

软 X 射线谱学显微图像漂移的精确校正

张祥志 许子健 甄香君 王 勇 郭 智 严 睿 邵仁忠

(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201204)

摘要 上海光源软 X 射线谱学显微实验站(BL08U)新建成并投入使用,已实现 30 nm 空间分辨的元素成像功能。由于机械精度和重复精度误差,不同能量扫描出的两幅或多幅图像位置会有定量的漂移。在高分辨情况下图像漂移不仅给数据处理带来严重误差,导致分辨率下降,甚至产生错误,所以需对不同能量下的图像配准。硬件上用激光干涉仪对样品定位,并通过 slope 函数确定样品台移动的漂移规律,从而在移动样品过程中对位置动态校正。软件上发展一种新的基于图像分窗口相关性的数字图像自动配准方法,对采集到的两幅或多幅 STXM 图像配准,对每一子区的自动相关匹配来对整幅图像精确配准,在 x 和 y 方向配准精度可达小于 1 像素尺度(STXM 目前的要求)。

关键词 图像配准,分窗口,相关函数,激光干涉仪,扫描透射软 X 射线显微

中图分类号 TP391.4, TP271.7

X射线显微成像技术的分辨率高、穿透性好,可观察厚物质的内部三维结构,在生物医学和纳米材料领域有广泛应用^[1]。上海光源软X射线谱学显微光束线站(BL08U)是我国第一条基于第三代同步辐射光源的软X射线波段的光束线站。它用扫描透射X射线显微术(STXM)将30 nm的高空间分辨能力和高能分辨的近边吸收精细结构谱学(NEXAFS)结合在一起,有元素识别和化学态分析的能力。实验中,扫描样品时对样品位置的移动能达到相应的精度,才能保证高的空间分辨率和后期实验数据处理结果的可靠性。目前,BL08U采用激光干涉仪确定样品和各部件的移动位置,可确保波带片相对样品横向位置的长期稳定性,还能测量扫描样品过程中图像在 x 和 y 方向上的轻度失真^[2]。本文根据激光干涉仪提供的扫描图像在 x 和 y 方向的轻度失真数据,用slope函数求出样品在移动过程中位置漂移的规律,从而修正样品位置。尽管如此,图像在 x 和 y 方向依然有一定漂移,给分析实验结果造成很大误差,需对数字图像进行后期配准。图像匹配技术是实现图像融合、图像校正、图像镶嵌及目标识别与跟踪的关键步骤之一,已广泛应用在图像识别和图像重建等领域中。如何自动提取稳定可靠的特征、提高匹配准确度是实现图像匹配的重要环节,国内外学者已做了大量研究工作。图像匹配技术分为基于像素和基于特征的方法^[3-6]。本文在软件上采用基于统计的图像相关性最大化方法来配准图像,并发展了一

种基于图像分窗口相关性的数字图像自动配准方法,着重针对双能衬度图像进行配准测试。结果显示配准误差小于1个像素尺度。

1 用硬件对图像漂移校正

激光干涉仪能提供不同能量扫描时每幅图像在 x 和 y 方向的漂移。仪器本身有固有误差,所以用激光干涉仪提供的漂移数据,通过slope函数计算这些数据点的线性回归拟合线方程的斜率,即样品台在移动过程中的漂移规律。用该规律校正样品在移动过程中的位置漂移。

1.1 样品

实验中样品是用铜质的多级不同间隙圆环组成的圆形标准样品,如图1(a),其系经扫描透射得到的透射图,中心小圆区域为空,第一层圆环由宽度30 nm的空隙和铜片组成,依次类推,圆环逐层从内到外铜片间距分别为30、60、120、240和480 nm。

1.2 实验方案

标准样品置于样品架上,调整样品至波带片焦点处。用不同能量(N 个)的X射线扫描样品,得到 N 幅吸收图,在每幅图上确定一个有共同标志性的点(图1b)。比较各图上该点相对于某幅图像的偏移,可得到样品在 x 和 y 方向上的一组漂移数据。用slope函数计算这些数据点的线性回归拟合方程的

斜率 dx/dz 和 dy/dz ，用其对扫描过程中样品台位置在 x 和 y 方向上的漂移作动态修正，则可确保吸收

图数据的可靠性。

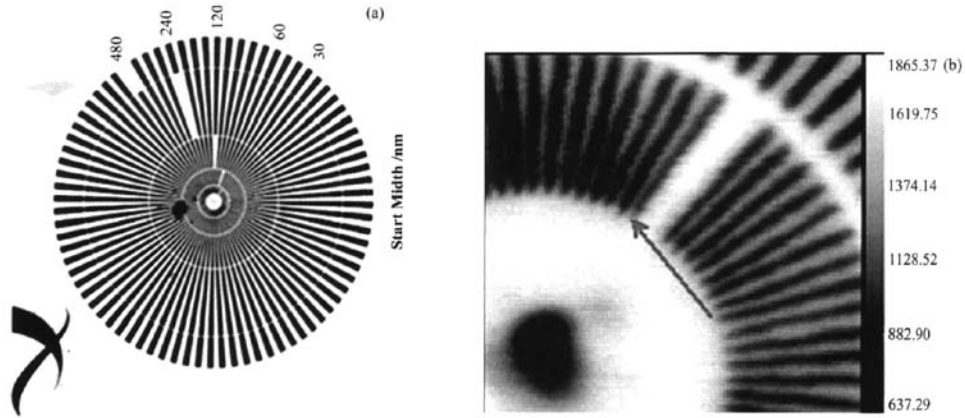


图 1 标准样品的吸收衬度图像(a)和一部分的吸收衬度图像(b)
(b)中箭头所指地方是参照点，各图间比较都以该点为基准，得到位置漂移
Fig.1 STXM images (a), and a part of the images (b), of a standard sample. The arrowed position is the reference point from which the image position drifts are calculated.

1.3 实验结果和分析

图 2 为一组 832—907 eV(对应于不同 z 轴位置) X 射线扫描标准样品的吸收图，步长 5 eV。图中明显可见，样品沿 z 轴移动过程中在 x,y 平面上确实存在漂移。激光干涉仪测得样品扫描过程中的具体位置如表 1。表中 SZ 是样品沿 z 轴移动过程中 z 轴上的坐标位置，XF 是二维扫描时样品在 x 方向的漂移量，YF 是在 y 方向上的漂移量。用 slope 函数计算这些数据点的线性回归拟合方程的斜率 dx/dz 和 dy/dz 。slope 函数返回的是由这些数据点拟合得到的直线方程的斜率(即变化率)，具体表达式为：

$$k = \frac{n \sum xy - (\sum x)(\sum y)}{n \sum x^2 - (\sum x)^2} \tag{1}$$

式中， n 是参数个数， x 和 y 是样本平均值 Average(known_x's)和 Average(known_y's)。具体形式是 SLOPE(known_y's, known_x's)^[7]，其中 known_x's 是样品在 z 方向位置数据的集合，known_y's 是样品在 x 或 y 方向上漂移量数据的集合。

把表 1 数据代入公式(2)和(3)求出样品沿 z 方向移动过程中在 x,y 方向的漂移率：

$$dx/dz = \text{slope}[XF(1:16), SZ(1:16)] = 0.001268 \tag{2}$$

$$dy/dz = \text{slope}[YF(1:16), SZ(1:16)] = 0.004008 \tag{3}$$

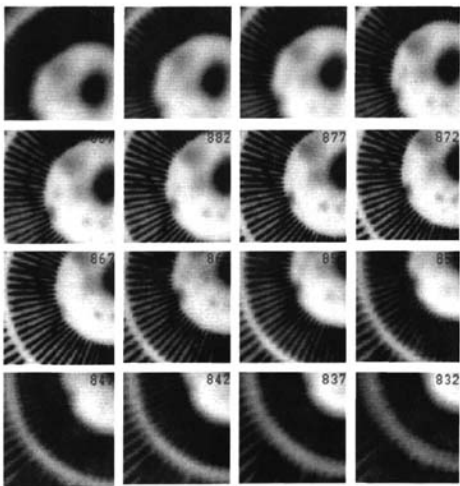


图 2 832—907 eV X 射线(z 轴不同位置处)扫描标准样品的吸收衬度图(无漂移修正)
Fig.2 STXM images by X-rays of 832—907 eV, before calibration with the laser interferometer.

slope 函数中 known_y's 是实验中实际测得样品在 z 轴运动过程中不同位置对应的漂移量，其本身是条曲线，由无数点依次相连，相对曲线每一点都对应一个斜率，随曲线延伸变化，每一点的斜率都不同，slope 的作用就是把每一点的斜率作为新曲线的值，构成一条新曲线，即样品在 z 轴移动过程中 y 方向的漂移规律。然后把上述得到的样品在 x,y 方向上的漂移率用到样品移动中，对样品漂移动态修正。在能量 832—907 eV 内重复前面实验，能量步长取 5 eV，结果如图 3。

表 1 样品位置在 x,y 方向上相对参照点的漂移数据
Table 1 The drift data of STXM images relative to the reference point in x and y direction.

Energy /eV	SZ / μm	XF / μm	YF / μm
832	-2331.80	1.71362	1.32317
837	-2307.60	1.76744	1.36941
842	-2283.20	1.78244	1.47564
847	-2258.55	1.85868	1.56811
852	-2234.55	1.86503	1.68441
857	-2210.45	1.87632	1.76682
862	-2186.15	1.91126	1.87306
867	-2162.10	1.89503	2.01053
872	-2138.50	1.92009	2.08800
877	-2113.95	1.98256	2.19671
882	-2089.90	2.02368	2.28547
887	-2065.55	2.05368	2.37177
892	-2041.10	2.10997	2.46177
897	-2016.80	2.12744	2.55177
902	-1992.60	2.18621	2.64177
907	-1968.50	2.18497	2.72930

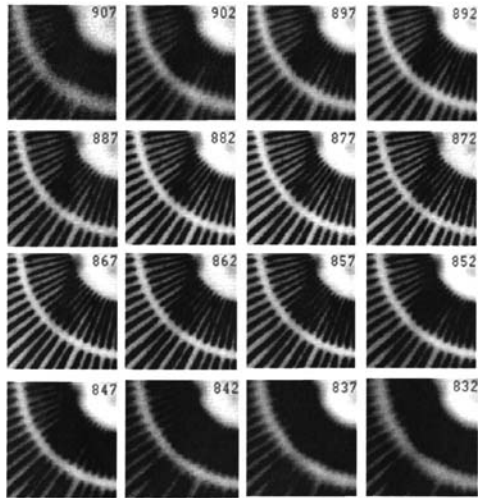


图 3 加入动态修正后重复实验步骤得到的吸收图
Fig.3 The STXM images calibrated dynamically in the scanning process using the calculated drift rates.

由图 3，通过激光干涉仪定位及扫描过程动态校正后，样品图像在 x,y 方向上漂移已很大程度上被消除，但具体的实验扫描出来的两幅或多幅图像间还存在一定程度的漂移，堆栈图像间还不十分匹配，单独扫描两幅图像有时会有几十个像素点的漂移，如不校准仍会严重影响后续数据分析的正确性，因此还需用软件对各幅吸收图像进一步配准。

2 用软件对图像漂移校正

2.1 图像配准

图像配准是将不同时间、不同传感器(成像设备)

或不同条件下(天候、照度、摄像位置和角度等)获取的两幅或多幅图像进行匹配、对准和叠加，已广泛应用于遥感数据分析、计算机视觉、图像处理等领域^[8]。现在常用的图像配准方法，有基于特征和基于统计的图像配准^[9]，前者提取图像信息的特征并以这些特征为模型配准，图像的特征点远少于图像的像素点，配准过程的计算量就大为减少，但特征提取的计算代价较大，也不便实时应用；后者是指最大互信息的图像配准方法，与前者相比，其突出优点是鲁棒性(robustness)好、配准精度高、人工干预少^[10]。基于互信息的图像配准，是用两幅图像的联合概率分布与完全独立时的概率分布的广义距离来估计互信息。理论上，上述两法均适用于 STXM 图像配准。实际应用中，STXM 实验通常在感兴趣元素吸收边附近能量上对样品扫描，各图像衬度差别有可能较大，在能量扫描范围不大情况下，基于统计的两幅图相关性最大化的图像配准方法可满足要求；但若能量扫描范围大，或两幅图衬度差别甚大，则基于统计相关性的配准方法有可能失效。鉴此，我们发展了一种新的基于图像分窗口相关的数字图像自动配准方法，可对吸收衬度差别非常大的两幅或多幅图准确配准。

2.2 整体相关最大化图像配准方法

根据 STXM 工作模式和数据特征的具体情况，用基于统计的两幅图相关性最大化图像配准方法。由于扫描两幅图像的时间间隔很短，实验站的光强变化很小，即使光强变化很大，也可通过计算像素点的光密度对数据归一化处理，认为环境无变化，只有能量变化，导致样品不同部位的吸收发生变化。这些都会反映在数字图像上，因此用两幅图像的相关性来进行图像配准。两幅图的相关性用互相关(CC)表示^[11]：

$$CC = \frac{\sum_{i,j} [x(i,j) - m_x][y(i - xshift, j - yshift) - m_y]}{\sqrt{\sum_{i,j} [x(i,j) - m_x]^2} \sqrt{\sum_{i,j} [y(i - xshift, j - yshift) - m_y]^2}} \tag{4}$$

将此法应用到测量苔藓植物颈部细胞切片中的锰元素分布实验中结果见图 4。其中，图 4(a)和(b)是在锰元素吸收边能量 $E_1=640.3$ eV 和吸收边前能量 $E_2=638.6$ eV 测得的吸收图像，都未经过图像漂移校正，图像尺寸 $20\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$ ，步长 $50\ \text{nm}$ ，像素数目 401×401 。把图 4(b)作参照图，用基于统计

的两幅图相关性最大化图像配准算法计算得出图 4(a)相对(b)的漂移量为 $(-3,1)$,即把图 4(a)向 x 负方向和 y 正方向平移 3 和 1 个像素点,得到图 4(c)。把图 4(c)平移的部分和图 4(b)与之对应的区域都裁

掉,得到对齐的公共区域。图 4(d)和(e)是与(a)和(b)分别对应的、经漂移校正及裁剪的两幅图。裁剪后两幅图大小都是 $19.85\ \mu\text{m} \times 19.95\ \mu\text{m}$, 步长 $50\ \text{nm}$, 像素数目为 398×400 。

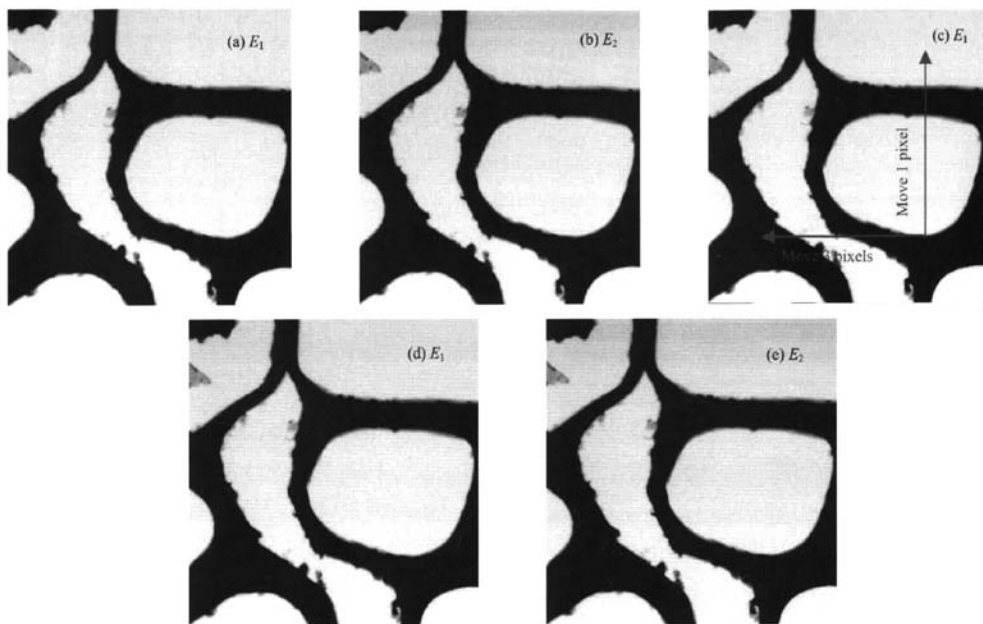


图 4 用两幅图相关性最大化方法的图像漂移校正过程
(a) E_1 处校正前图像; (b) E_2 处校正前图像; (c) 根据计算出漂移参数对图像(a)平移的结果;
(d) 图像(a)配准后公共区域; (e) 图像(b)配准后公共区域

Fig.4 Image registration process using global correlation maximizing technique.

(a) before calibration at $E_1=640.3\ \text{eV}$; (b) before calibration at $E_2=638.6\ \text{eV}$; (c) pixel-moved Image (a) based on the drift parameters;
(d) the registered area of Image (a); (e) the registered area of Image (b)

以上结果表明,基于统计的两幅图相关性最大化的图像配准方法在扫描能量范围不大情况下可满足图像配准的要求。

2.3 分窗口相关最大化图像配准方法

基于两幅图相关性最大化的图像配准方法在 STXM 图像配准实际应用中有时会失效,特别是成像特性差异较大的图像间配准。为此,综合基于灰度和基于特征的两类配准方法,我们发展了一种基于图像分窗口相关的数字图像自动配准方法^[12],它结合了 STXM 具体特点,可对 STXM 系列图像配准。

此方法是将数字图像看作一个二维灰度分布函数,选取两幅或多幅图中衬度最高的一幅图像作参照图,其它的以它为参照图配准。在 STXM 中一般选取感兴趣元素吸收边能量处的扫描图像作参照图,然后在参照图上选择一个局部区域作临时窗口,此窗口也可看作是特征配准方法中的一个特征。在另一目标图上寻找与其对应最相似的窗口位

置(移动窗口)。STXM 图像漂移只发生在垂直光路方向的 x,y 平面内,没有旋转,空间分辨率也固定,所以窗口配准只需窗口(象元)在 x 和 y 方向上的变化 (n,m) ,两参数的基本单位是一个像素点。具体算法处理过程如下:

(1) 首先定义窗口大小 $W \times W$, 其中 W 单位为像素点, W 大小能满足将参照图划分为整数个窗口的条件。然后将参照图及目标图按该尺寸划分成若干个临时窗口,同时给出目标图像上各窗口的起始坐标值 (x_0, y_0) 和坐标移动范围 $\pm r$ 。 r 为像素数目^[13], 实际应用中 r 一般取 30。

(2) 移动目标图像上一个分窗口的位置并计算它与参照图像上对应窗口的相关值,再用循环比较计算方法搜寻一定范围内最大相关值的位置,并记录该位置相对参照图像上对应窗口位置的移动参数(漂移量 $xshift$ 和 $yshift$)。

(3) 移动并计算下一窗口对应相关值最大时的窗口位置,直至完成所有分窗口匹配,并产生包括

所有分窗口位置移动参数的配准文件。此处结合 STXM 图像的特点把各分离窗口作为独立窗口分别匹配。计算相关值采用公式类似求两幅图像的互相关(CC)公式。

(4) 计算所有参考窗和移动窗间的相对位移参数，找出相同漂移量最多的漂移值，此即图像的漂移。

将该方法应用于 STXM 吸收衬度图像，两幅图相关性很小时也能很好地配准，如图 5。其中图 5(a)和(b)是未配准的 STXM 扫描得到的原始图像，两幅图的位置发生了变化，相关性很差。用基于分窗口相关的数字图像自动配准方法算出图 5(b)相对于(a)的漂移量为(3,7)，把(b)向 x 和 y 正方向平移 3 和 7

个像素点，得到图 5(c)。将目标图像按照计算出来的漂移量平移后，把平移的那部分在两幅图的对应区域都裁掉，保留配准的那部分共同区域，得到图 5(d)和(e)。两幅图裁剪后的大小都是 $2.85\text{ }\mu\text{m}\times 2.6\text{ }\mu\text{m}$ ，空间步长是 25 nm ，像素数目为 115×114 。这样，就可对这两幅 STXM 图像进行实验数据处理。

该方法能对 STXM 图像进行较精确地配准，很适合 STXM 的图像处理。此算法在 STXM 图像处理中准确、有效，能解决成像差异较大的图像间的配准问题，有效消除图像漂移的影响，特别是消除了双能衬度图像中的浮雕现象，确保了后续实验数据处理的准确性。

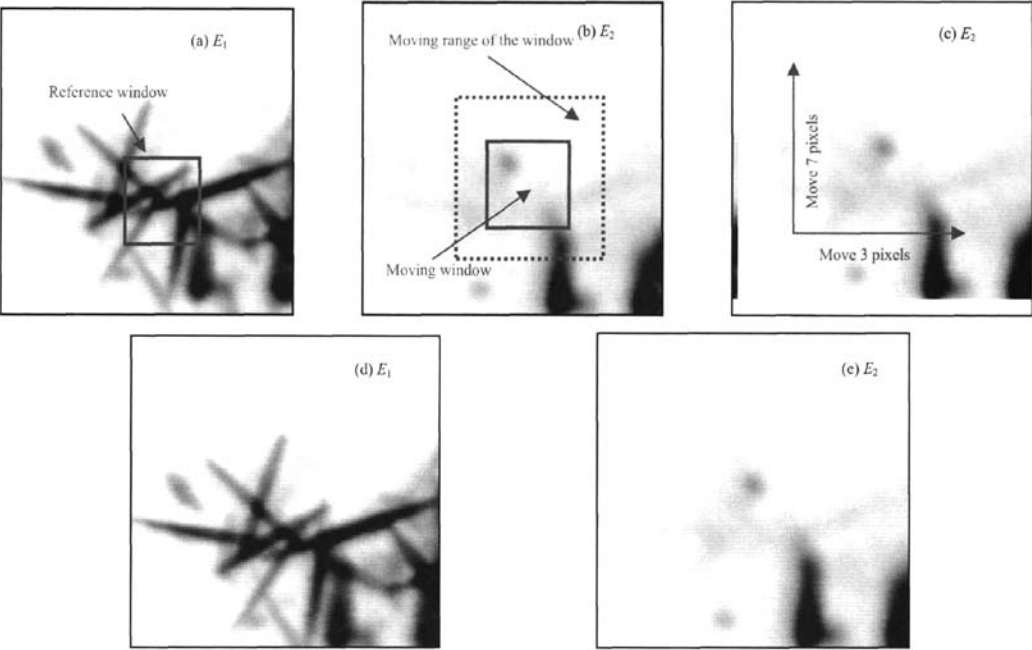


图 5 用分窗口相关配准方法的图像配准过程
(a) E_1 处校正前图像; (b) E_2 处校正前图像; (c) 根据计算出漂移参数对(a)平移的结果;
(d) (a)配准后公共区域; (e) (b)配准后公共区域

Fig.5 Image registration process using multi-window cross correlation technique.
(a) before calibration at $E_1=707.2\text{ eV}$; (b) before calibration at $E_2=703.9\text{ eV}$; (c) pixe-movedl Image (a) based on the drift parameters;
(d) the registration area of Image (a); (e) the registration area of Image (b)

3 结论

本文从硬件和软件两方面探讨了STXM对样品扫描出来的两幅或多幅图像空间位置漂移的校正问题。硬件上，通过激光干涉仪对标准样品的精确定位及用slope函数计算得到样品在扫描过程中漂移的规律，从而对样品的位置漂移进行动态修正，实验结果表明用硬件对样品位置动态校正切实可行。

软件上，基于统计的两幅图相关性最大化图像配准方法对大部分图像都能很好配准，但也有失效的时候，因此用遥感领域图像配准中的基于图像分窗口相关性的配准方法基本理论，发展出一种适用于STXM扫描图像基于图像分窗口相关的数字图像自动配准方法。对两幅或多幅STXM图像进行配准时，该方法对每一子区的自动相关匹配来达到对整幅图像的精确配准。具体处理结果表明该方法能对

STXM图像精确地配准,且能解决成像差异较大图像间的配准问题,有效消除图像漂移的影响,特别是消除了双能衬度图像中的浮雕现象,精度可达小于1个像素尺度。实际上此方法可达亚像素级配准,但目前STXM只针对像素级计算,所以算法上采用限定在亚像素级范围内最多的漂移量取整作为配准参数。图像实际漂移量不仅像素级,有些是亚像素级,该方法确保了后续实验数据处理的精度。

参考文献

- 1 Chao W I, Harteneck B D, Liddi E J A, *et al.* *Nature*, 2005, **435**: 1210–1213
- 2 Kilcoyne A L D, Tylliszczak T, Steele W F, *et al.* *J Synchrotron Radiat*, 2003, **10**: 125–136
- 3 Keller Y, Averbuch A, Israeli M. *IEEE Trans Image Process*, 2005, **14**(1): 12–22
- 4 Siggelkow S. Feature histograms for content-based image retrieval. Freiburg: Albert Ludwigs University of Freiburg, 2002
- 5 Mikolajczyk K, Schmid C. An affine invariant interest point detector. *Proceedings of the 7th European Conference on Computer Vision*
- 6 杨晓敏, 吴 炜, 卿 胤波, 等. 光学精密工程, 2009, **17**(9): 2276–2282
YANG Xiaomin, WU Wei, QING Linbo, *et al.* *Opt Precis Eng*, 2009, **17**(9): 2276–2282
- 7 Hohenwarter M, Preiner J. *J Online Math Appl*, 2007, **7**: Article ID 1574
- 8 Zitov'a B, Flusser J. *Image Vision Comput*, 2003, **21**: 977–1000
- 9 吴 畏, 赵文杰, 刘 辉. 红外, 2009, **30**(10): 37–43
WU Wei, ZHAO Wenjie, LIU Hui. *Infrared*, 2009, **30**(10): 37–43
- 10 Viola P, Wells W M. *Int J Comput Vision*, 1997, **24**(2): 137–154
- 11 Pratt W K. *Digital image processing*. 2nd ed., New York: Wiley, 1991
- 12 李 震, 范湘涛, 施建成. 中国图像图形学报, 2001, **6A**(2): 129–132
LI Zhen, FAN Xiangtao, SHI Jiancheng. *J Image Graphics*, 2001, **6A**(2): 129–132
- 13 沈 楠, 曹计昌. 计算机工程与应用, 2004, **40**(3): 75–78
SHEN Nan, CAO Jicang. *Comput Eng Appl*, 2004, **40**(3): 75–78

Accurate drift calibration of soft X-ray microspectroscopy images at SSRF

ZHANG Xiangzhi XU Zijian ZHEN Xiangjun WANG Yong GUO Zhi YAN Rui
TAI Renzhong

(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

Abstract The BL08U soft X-ray microspectroscopy station of Shanghai Synchrotron Radiation Facility has been built and open to users successfully. The spatial resolution is about 30 nm. Due to limitation of mechanical precision and errors in repeatability, the drift of scanned images is inevitable at different scan energies. This gives rise to serious errors and data analysis inaccuracy. Therefore, the images scanned by X-rays at different-energies should be registered before data analysis. For solving the problem, efforts have been made in both hardware and software. A laser interferometer is used to precisely detect the sample position and measure its position drift, and the drift rates can be calculated with a standard sample (pattern) using the slope function. The drift rates are used for dynamic calibration of the sample stage position, which is initiated automatically once there is a sample moving. To a large extent, this eliminates the position drifts. On the other hand, a multi-window cross correlation technique to automatically register the scanned images has been developed. The result shows that the technique can reach a precision of 1 pixel.

Key words Image registration, Multi-window, Correlation function, Laser interferometer, STXM

CLC TP391.4, TP271.7