3D цифровое изображение объекта, восстановленное с использованием программного обеспечения STE.	281
5.72	Два виртуальных сечения цифрового изображения объекта, представленного на рис. 5.71. Слева - сечение в плоскости XY, справа - сечение в плоскости XZ.	281

Список таблиц

1	Параметры модельного эксперимента	50
2		156
3	Сравнение двух нейросетевых моделей	194
4	Сравнение методов	215
5	Сравнение предложенного метода с методом фазовой корреляции [195]	221
6	Сравнение значений RMSE и SSIM для ROI1	230
7	Сравнение значений RMSE и SSIM для ROI2	232
8	Параметры эксперимента	233
9	Результаты микрорентгеноспектрального анализа образца (нормированные)	253