

# 扫描相干衍射成像中位置误差校正研究进展

张文采<sup>1,2,3</sup> 许子健<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> (中国科学院上海应用物理研究所 上海 201800)

<sup>2</sup> (中国科学院大学 北京 100049)

<sup>3</sup> (中国科学院上海高等研究院 上海同步辐射光源 上海 201204)

**摘要** 作为相干衍射成像技术实现方式中的一种,扫描相干衍射成像在一定程度上克服了传统的相干衍射成像算法收敛速度慢、重建停滞、重建结果不唯一等问题。但是其本身也存在着一些问题,如位置误差、噪声干扰、光源非完全相干、成像耗时长等。其中,位置误差问题是扫描相干衍射成像相对于其他显微成像技术所特有的,显著影响了其成像质量。本文针对这一影响因素,首先介绍了扫描相干衍射成像背景信息以及影响重建质量的各种因素,然后介绍了成像过程中的位置误差校正方法和深度学习在这一方向的应用,以及对于误差校正效果的各种评判方法,最后总结并展望了其未来发展方向。这为扫描相干衍射成像质量提升方法的研究提供了参考,并对其在X射线成像领域的应用具有重要的指导意义。

**关键词** 扫描相干衍射成像, 局部位置误差, 全局位置误差, 深度学习

**中图分类号** TL99

**DOI:** 10.11889/j.1000-3436.2025-0106

**CSTR:** 32195.14.j.JRRRP.1000-3436.2025-0106

**引用该文:**

张文采, 许子健. 扫描相干衍射成像中位置误差校正研究进展[J]. 辐射研究与辐射工艺学报, 2026, 44(4): 040102. DOI: 10.11889/j.1000-3436.2025-0106.

ZHANG Wencai, XU Zijian. Research progress in position error correction for scanning coherent diffractive imaging[J]. Journal of Radiation Research and Radiation Processing, 2026, 44(4): 040102. DOI: 10.11889/j.1000-3436.2025-0106.



## Research progress in position error correction for scanning coherent diffractive imaging

ZHANG Wencai<sup>1,2,3</sup> XU Zijian<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

<sup>2</sup>(University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

<sup>3</sup>(Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

**ABSTRACT** As an implementation approach for coherent diffraction imaging (CDI) technology, scanning

基金资助: 国家重点研发计划(2022YFA1603702, 2021YFA1601001)和国家自然科学基金(12335019, 11875316)

第一作者: 张文采, 男, 2026年于中国科学院上海应用物理所获硕士学位, 研究方向: 同步辐射高分辨率成像

通信作者: 许子健, E-mail: xuzj@sari.ac.cn

收稿日期: 初稿 2025-11-16; 修回 2026-01-06

Supported by National Key Research and Development Program of China (2022YFA1603702, 2021YFA1601001) and the National Natural Science Foundation of China (12335019, 11875316)

First author: ZHANG Wencai (male) obtained his master's degree from Shanghai Institute of Applied Physics, China Academy of Sciences in 2026, focusing on high-resolution synchrotron radiation imaging

Corresponding author: XU Zijian, E-mail: xuzj@sari.ac.cn

Received 16 November 2025; accepted 06 January 2026

coherent diffraction imaging (SCDI) has partially overcome the limitations of traditional CDI algorithms, such as slow convergence rate, reconstruction stagnation, and non-unique reconstruction solutions. However, it still suffers from inherent drawbacks and challenges, including position errors, noise interference, incomplete source coherence, and long imaging duration. Among these issues, position errors, which are unique to SCDI compared with other microscopic imaging techniques, significantly degrade the final imaging quality. Focusing on this critical factor, this paper first presents the research background of SCDI and summarizes various factors affecting reconstruction quality. Subsequently, it elaborates on position error correction methods in the imaging workflow, the application of deep learning in this field, and various evaluation methods for error correction performance. Finally, this paper summarizes the current progress and prospects the future development trends. This work provides a reference for exploring imaging quality improvement methods of SCDI, and is of important guiding significance for its applications in X-ray imaging.

**KEYWORDS** Scanning coherent diffraction imaging, Local position error, Global position error, Deep learning  
**CLC** TL99

2004年Faulkner等<sup>[1]</sup>发表了叠层成像迭代引擎(Ptychographic iterative engine, PIE)算法,扫描相干衍射成像(Ptychography)进入了一个新的发展,PIE算法将迭代投影思想应用到扫描衍射数据的处理上。该算法是将样品在垂直于光轴的方向做阵列扫描,并用电荷耦合器件(Charge-coupled device, CCD)记录下待测物体在每个位置处所形成的衍射光斑强度,然后利用相应的重建算法计算出照明光和样品的复振幅分布,能够克服经典相干衍射成像(Coherent diffraction imaging, CDI)的大部分缺点。PIE算法是将传统的CDI和扫描成像技术相结合,因此能以衍射极限的分辨率实现超大视场的高精度成像<sup>[2]</sup>。该技术早期研究主要停留在数值模拟验证阶段,直到2006年Rodenburg等<sup>[3]</sup>第一次通过光学实验验证了其方法的可行性,目前这项技术在X射线、可见光、电子束等领域,均已经得到了广泛的应用。但是在X射线领域中,特别是由同步辐射产生的X射线,为了实现CDI,其光子能量范围一般控制在几十电子伏特至数十千电子伏特之间。在这种能量范围内,Ptychography为了达到理论上的重建质量以及高分辨率成像效果,还需要满足一些条件,但在实际实验中这些条件往往难以完全实现。首先,常见应用的相位恢复算法对样品的厚度都有一定限制,假设待测样品的厚度可以忽略不计,出射波函数被简化为探针函数和样品透射函数的乘积。然而,这种假设并不适用于具有一定厚度的样品,尤其是当样品厚度较大时,这种简化会导致重建结果不准确。其次,算法对光源的相干性也有严格要求,与所有CDI算法一样,要求照

明光必须是完全相干的。然而,对于X射线和电子束光源来说,完全相干的条件很难满足,因此如何在部分相干条件下实现快速重建是该领域的研究热点之一<sup>[4]</sup>。此外,在数据记录过程中,需要记录一系列的衍射光斑,这会导致长时间的数据采集,进而对光源和待测物体的稳定性提出了更高的要求。因此,如何减少数据记录时间,甚至实现单次曝光,Ptychography是一个重要的研究方向<sup>[5-6]</sup>,其他的影响因素还包括中心挡板<sup>[7]</sup>和光斑的重叠性<sup>[8]</sup>等也会影响最终的重建质量。此外,还需考虑位置误差问题,在数据采集过程中,样品通常由两轴线性平台驱动,平移台的移动精度以及物平面和记录平面之间的相对倾斜是探针位置误差的两个主要来源。其他较小的负面因素来自系统的不稳定性,包括探针扫描线圈的滞后、辐射的热效应、电机由于高温而出现的热漂移以及X射线源的不稳定性等问题<sup>[9]</sup>。位置误差问题是该技术相对于其他成像方式所特有的、最具代表性的影响因素。对于迭代的相位恢复算法而言,通常需要获得准确的探针或者样品位置(依据运动相对性,两者是等价的),但在实际中由于前面所述的一些因素,无法获取足够精确的位置,因此,需要设计能够自动修正探针位置的算法或者通过其他方法修复这种误差问题所带来的影响。

Hue等<sup>[10]</sup>通过模拟实验得出,重建质量受探针位置精度的影响极大,在大多数情况下,探针位置误差会产生一种网格图案,主要影响振幅(不规则、倾斜和漂移情况),如图1所示,展示了各种位置误差对于重建的影响。Maiden等<sup>[11]</sup>通过模拟与实验证明,探测器与样品之间的距离误差

以及探测器等系统中组件角度发生倾斜,会造成 Ptychography 的重建质量下降。根据对衍射花样影响的数量,这些误差可以大致分为局部位置误差

和全局位置误差两大类。目前,针对这两类误差已有较多的相关研究,本文将对这些误差处理进行系统梳理和分析,并展望其未来发展方向。

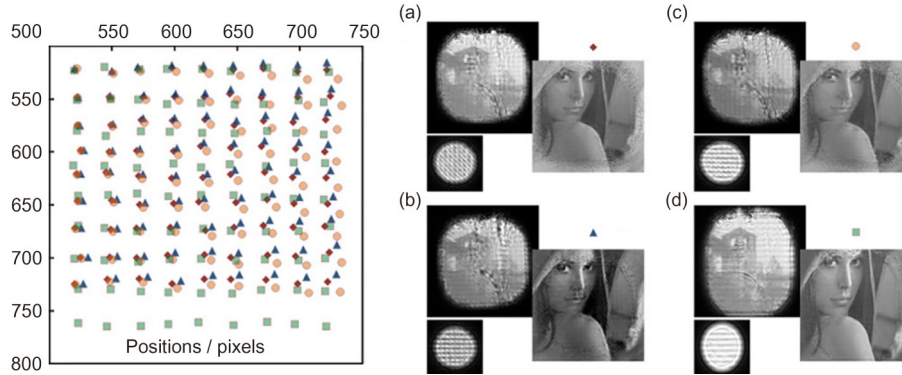


图1 不同探针位置误差对样品重建的影响<sup>[10]</sup>。

(a)探针位置存在 $\pm 3$ 像素的不规则随机误差;(b)由于逆时针倾斜 $2^\circ$ 产生的误差;(c)每个位置在 $x+y$ 方向上有0.17像素漂移导致的误差;(d)最后一种情况是整体位置集在垂直方向上扩展20%后的探针位置

Fig.1 Influence of different probe position errors on sample reconstruction<sup>[10]</sup>.

(a) there are irregular random errors of  $\pm 3$  pixels in the probe positions; (b) the errors are due to a  $2^\circ$  counter-clockwise tilt; (c) the errors are caused by a 0.17 - pixel drift in the  $x + y$  direction at each position; (d) in the last case, the probe positions are obtained after vertically expanding the entire position set by 20%

## 1 位置误差校正

### 1.1 局部位置误差

对于局部位置误差,这种常常是电机运动的惯性或者精准度不够而导致的误差,一般情况下当位置误差大于 $2/3$ 扫描步长时,就会明显地影响其最终重建质量<sup>[11]</sup>。即便是电机移动准确无误,地面轻微抖动或者样品台高频轻微抖动,也会导致衍射花样出现模糊,这也可看作是一种局部位置误差。同时这类误差有可能具有累积效应,即出现一次误差后,后续所有的扫描位置都会存在误差,进而造成全局性的位置误差问题,从而导致所有的衍射图案都会出现问题。目前已发展出各种相关局部位置误差校正算法,如非线性优化算法(Nonlinear optimization approach, NL optimization)<sup>[12]</sup>、模拟退火算法(pcPIE)<sup>[11]</sup>、互相关算法<sup>[13]</sup>、遗传算法<sup>[14]</sup>、共轭梯度下降算法<sup>[15]</sup>等。位置校正算法的目标是全局最优,避免局部最优化的情况出现,这样可以避免探针位置的微小偏差被忽略以及位置误差累积效应的影响,从而确保所有探针位置的误差都被最小化,进而获得高精度的重建图像。下面将对一些典型的误差校正方法进行一个详细的介绍。

#### 1.1.1 常规的局部位置误差

一般是由于电机问题而造成的位置误差,2008年 Guizar-Sicairos 等<sup>[12]</sup>针对这类型的局部位置误差问题,提出了NL optimization算法,它是一种非线性优化算法,也是一种相位恢复算法。该算法首次对相位恢复过程中出现的位置误差问题进行了校正,并对样品函数与探针函数进行联合优化。在系统参数不准确或存在噪声的情况下,相较于PIE算法,这种非线性优化算法展现出更优的重建效果。该方法的重要特点是不再将实验给定的扫描位置视为绝对准确的数值,而是在重建过程中根据全部衍射数据对其进行修正。为评价模型预测结果与实验数据的一致性,定义了一个均方误差度量函数,第 $n$ 个扫描位置如式(1)。

$$\varepsilon = \sum_n \sum_q W_n(q) \left\{ \left[ |\hat{F}_n(q)|^2 + \delta \right]^\gamma - \left[ I_n(q) + \delta \right]^\gamma \right\}^2 \quad (1)$$

式中: $q$ 为衍射平面的坐标, $I_n(q)$ 为实验记录的衍射强度, $W_n(q)$ 为权重函数,远场的波函数 $\hat{F}_n(q)$ , $\gamma=0.5$ 适用于绝大多数实验情况下, $\gamma \approx 0$ 适用于极弱信号时, $\gamma$ 的使用必须与 $\delta$ 同时考虑才能得到一个最优的结果。对于中心挡板、坏像素或无效探测区域,可将相应权重设为零。

算法通过不断减小 $\varepsilon$ ，对各种需要优化的参数进行迭代更新。样品、探针和扫描位置的具体解析梯度及其推导见文献 [12]，此处不再逐项展开。实际计算时可先固定部分系统参数获得较稳定的样品初值，再逐步开放探针和位置变量进行联合优化，以减弱多个未知量同时变化造成的参数耦合。与PIE按照扫描位置依次更新样品的方式不同，该方法以全部衍射测量共同构成目标函数。因而当探针模型或扫描位置存在一定偏差时，多个扫描位置之间的重叠可以为位置修正提供信息，并降低单幅噪声数据对更新结果的影响。研究表明在照明分布或横向位移估计不准确时，联合优化获得的重建结果通常优于直接采用错误参数的

PIE重建。

通过图2所展示的对于样品重建结果对比发现，NL optimization算法相对于PIE算法对于存在各种参数误差，如衍射距离不准确、孔径大小未知、扫描位置不准确、有大量噪声存在的情况下，重建的效果更好。但是该方法也具有一定局限性，样品、探针和全部扫描坐标的联合估计会显著增加变量数量和单次迭代的计算量；同时，其目标函数一般为非凸函数，最终结果仍可能受到初值、扫描重叠率、噪声水平和误差模型准确性的影响。因此，该方法不能被表述为能够校正“任意形式”的实验误差，而只能处理已被合理参数化并纳入前向模型的未知量。

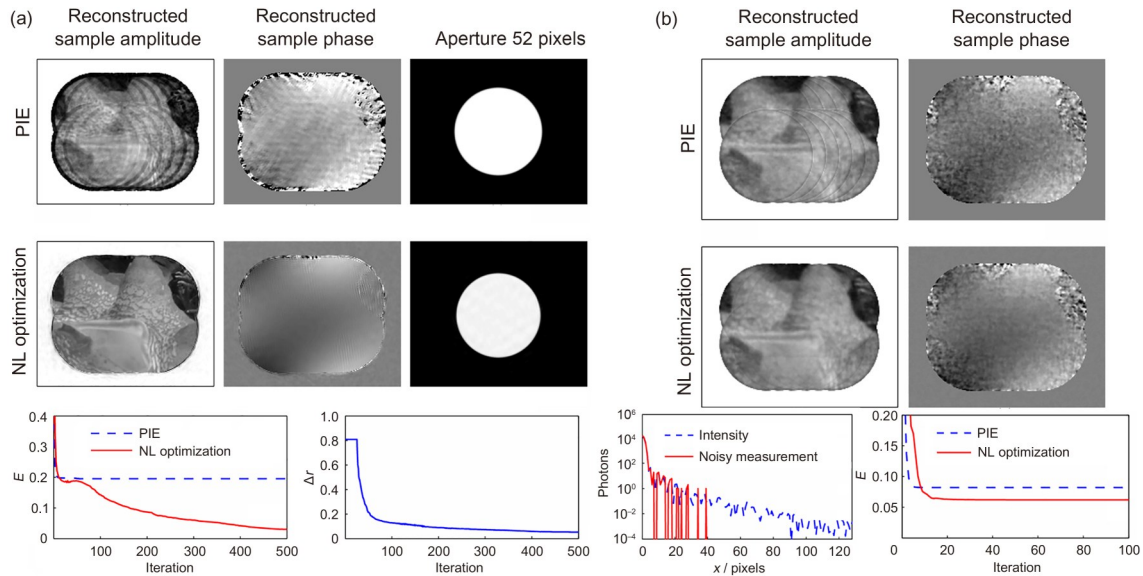


图2 PIE算法与NL optimization算法重建的结果对比<sup>[12]</sup>：

(a)分别使用两种算法在改变圆孔大小(相当于衍射距离不准确)情况下重建样品的结果,以及位移不准确的情况下其误差随着迭代次数变化曲线;(b)在有噪声的情况下分别使用两种算法对样品重建效果进行一个对比

Fig.2 Comparison of the reconstruction results between the PIE algorithm and the NL optimization algorithm<sup>[12]</sup>:

(a) the reconstruction results of the sample using two different algorithms when the size of the circular aperture is varied (equivalent to an inaccurate diffraction distance), and the error variation curves with the number of iterations when the displacement is inaccurate; (b) comparing the sample reconstruction effects of the two algorithms respectively in the presence of noise

2012年Maiden等<sup>[11]</sup>提出了一种基于模拟退火算法的位置校正算法，称为位置校正叠层成像迭代引擎 (pcPIE)，该方法使用常规收集的叠层成像数据，在实际实验中稳健地校正测量样品位置误差，显著提高了所得图像的分辨率和质量。该方法在每个扫描位置附近设置若干随机候选坐标，通过比较不同候选位置对应的衍射误差，确定更符合实验数据的位置估计，与 (Extended ptychographical iterative engine, ePIE) 算法<sup>[16]</sup> 本身相比通常仅使生成图像所需的计算时间增加75%~210% (取决于迭代次数和使用的参数)。图3

展示了其算法流程图，设第 $j$ 个扫描位置为 $\mathbf{R}_j$ ，位置校正量为 $\mathbf{C}_j$ 。根据当前样品函数 $O(\mathbf{r})$ 、探针函数 $P(\mathbf{r})$ 及位置坐标 $\mathbf{r}$ ，由式 (2) 计算基准出射波 $\psi_0(\mathbf{r})$ 。

$$\psi_0(\mathbf{r}) = O(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \mathbf{C}_j))P(\mathbf{r}) \quad (2)$$

在当前位置附近生成 $M$ 个 ( $m = 1, \dots, M$ ) 随机试探位移，并利用搜索值 $c$ 控制候选位置的分布范围，各候选位置对应的出射波由式 (3) 计算， $\Delta_m$ 是一个在 $\pm 1$ 之间的两个随机数的向量。迭代初期可采用较大的搜索值，随后逐步减小 $c$ ，以实现由粗略搜索到精细校正的过渡。

$$\psi_m(\mathbf{r}) = O(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \mathbf{C}_j + c\Delta_m))P(\mathbf{r}) \quad (3)$$

将基准出射波和候选出射波传播至探测器平面，见式 (4)。

$$\Psi_m(\mathbf{u}) = F[\psi_m], m = 0, \dots, M \quad (4)$$

式中：F是傅里叶变换操作，随后根据式 (5) 比较计算衍射振幅与实验测量振幅之间的差异。

$$E(m) = \sum_u \|\Psi_m(\mathbf{u})\| - \sqrt{I_j(\mathbf{u})} \|^2 \quad (5)$$

之后通过式 (6) 选取误差最小的候选位置。

$$n = \arg \min_m E(m) \quad (6)$$

确定最优候选位置后在探测器平面施加实验振幅约束 ( $\Psi_n(\mathbf{u})$  的振幅被  $\sqrt{I_j(\mathbf{u})}$  替换)，并按照 (7) 式反向传播得到更新后的物平面出射波。

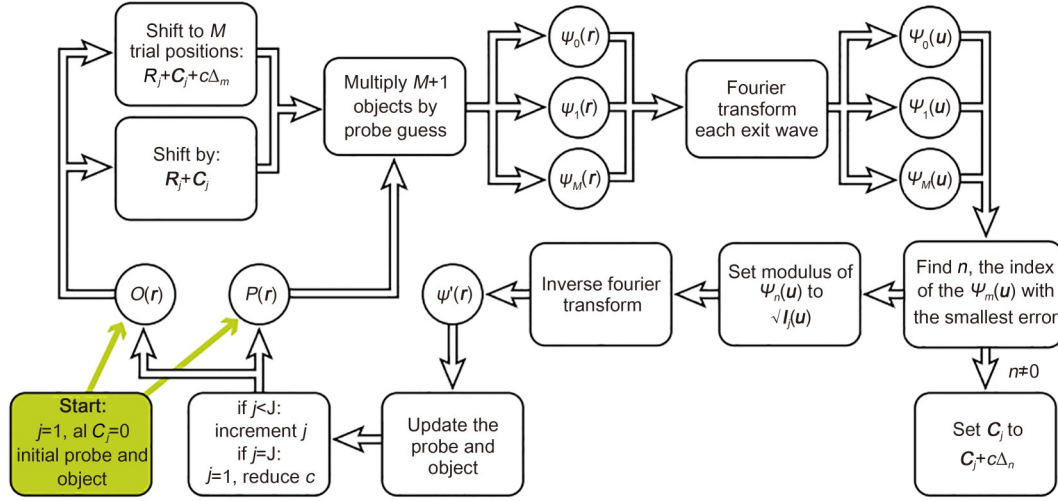


图3 模拟退火算法位置校正算法的流程图<sup>[11]</sup>

Fig.3 A schematic representation of the position-correcting algorithm<sup>[11]</sup>

$$\psi'(\mathbf{r}) = F^{-1} \left[ \frac{\sqrt{I_j(\mathbf{u})} \Psi_n(\mathbf{u})}{|\Psi_n(\mathbf{u})|} \right] \quad (7)$$

当某一随机候选位置的误差低于基准位置时，根据式 (8) 更新该扫描点的位置修正量；否则保留当前的位置估计。

$$\mathbf{C}_j \leftarrow \mathbf{C}_j + c\Delta_n \quad (8)$$

完成位置选择后，利用施加振幅约束前后的出射波差值，按照式 (9) 更新样品函数和探针函数 ( $\alpha$  和  $\beta$  用于改善收敛)。依次处理全部扫描位置即可完成一轮迭代，上一轮得到的位置修正量将作为下一轮局部搜索的起点。

$$\begin{aligned} O(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \mathbf{C}_j)) &\leftarrow O(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \mathbf{C}_j)) + \\ &\alpha \frac{P^*(\mathbf{r})}{|P(\mathbf{r})|_{\max}^2} (\psi'(\mathbf{r}) - \psi_n(\mathbf{r})) \\ P(\mathbf{r}) &\leftarrow P(\mathbf{r}) + \beta \frac{O^*(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \mathbf{C}_j))}{|O(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \mathbf{C}_j))|_{\max}^2} (\psi'(\mathbf{r}) - \\ &\psi_n(\mathbf{r})) \end{aligned} \quad (9)$$

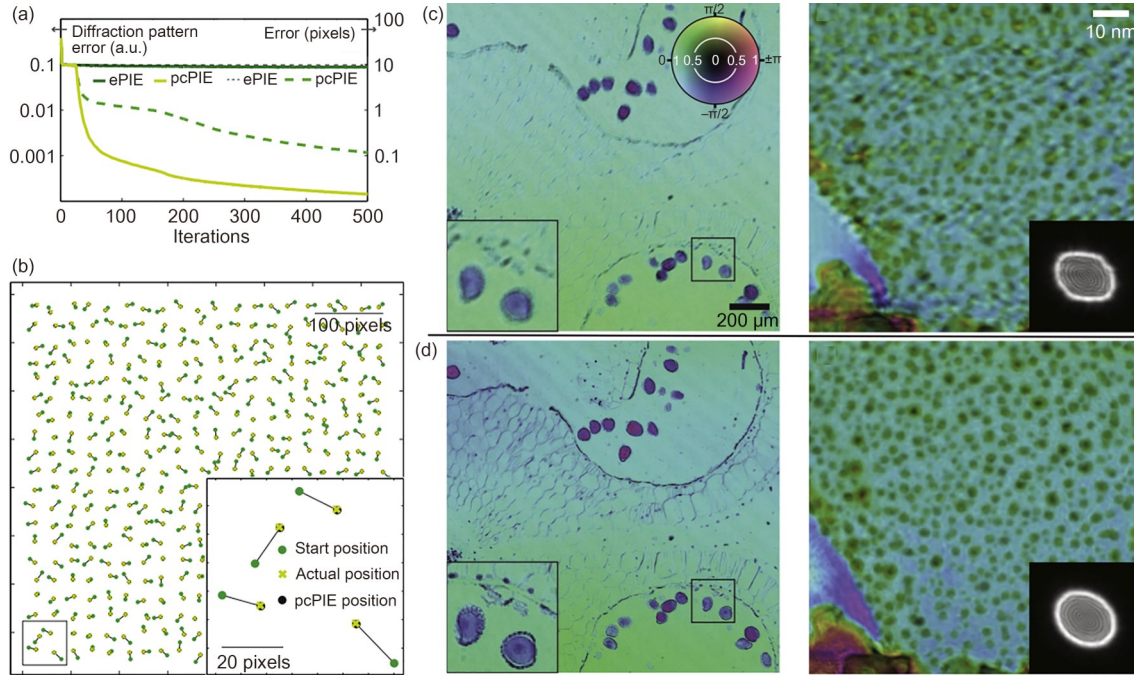
图4显示了pcPIE算法与ePIE运行效果的对比图，可以观察到成像质量的提升是明显的，尤其是在存在位置误差的情况下pcPIE算法随着迭代次

数的增加误差不断减小，最终达到一个理想的重建结果。但目前这种模拟退火算法只是校正了一些局部位置误差问题即电机移动的位置误差等，而对于全局误差问题无法进行处理，为了解决这种问题，Maiden等<sup>[11]</sup>对其算法进行了改进，此内容将在后面的全局误差校正部分介绍。

另外就是针对这种电机移动所造成的位置误差，以及数据采集时间较为漫长的问题，Wang等<sup>[17]</sup>提出使用旋转照明代替样品的x-y扫描方式，由于样品始终沿一个方向旋转，可完全消除滞后或回程误差的影响，且由于所有旋转的探针都照射在样品的同一区域，因此用少量的衍射图案就能进行图像重建，对数据采集时间和设备稳定性的要求也相应降低。另外一些研究人员提出使用单次曝光的Ptychography方法<sup>[18-20]</sup>，这种方式避免了电机的影响，有效避免了一些位置误差问题以及数据记录时间较长的问题。但这同时又带来了新的问题，就是各个位置的光斑所接收的光子数量减少，影响最终的成像质量。且光斑阵列的形式会显著降低光斑探测器的有效数值孔径，且相邻两个子衍射光斑之间的弱干涉不可避免，虽然可以通过两两结合的方式弱化该问题带来的影响，

但数值孔径和数据记录速度难以同时兼顾。同时，Ptychography 光路简单的特性也得到了弱化，因此现有方案的测量精度、信噪比和实用性还有待提

升<sup>[21-23]</sup>。目前单次曝光的 Ptychography 技术主要用于可见光领域，对于电子束以及 X 射线领域，由于器件制作工艺的影响，还未能有效地实现这种方法。



**图4** ePIE 算法与 pcPIE 算法重建样品效果对比<sup>[11]</sup>: (a) 在随机位置误差存在的情况下 ePIE 与 pcPIE 随迭代次数的增加运行效果的量化对比; (b) 扫描位置点校正过程; (c) 在存在位置误差的情况下使用 ePIE 算法重建样品结果以及探针振幅, 黑色背景框内是重建的探针振幅; (d) 在存在位置误差的情况下使用 pcPIE 算法重建样品结果, 黑色背景框内是重建的探针振幅

**Fig.4** Comparison of the sample reconstruction effects between the ePIE algorithm and the pcPIE algorithm<sup>[11]</sup>: (a) quantitative comparison of the operating effects of ePIE and pcPIE as the number of iterations increases in the presence of random position errors; (b) correction process of scanning position points; (c) result of sample reconstruction using the ePIE algorithm in the presence of position errors and the probe amplitude. The reconstructed probe amplitude is within the black background frame; (d) result of sample reconstruction using the pcPIE algorithm in the presence of position errors. The reconstructed probe amplitude is within the black background frame

### 1.1.2 特殊的局部位置误差

另一类局部误差来自探测器曝光期间样品受到外界因素的干扰, 如地面轻微抖动, 样品台振动等, 导致样品存在高频的抖动, 从而造成采集到的衍射花样模糊。这种情况下, 即便是扫描位置是正确的, 但是所采集的衍射图案也非相应扫描点的正确衍射图案, 这种情况也可以看作是一种局部位置误差问题。2024 年 Aidukas 等<sup>[24]</sup>提出了一种名为突发式 Ptychography (Burst ptychography) 的方法, 这是一种全新的图像采集和重建变体, 如图 5 所示。在 Ptychography 成像过程中逐点扫描每一个位置, 该技术会捕获多个低曝光帧, 每个帧的曝光时间大约为几毫秒。在保证总曝光时间与传统叠层成像一致的前提下, 积累必要的光子剂量, 从而在获取足够数据的同时, 尽可能减少外界因素的影响。这种方式能够解析实验不稳定性的时间动态, 并在多次曝光过程中将其解耦, 避免了不稳定性对衍射图案造成模糊。

但 Burst ptychography 也存在一些问题: 时间分辨衍射图案的记录大幅增加了原始数据量, 对计算处理能力和内存的需求也相应提高。而且每个低曝光图像的信噪比 (SNR) 较差, 这会降低计算收敛性。为解决这些问题, 构建了一个特定的重建和数据采集方法, 图 5 (b) 展示了这种专门的重建流程。

对比常用于处理光源部分相干的多模态方法<sup>[25-27]</sup>, 可以发现, 多模态方法通过依赖多种探针模式来解决实验中的不一致性问题, 如 X 射线束的不稳定性问题。但该过程会降低重建分辨率和整体质量, 因为要在单帧上处理不稳定因素, 且需要更多的迭代次数来恢复振动模式。相比之下, Burst ptychography 则没有这些影响因素, 它通过获取多个突发帧, 结合相应的位置优化算法以及专门的重建流程, 在处理连续扫描样品实验过程中出现的不稳定性以及运动伪影方面效果更好, 能够得到更好的图像质量以及更高的清晰度。

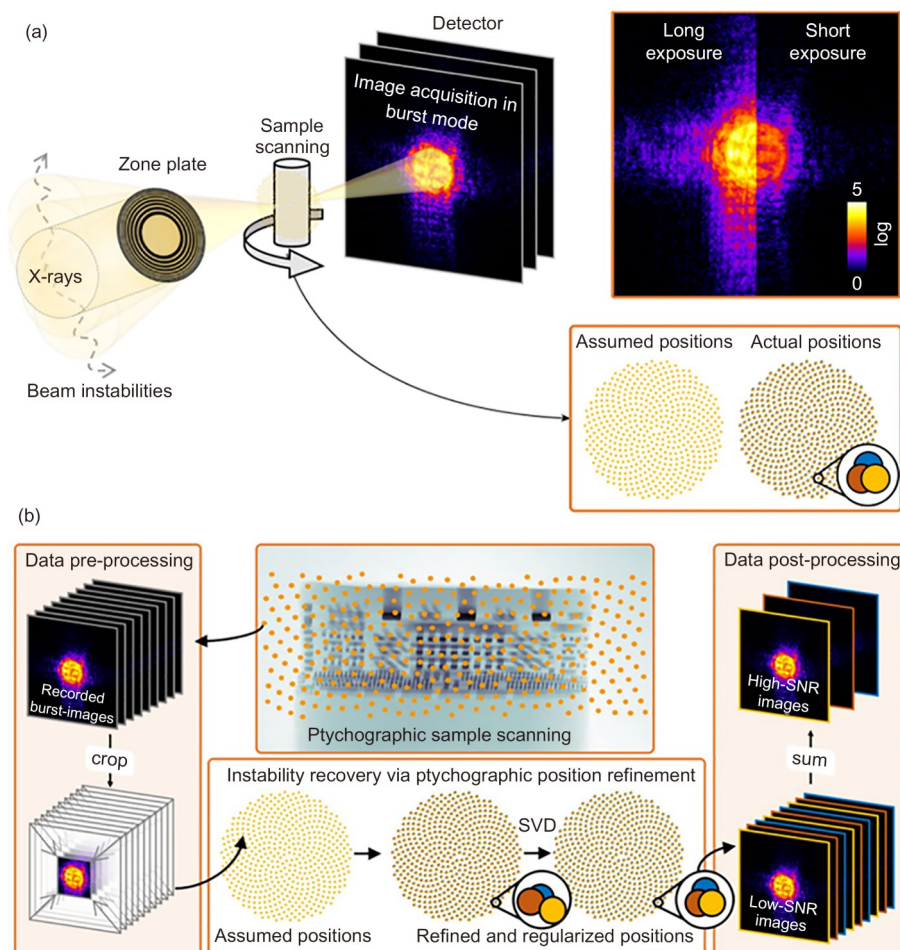


图5 burst ptychography 实现装置图以及重建过程<sup>[24]</sup>: (a) burst ptychography 实现装置图; (b) burst ptychography 重建处理工作流程, 首先通过对每个扫描位置所有突发帧进行求和, 并进行传统的叠层成像重建, 找到初始的样品函数, 作为后续重建的起点。之后, 使用位置优化算法对所有突发帧进行位置修正, 以恢复每个突发帧中样品相对于探针的精确位置; 然后, 对修正位置后的突发帧进行分组求和处理, 以提高帧的信噪比并减轻计算负担。最后, 通过使用前面获得的扫描位置以及叠加的帧, 获得一个高分辨率的重建结果

**Fig.5** Implementation device diagram and reconstruction process of burst ptychography imaging<sup>[24]</sup>: (a) implementation device diagram of burst ptychography; (b) workflow of burst ptychography reconstruction. First, sum all the burst frames at each scanning position and perform traditional ptychography reconstruction to find the initial sample function, which serves as the starting point for subsequent reconstruction. Then, use a position optimization algorithm to correct the positions of all burst frames to restore the precise position of the sample relative to the probe in each burst frame. Next, perform grouped summation on the burst frames after the position correction to improve the signal - to - noise ratio of the frames and reduce the computational burden. Finally, use the previously obtained scanning positions and the superimposed frames to obtain a high - resolution reconstruction result

## 1.2 全局位置误差

这种类型的误差出现, 会影响所有扫描点的衍射图案, 整体是自洽的, 但是样品图像重建结果是有偏差的。这些误差的存在严重影响了重建图像的质量。有轴向距离误差 (即衍射距离误差), 旋转位置误差等。对于轴向距离误差, 一般是各种因素 (如探测器保护玻璃存在或窗口深度存在等) 造成衍射距离测量的不准确, 进而导致衍射图案变化, 对重建图像的影响类似于散焦效果, 这种现象尤其对于近场衍射情况下更为明显。而对于旋转位置误差, 一般是由于探测器面与样品移动平台 (或者探针移动平台) 之间存在一个

相对的角度偏差, 会造成整体的衍射图样变化。

### 1.2.1 轴向距离误差 (或称衍射距离误差)

在采用菲涅耳传播模型的 Ptychography 重建中, 样品平面与探测器平面之间的距离是传播算子的关键参数。当重建所采用的距离与实验中的实际距离不一致时, 计算波场与实测衍射强度之间将出现模型失配, 并可能表现为重建结果的放缩变化和离焦模糊<sup>[28]</sup>。设实际传播距离为  $d$ , 重建中采用的距离为 ( $d' = \alpha^2 d$ ), 其中  $\alpha$  表示距离偏差对应的放缩因子。( $x_0, y_0$ ) 和  $U_0(x_0, y_0)$  表示物平面坐标和波场, ( $x, y$ ) 和  $U(x, y)$  表示记录面坐标和波场。之后根据菲涅耳传播关系, 错误传

播距离下的计算波场可表示为式 (10)。

$$U(x, y) = \frac{1}{i\lambda\alpha^2 d} \iint U_0(x_0, y_0) \times \exp\left(ik \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2\alpha^2 d}\right) dx_0 dy_0 \quad (10)$$

实际距离下的波场可表示为式 (11)。

$$U_a(x, y) = \frac{1}{i\lambda d} \iint U_0(x_0, y_0) \times \exp\left(ik \frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2d}\right) dx_0 dy_0 \quad (11)$$

在探测器平面施加实测幅值约束后，对传播坐标进行放缩变换可得到式 (12)， $g' = x_0/\alpha$ ， $h' = y_0/\alpha$ 。

$$U(x, y) = \frac{1}{i\lambda d} \iint U_0(ag', ah') \times \exp\left(ik \frac{(x/\alpha - g')^2 + (y/\alpha - h')^2}{2d}\right) dg' dh' \quad (12)$$

上述分析表明，轴向距离失配不仅会引起重建坐标放缩的变化，还可能在重建波场中引入与离焦有关的相位项，使图像边缘和细节逐渐模糊。距离偏差越大，这类失配通常越明显，因此轴向距离校正可以被表述为传播参数估计问题，即依据不同候选距离下的重建质量或误差指标，确定与实验数据更一致的传播距离。基于此，Dou 等<sup>[29]</sup>提出了一种基于图像信息熵的轴向距离误差校正方法，如图 6 所示。将图像信息熵作为图像清晰度评价函数引入迭代过程中，在迭代过程中不断修复距离，直到寻找到评价函数的峰值才停止，此时将最终的轴向距离继续代入迭代循环，重构出清晰的图像。

基于图像信息熵的轴向距离校正可视为一种基于图像清晰度评价的自动对焦过程：通过清晰度评价函数对不同轴向位置的重建结果进行评估，当评价函数达到峰值时，对应轴向位置被视为最佳聚焦位置。类似地，Dou 等<sup>[29]</sup>提出基于自动对焦策略的方法，用于校正衍射 Ptychography 重建过

程中的轴向距离误差。采用自动对焦算法预测轴向距离，使用预测的距离替换初始距离，并在新距离下重建图像。经过几次迭代后，可以准确获得轴向距离，在收敛的轴向距离处可以恢复出清晰的图像。一般情况下，常规光源难以形成理想球面波，因此衍射距离难以精确测量。它需要分别测量球面波源与样本之间的距离以及样本与 CCD 之间的距离。这两个测量的误差会影响等效衍射距离的精度，导致重建的图像质量下降，特别是在近场衍射的情况下。针对这类问题，Ma 等<sup>[30]</sup>提出了一种自动对焦算法，包括粗对焦步骤和精对焦步骤。这两个步骤分别对单个衍射模式重建的振幅和扩展叠层成像迭代引擎检索到的振幅进行锐度统计。通过这两个对焦步骤，在可见光波长下可以得到精确的焦距。使用这种自动对焦算法获得衍射距离再结合相应的相位恢复算法，就可以改进重建样品图像的质量和分辨率。

需要指出的是，引入轴向距离校正会增加重建算法复杂性，越来越多的研究表明轴向距离的误差对再现图像所造成的影响在本质上和横向扫描步长误差所造成的影响完全一样。He 等<sup>[31]</sup>和郑晨等<sup>[32]</sup>通过公式推导及实验证明，轴向距离误差可以通过横向位置误差进行校正，可以通过 ePIE 算法结合位置校正算法实现对这种轴向距离误差的校正。具体的是假设样品和探测器之间的实际距离为  $z$ ，而重建过程中使用的距离  $z_1 = \beta z$ 。其中  $\beta$  表示重建所采用距离与实际距离之间的比例，具有不正确距离的衍射场强度则为式 (13)。

$$I_1(u, v) = \left| \iint T(x_1, y_1) \exp\left[j \frac{k}{2(\beta z)} (x_1^2 + y_1^2)\right] \cdot \exp\left[-j \frac{2\pi}{\lambda(\beta z)} (x_1 u + y_1 v)\right] dx_1 dy_1 \right|^2 \quad (13)$$

相应地，通过对正确距离下的传播表达式进行坐标放缩变换，可以将实际衍射强度改写为式 (14)。

$$\begin{aligned} I(u, v) &= \left| \frac{1}{\beta^2} \iint T\left(\frac{x_1}{\beta}, \frac{y_1}{\beta}\right) \exp\left[j \left(\frac{1}{\beta} - 1 + 1\right) \frac{k}{2\beta z} (x_1^2 + y_1^2)\right] \cdot \exp\left[-j \frac{2\pi}{\lambda\beta z} (x_1 u + y_1 v)\right] dx_1 dy_1 \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\beta^2} \iint T\left(\frac{x_1}{\beta}, \frac{y_1}{\beta}\right) \exp\left[j \left(\frac{1}{\beta} - 1\right) \frac{k}{2(\beta z)} (x_1^2 + y_1^2)\right] \cdot \exp\left[j \frac{k}{2(\beta z)} (x_1^2 + y_1^2)\right] \cdot \exp\left[-j \frac{2\pi}{\lambda(\beta z)} (x_1 u + y_1 v)\right] dx_1 dy_1 \right|^2 \end{aligned} \quad (14)$$

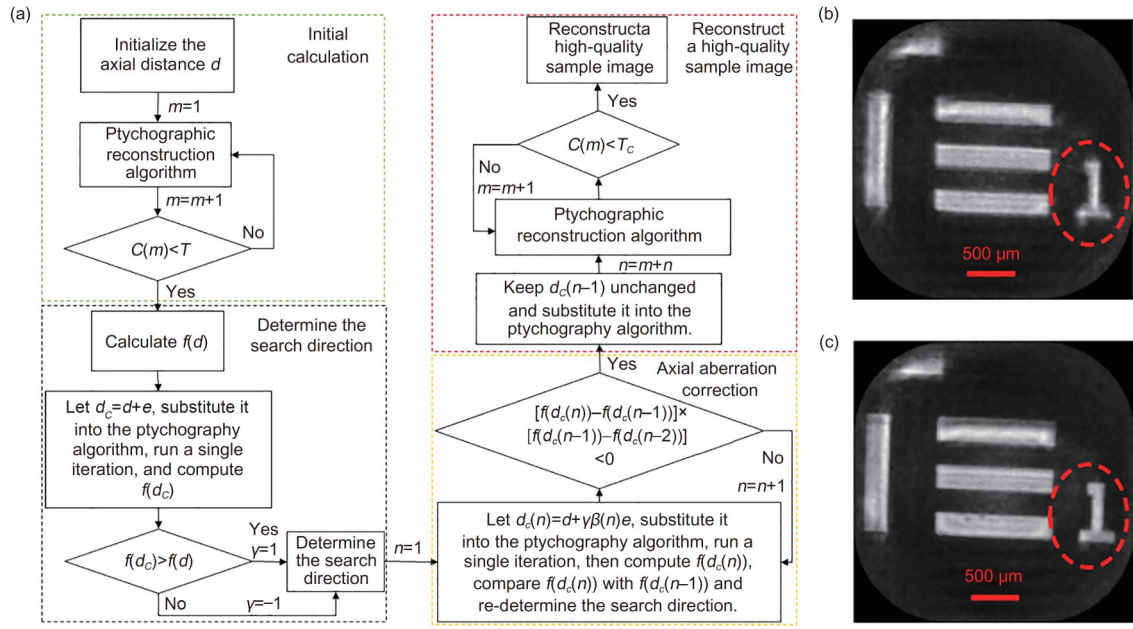


图6 基于图像信息熵的轴向距离误差校正流程与实验结果对比<sup>[28]</sup>: (a)校正轴向距离误差算法流程图; (b)存在轴向距离误差的重建结果; (c)经过轴向距离校正后的重建结果

Fig.6 Flowchart of the axial distance error correction based on image information entropy and the comparison of experimental results<sup>[28]</sup>: (a) flowchart of the algorithm for correcting the axial distance error; (b) reconstruction result with an axial distance error; (c) reconstruction result after the axial distance correction

式中: 出射波场  $T(x, y)$ ,  $(x, y)$  表示样品扫描位置坐标,  $x_i = \beta x$ ,  $y_i = \beta y$ , 比较式 (13) 和式 (14) 表明, 距离参数发生比例偏差后, 算法仍可能通过改变物平面波场的空间大小和相位分布, 使计算强度与实验强度保持一致。换言之, 轴向距离参数的误差并不一定只表现为算法无法收敛, 也可能被重建结果中的尺度伸缩和相位变化所吸收。当出射波场满足相应的放缩变换关系时, 由两种距离计算得到的衍射强度可以相等。此时, 重建波场相对于实际波场发生  $\beta$  倍的空间大小变化, 同时还会附加一个与径向坐标有关的二次相位因子, 见式 (15)。

$$\varphi = \exp \left[ j \left( \frac{1}{\beta} - 1 \right) \frac{k}{2(\beta z)} (x_i^2 + y_i^2) \right] \quad (15)$$

在近场 Ptychography 中, 这一二次相位项主要反映在重建探针的相位曲率中。因此, 距离设定不准确时, 样品与探针的横向尺寸会发生系统性变化, 探针相位也可能出现额外的球面曲率。随着距离误差增大, 这种放缩和相位偏差会更加明显。模拟与实验结果均显示, 错误距离下重建的样品和探针尺寸与比例因子  $\beta$  具有对应关系。对于 X 射线和电子束 Ptychography, 探测器通常设置在样品的远场衍射区域。远场情况下, 传播强度可写为式 (16)。

$$I(u, v) = \left| \frac{1}{\beta^2} \iint P \left( \frac{x_i}{\beta}, \frac{y_i}{\beta} \right) O \left( \frac{x_i}{\beta}, \frac{y_i}{\beta} \right) \exp \left[ -j \frac{2\pi}{\lambda(\beta z)} (x_i u + y_i v) \right] dx_i dy_i \right|^2 \quad (16)$$

式 (16) 表明, 当重建距离采用  $\beta z$  时, 相应的样品函数、探针函数和扫描位置坐标会产生与比例因子  $\beta$  有关的大小变化。与近场情况相比, 远场重建探针中不再出现相同形式的附加二次相位项。通过横向扫描位置校正算法对扫描网格进行优化, 可以根据校正后扫描步长与实际物理步长之间的比例关系估计  $\beta$ , 进而对轴向距离偏差进行间接补偿<sup>[31-32]</sup>。图 7 展示了不同轴向距离设定下样品、探针和扫描位置的变化。可以看到, 距离误差会同时改变重建样品和探针的大小, 而横向扫描位置校正能够在一定程度上恢复扫描坐标、样品和探针之间的缩放一致性。所提出的方法避免了添加自动对焦算法来校正轴向位置误差, 从而降低了基于叠层成像技术的复杂性。不过其校正效果仍取决于扫描区域重叠程度、位置校正算法的收敛性以及传播模型与实验条件的一致性。

### 1.2.2 旋转位置误差

当探测器平面相对于样品移动平台所在的平面 (或探针移动平台所在的平面) 之间存在一个角度偏差会造成对应的衍射花样变化, 见图 8。探

测器平面在 $x$ 、 $y$ 、 $z$ 轴方向上均可能出现一个旋转角度偏差，这样会改变迭代算法运行过程中所要求的衍射图案重叠信息，进而影响整体成像效果。

针对这种旋转角度偏差问题，2024年Lin等<sup>[33]</sup>提出了一种基于傅里叶-梅林变换和互相关计算结合ePIE算法的方法，可校正高达60°的旋转误差。

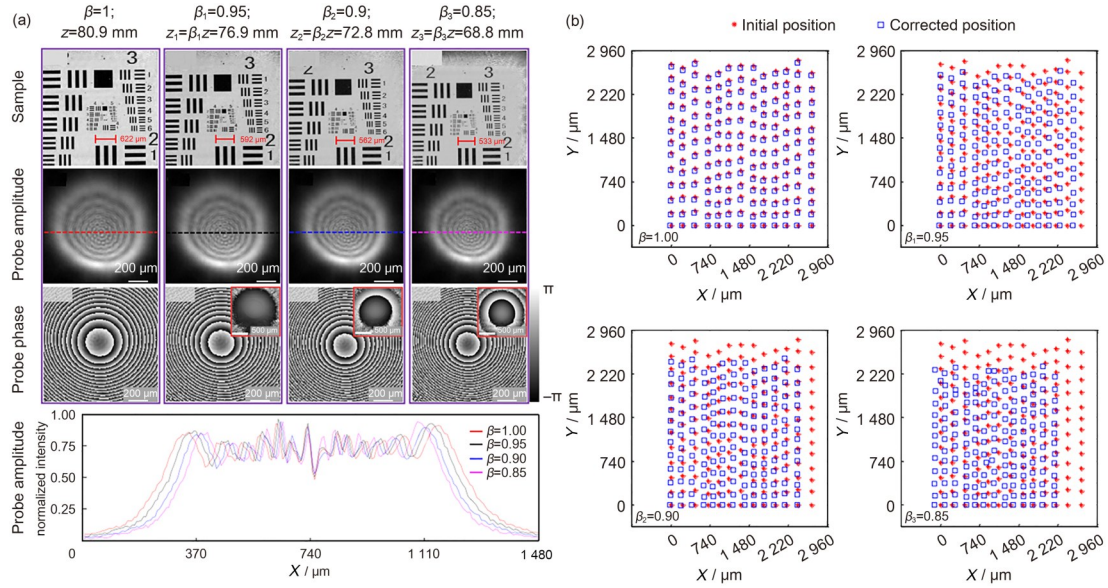


图7 在不同的轴向距离下( $\beta$ 系数也随之发生变化)重建结果出现的差异<sup>[31]</sup>: (a)重建样品图案、探针的振幅和相位图,以及探针振幅强度变化; (b)扫描位置坐标校正中随 $\beta$ 系数不同的情况下出现的变化(彩色见网络版)

**Fig.7** Differences in the reconstruction results under different axial distances (where the  $\beta$  coefficient also changes accordingly)<sup>[31]</sup>: (a) reconstructed sample pattern, the amplitude and phase diagrams of the probe, and the variation of the probe amplitude intensity; (b) changes that occur during the correction of the scanning position coordinates under different  $\beta$  coefficients (color online)

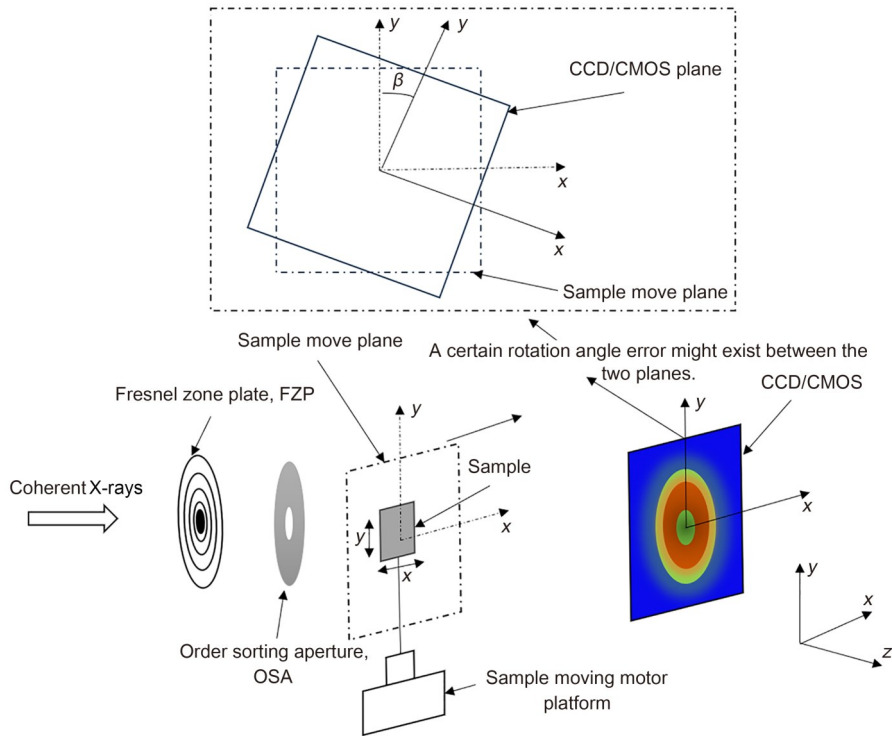


图8 Ptychography 装置示意图及旋转角度误差展示  
**Fig.8** Schematic of Ptychography setup and illustration of rotation angle error

傅里叶-梅林变换是一种用于估计两幅图像之间的旋转角度及尺度变化的方法，该方法首先对图像进行傅里叶变换，再将频谱幅值由笛卡尔坐

标映射至对数极坐标，使原空间中的旋转关系转换为对数极坐标域中的角向平移关系，最后利用相位相关或互相关计算获得旋转角度。设图像 $g$

$(x, y)$  是图像  $f(x, y)$  旋转角度  $\delta$  后的结果, 即式 (17)。

$$g(x, y) = f(x \cos \delta - y \sin \delta, x \sin \delta + y \cos \delta) \quad (17)$$

根据傅里叶变换的旋转性质, 图像在空间域中旋转一定角度后, 其傅里叶频域中也会发生相同角度的旋转, 即式 (18)。

$$|G(u, v)| = |F(u \cos \delta - v \sin \delta, u \sin \delta + v \cos \delta)| \quad (18)$$

式中:  $F(u, v)$  和  $G(u, v)$  分别是  $f(x, y)$  和  $g(x, y)$  的傅里叶变换, 之后将笛卡尔坐标系映射到对数极坐标系  $(\rho, \theta)$ , 有式 (19)。

$$G(\rho, \theta) = F(\rho, \theta + \delta) \quad (19)$$

由式 (18)~(19) 可知, 图像的旋转角度可以转化为对数极坐标中的角向平移量, 并通过互相关计算进行估计。在 Lin 等<sup>[33]</sup> 提出的方法中, 这一角度估计过程被作为附加反馈环节嵌入 ePIE 迭代。

当样品函数完成一次更新后, 分别对当前迭代和上一次迭代获得的物体分布进行傅里叶-梅林变换, 并通过互相关计算得到两者之间的角度增量。单次迭代得到的角度增量通常较小, 但经过连续反馈和累积, 可以逐渐逼近实际的旋转位置误差, 见式 (20)。

$$\theta_{m+1} = \theta_m + \beta_2 \cdot \delta_m \quad (20)$$

式中:  $\theta_m$  为第  $m$  次迭代时累计旋转角度估计值, 但是超过一定值之后将导致收敛性较差。 $\delta_m$  为本次迭代得到的角度增量,  $\beta_2$  为反馈权重。该参数决定每次迭代中角度修正的幅度, 其取值需要在收敛速度和迭代稳定性之间进行权衡。根据估计得到的旋转角度, 可以对扫描位置坐标进行修正, 也可以对衍射图样实施相应的旋转变换, 并将修正后的数据用于下一次迭代, 直至达到预设的迭代次数或满足停止条件, 图9给出了该方法在模拟数据及可见光实验数据中的校正效果<sup>[33]</sup>。

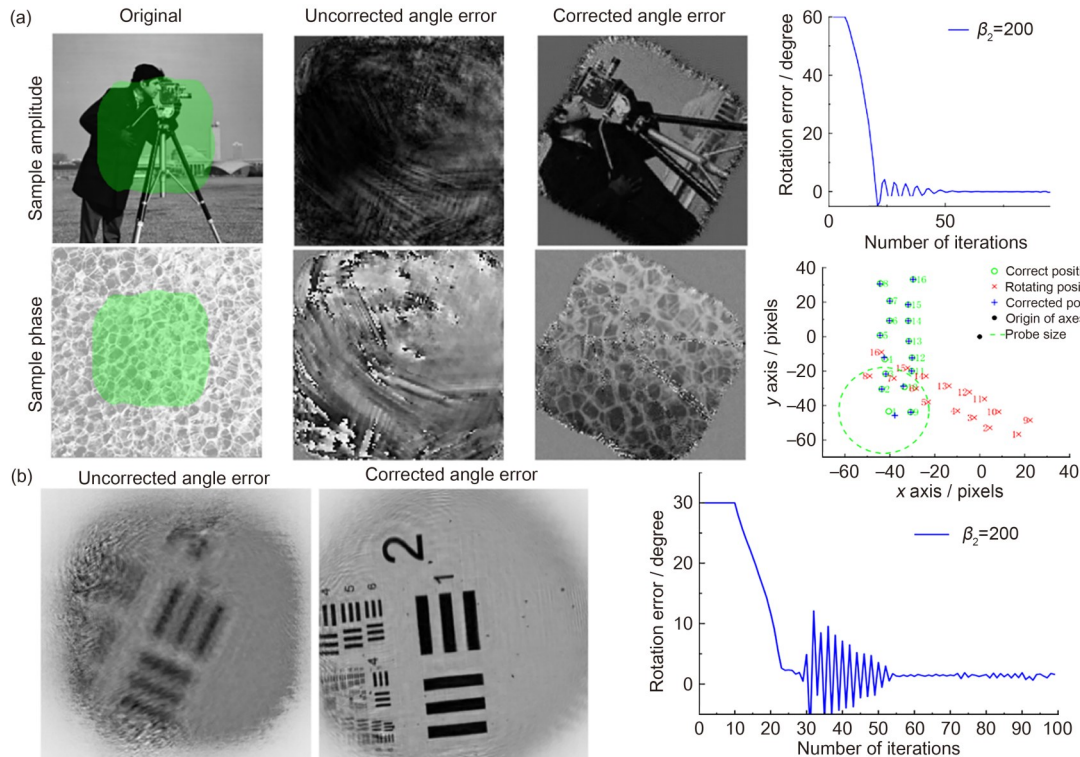


图9 基于傅里叶-梅林变换和互相关计算结合 ePIE 算法的方法模拟与实验对比图<sup>[33]</sup>:

(a) 模拟环境对比角度误差未校正与校正后的效果对比, 以及角度误差随迭代次数变化关系和扫描位置点变化关系; (b) 可见光条件下角度误差未校正与校正后的实验对比图, 以及角度误差随迭代次数变化关系

**Fig.9** Comparison diagram between simulation and experiment of the method combining Fourier - Mellin transform and cross - correlation calculation with the ePIE algorithm<sup>[33]</sup>: (a) in the simulation environment, comparison of the effects before and after correcting the angular error, as well as the relationships between the angular error and the number of iterations and the change of scanning position points; (b) under visible light conditions, experimental comparison diagram before and after correcting the angular error, and the relationship between the angular error and the number of iterations

另一种对于全局误差校正方法是对于前面的局部误差校正方法的一种改进, 在 Ptychography 过程中位置误差总是以多种形式出现, 局部位位置误

差通常表现为各扫描点相互独立的随机偏移, 而旋转、放缩变化和连续漂移会使整个扫描坐标集产生具有一致规律的系统性畸变。针对后一类情

况，Maiden 等<sup>[11]</sup>在 pcPIE 算法基础上进一步提出了 e-pcPIE 算法，该算法在局部位置校正向量的基础上，引入旋转参数和缩放参数，第  $j$  个扫描位置对应的候选总校正量可概括表示为式 (21)。

$$\mathbf{C}_{j,m}^{tot} = \mathbf{C}_{l,j} + c_l \Delta_{l,m} + \mathbf{R}_j \begin{bmatrix} \cos(C_r + c_r \delta_{r,m}) - 1 \\ \sin(C_r + c_r \delta_{r,m}) \end{bmatrix} + \mathbf{R}_j (C_s + c_s \delta_{s,m}) \quad (21)$$

式中： $\mathbf{C}_{l,j}$  表示第  $j$  个扫描位置的局部校正量， $c_l$ 、 $c_r$  和  $c_s$  分别控制局部位移、旋转和缩放参数的搜索范围， $\Delta_{l,m}$  为局部位置随机扰动向量， $\delta_{r,m}$  和  $\delta_{s,m}$  分别为旋转和缩放参数的随机扰动量。算法通过在当前参数附近生成多组候选位置，由式 (22) 计算之后比较各候选位置对应的衍射强度与实验数据之间的误差，选取误差最小的一组参数进行更新。局部参数仅作用于当前扫描点，而旋转和缩放参数作用于整个扫描坐标集。因此，e-pcPIE 能够在修正随机位置偏移的同时，逐步估计扫描网格的整体旋转和比例变化。为避免全局变换引入额外平移，通常需要预先对扫描坐标进行中心

化处理。

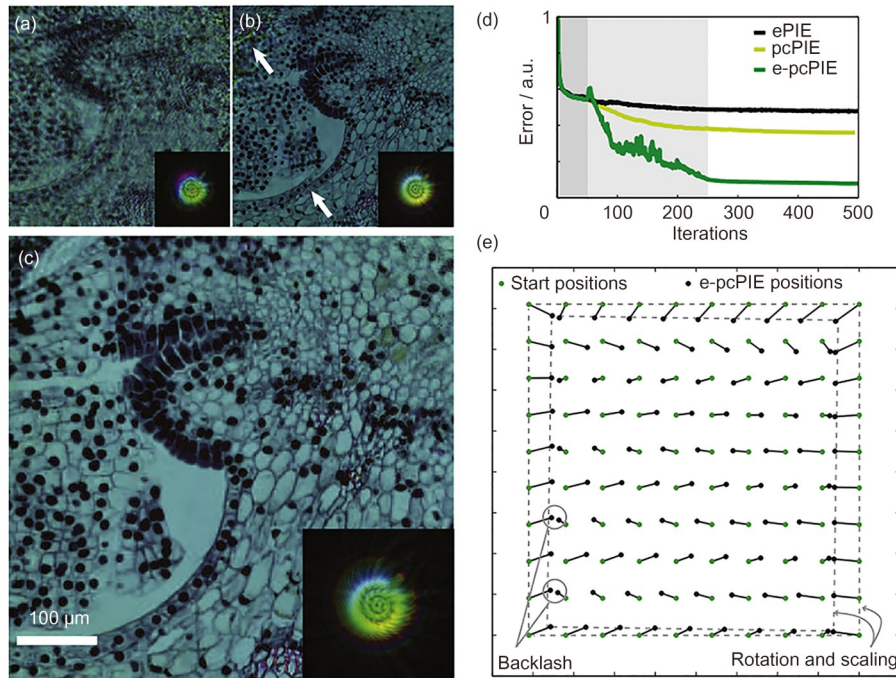
利用式 (21) 得到的候选位置，第  $m$  个候选出射波写为式 (22)。

$$\psi_m(\mathbf{r}) = O(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_j + \mathbf{C}_{j,m}^{tot})) P(\mathbf{r}) \quad (22)$$

各候选出射波传播至探测器平面后，与第  $j$  个位置记录的衍射强度进行比较。

对于数据采集过程中逐渐累积的线性漂移，还可以增加与扫描顺序相关的漂移校正项。该校正以扫描序列的中间位置为参考，使扫描起始端和末端获得方向相反、幅度逐渐变化的补偿，从而减小整体漂移造成的坐标畸变。确定最优位置参数后，算法继续采用 pcPIE 中的振幅约束及样品、探针更新方式。与仅校正局部随机误差的 pcPIE 相比，e-pcPIE 能够综合处理局部偏移、整体旋转、缩放变化和线性漂移，更适用于存在多种位置误差的实验数据。

图 10 给出了 ePIE、pcPIE 和 e-pcPIE 在扫描坐标中同时存在局部偏移、旋转、缩放变化和机械回程误差时的重建结果。



**图 10** ePIE、pcPIE、e-pcPIE 三种不同算法在存在大量全局位置误差的情况下重建结果的对比以及 e-pcPIE 算法的各项指标<sup>[11]</sup>：(a) ePIE 算法重建样品图像；(b) pcPIE 算法重建样品图像，白色箭头指示了这些误差给 pcPIE 带来问题的区域；(c) e-pcPIE 算法重建样品图像；(d) 随着算法推进，e-pcPIE 与 ePIE 和 pcPIE 的衍射图案误差对比。阴影部分表示三组参数设置，从左到右依次为：无位置更新；局部和全局位置更新；仅局部位置更新；(e) 一张关于对测量样本位置所做校正的图表，展示了 e-pcPIE 如何校正显著的旋转、缩放和反向间隙误差(彩色见网络版)

**Fig.10** Comparison of the reconstruction results of three different algorithms, ePIE, pcPIE, and e-pcPIE, in the presence of a large number of global position errors, and various indicators of the e-pcPIE algorithm<sup>[11]</sup>: (a) sample image reconstructed by the ePIE algorithm; (b) sample image reconstructed by the pcPIE algorithm. The white arrows indicate the regions where these errors cause problems for pcPIE; (c) sample image reconstructed by the e-pcPIE algorithm; (d) as the algorithm progresses, comparison of the diffraction pattern errors between e-pcPIE, ePIE, and pcPIE. The shaded areas represent three sets of parameter settings. From left to right, they are: no position update; local and global position updates; only local position update; (e) a chart regarding the corrections made to the measured sample positions, showing how e-pcPIE corrects significant rotation, scaling, and backlash errors (color online)

结果表明e-pcPIE算法具有显著优于对比方法的重建性能,可获得更高分辨率和更清晰的重建图像。其中ePIE未对位置参数进行修正,pcPIE虽然能够减弱局部位置偏差的影响,但仍可能保留由整体坐标畸变产生的伪影;e-pcPIE通过联合更新局部位移与全局几何参数,可进一步降低衍射数据误差并改善重建细节。故e-pcPIE方法适用于全局误差与局部误差同时存在的实验条件,但其参数数量和搜索范围也随之增加,需要依据具体误差类型合理设置各参数的启用时段和衰减过程。

## 2 人工智能在位置误差校正方面的应用

早在20世纪90年代,人工神经网络在MNIST数据集上就达成了超过98%的分类精度<sup>[34]</sup>。深度神经网络(Deep neural network, DNN)是一类具有多层结构(通常包含多个隐藏层)的人工神经网络,它的概念最早由McCulloch和Pitts<sup>[35]</sup>提出,其基于仿生学原理,模拟单一神经元这一最基本的计算单元,通过计算单元之间的相互连接来模仿神经细胞间电信号的传递。深度学习是以DNN为核心的方法体系,2006年Hinton等<sup>[36-38]</sup>提出用无监督预训练(如深度置信网络/逐层预训练)来更好训练深层网络,这成为“深度学习复兴”的关键起点。

近年来,机器学习在光学研究中得到广泛应用,深度学习是其中的代表性方法。在具有物理先验和强约束的任务中,深度学习能够在一定程度上减少对手工特征设计的依赖,并通过构建灵活且结构化的神经网络模型,在许多复杂任务中取得比传统机器学习方法更高的准确性和更低的人工干预。深度学习的模型架构不断创新,并具备与多种技术(如物理先验、优化方法、迁移学习等)融合潜力,这使得它在一些任务中具有更强的发展优势。目前,DNN在多种计算机视觉任务中都取得了出色的表现,如图像分类、图像超分辨、图像去噪和图像生成等<sup>[37]</sup>。特别是在成像领域的逆问题解决方案中,DNN的应用已逐渐成为焦点,图11(a)展示了一些不同形式的DNN。同时,得益于高性能的图形计算硬件的计算能力显著提升和特殊网络结构的设计,研究者能够训练和收敛更深层次的大型神经网络,如LeNet5<sup>[39]</sup>、AlexNet<sup>[40]</sup>、VGG<sup>[41]</sup>、ResNet<sup>[42]</sup>和Transformer<sup>[43]</sup>,从而完成更为复杂的图像处理任务。

深度学习在相位恢复算法中,通过提高信噪

比让约束更可靠、提升有效采样让可恢复的细节更多、估计传播距离减少模型失配等预处理改善测量数据;通过将传播反演与正则化过程隐式编码为从强度到相位的直接映射,从而显著降低推理时间;通过与物理传播模型耦合学习更有效的先验与正则化以提升重建速度与鲁棒性;通过在重建后进行去伪影、像差校正与相位增强,从而缓解传统迭代方法对噪声、模型误差与初值的敏感性。但深度学习的可用性受数据分布与系统一致性制约,因此需关注网络结构和损失函数对高频细节的影响,并通过物理一致性约束、算法展开提高可解释性,以及不确定性估计提升无真值条件下的可靠性评估。总体上发展模式是“物理模型+深度学习”融合,在效率与可信度之间取得平衡<sup>[51]</sup>。

对于Ptychography而言,它是建立在物理模型与图像处理分析相结合的技术上。对于这一过程中出现的一些实验参数误差,除了可以用传统的算法处理,还可以用机器学习、深度学习等新型人工智能方案来处理,特别是对于一些复杂的处理工作,图11(b)展示了常见的多种应用在Ptychography过程中的一些神经网络模型。随着机器学习与深度学习等人工智能算法的不断深入发展,越来越多的相关技术将融合到Ptychography研究领域。特别是近年来U-net<sup>[45-46]</sup>、PtychNet<sup>[47]</sup>、DnCNN<sup>[48]</sup>、PtyNet<sup>[49]</sup>、PtychoNN<sup>[50]</sup>等一些神经网络模型的发展,使它们能够有效应对Ptychography过程中出现的位置误差、噪声以及大量冗余数据等问题,一次性完成多种任务,适合处理复杂任务相互耦合的情形,尤其是应对实验过程中多种误差均存在的情况。如Pan等<sup>[49]</sup>提出了一种可以快速对从同步辐射光源获取的数据进行训练,并快速对用户的实验数据进行图像重建的PtyNet卷积神经网络模型。Işıl等<sup>[46]</sup>将DNN<sup>[35]</sup>和HIO<sup>[52]</sup>算法结合起来构建了一个新的相位恢复网络,即在HIO算法的每次迭代中利用DNN网络中的卷积自带部分去噪和分辨率恢复的能力提升样品图像重建效果。Cherukara等<sup>[50]</sup>提出基于深度卷积神经网络解决Ptychography过程中的数据反演问题的PtychoNN网络模型。这些研究表明Ptychography与深度学习以及神经网络相结合做研究,正在逐渐成为提升其成像质量的一种新的趋势。其中包括将深度学习或神经网络方法应用到Ptychography扫描过程中位置误差校正<sup>[53-55]</sup>,且目前这一方面已经取得了一定进展。

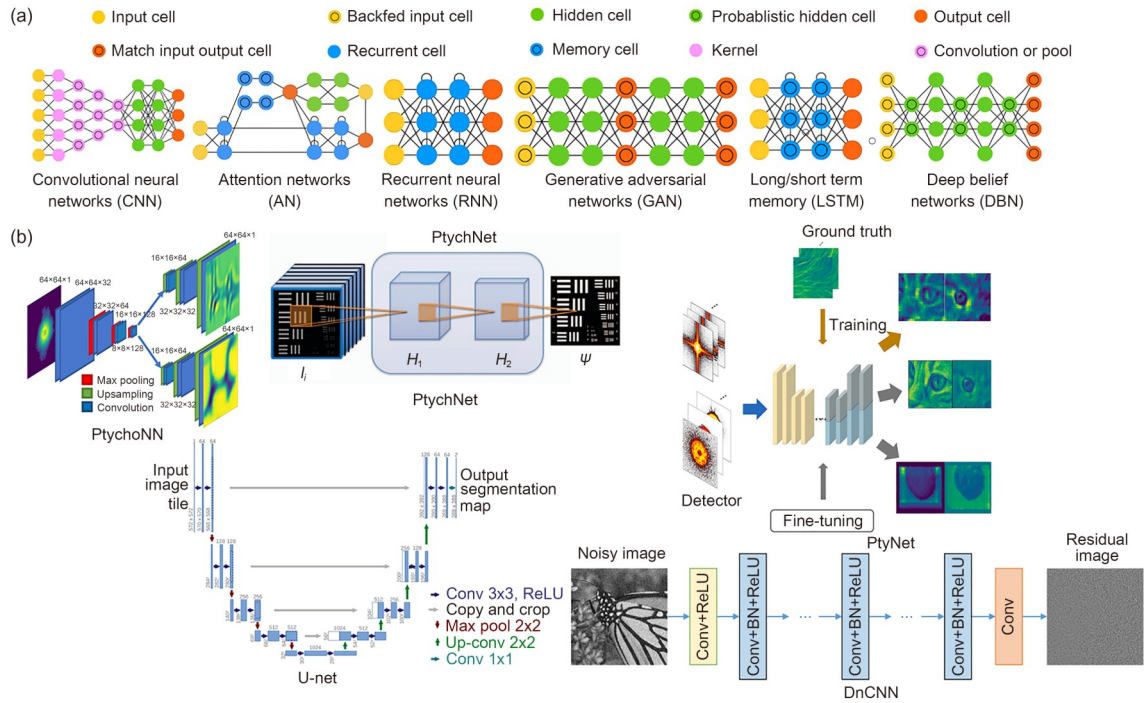


图 11 常见的一些 DNN 类模型以及衍生而来的 Ptychography 相关 DNN 类模型：(a) 常见的一些神经网络模型架构<sup>[44]</sup>；(b) 应用在 Ptychography 成像过程中的一些神经网络模型架构<sup>[45-50]</sup>

**Fig.11** Some common DNN - based models and the derived DNN - based models related to ptychography: (a) architectures of some common neural network models<sup>[44]</sup>; (b) architectures of some neural network models applied in the ptychography imaging process<sup>[45-50]</sup>

如 Guzzi 等<sup>[56-57]</sup> 受到现代深度学习的启发，针对常常影响实验成像效果的传播距离、位置误差、部分相干性等，提出了一种自动微分的 Ptychography 的重建方法，明确考虑所有误差并将其添加到优化池中进行联合回归/重建来导出损失函数，从而提高 Ptychography 重建的质量。

再者，前面的位置校正算法在处理误差沿扫描路径累积或者误差幅度较大时，这些方法一般无法获得高质量重建结果，如位置误差非常大，以至于两个被认为彼此接近的衍射图案实际上几乎没有重叠，这打破了叠层成像恢复物体和探针相位所依赖的信息冗余约束。针对这一类问题 Du 等<sup>[58]</sup> 提出了一种利用单次相位恢复神经网络预测叠层成像探针位置的方法，用于处理具有大位置误差的数据的叠层成像探针位置预测。其中神经网络用于对单个衍射图案进行单次相位恢复，从而在每个扫描点生成物体图像。然后使用稳健的图像配准方法找到这些图像之间的成对偏移量，并通过构建和求解线性方程将结果组合起来以生成完整的扫描路径。PtychoNN 算法<sup>[50]</sup> 已证明能够利用单个衍射图案（即使用重叠探针收集的衍射图案不是必需的）生成准确的重建结果，这种独特的“单次”相位恢复能力放宽了叠层成像的传

统要求。即只有在有足够的探针重叠时才能进行相位恢复，这是网络隐式学习探针函数和样品函数分布的结果，这些分布构成了补偿探针重叠不足的先验知识。利用 PtychoNN 的单次相位恢复能力，现在可以构建一种全新的解决探针位置校正问题的方法，使用该方法可以在累积误差或独立误差的情况下预测探针位置，预测位置与相应真实位置之间的平均成对偏移误差约为几个像素，即使在最极端的累积误差情况下（误差距离约为  $10^1 \sim 10^2$  像素）也是如此。这种误差水平通常传统位置误差校正算法无法处理，但如果从该方法预测的位置开始，可以进一步进行位置校正优化，这样就可以降低到单个像素或亚像素水平，因此该方法可以与现有的一些位置校正算法协同工作。这表明以前传统方法无法处理的或者束手无策的问题，在深度学习领域可以很好地被处理。同时，上述的研究还表明人工智能正在不断与传统的光学融合，并能够结合传统方法联合解决相关问题，从而促进传统方法的发展。随着人工智能（特别是深度学习）的发展，其在 Ptychography 位置误差补偿与校正中的应用前景广阔，同时也可能为解决其他影响成像质量因素提供新的思路与工具。

### 3 位置误差校正的效果判断

在位置误差校正结束之后, 如何评估一个算法或方案的效果是一个重要的环节, 其中位置校正后的精确度以及最终的成像分辨率是一个重要的考量。对于位置误差效果以及成像分辨率判断有众多的方法以及公式, 对于位置误差校正后精确度评判, 分别有均方误差 (Mean square error, MSE)<sup>[59-60]</sup>、均方根误差 (Root-mean-square error, RMSE), 以及它们的变种; 对于校正之后的成像分辨率的判断有特征尺寸测量、傅里叶环相关 (Fourier ring correlation, FRC)<sup>[61-63]</sup>、功率谱密度 (Power spectral density, PSD)<sup>[64-66]</sup>、傅里叶壳层相关 (Fourier shell correlation, FSC)<sup>[67-68]</sup> 等。

就位置误差校正的精确程度来说, MSE<sup>[59-60]</sup> 是一种常用的损失函数, 是一个光滑的、可导的函数, 常用于衡量预测值与真实值之间的平均平方差异。

对于一组预测值  $\hat{y}_i$  和对应的真实值  $y_i (i = 1, 2, \dots, n)$ , 其计算公式为式 (30)。

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad (30)$$

均方误差是将所有预测误差进行平方运算后求和, 再计算平均值, 最终得到的数值即为该模型的均方误差。由于均方误差采用平方项, 这使得它对较大的误差极为敏感。一旦出现大的异常值, 便会对整体误差产生显著影响, 进而导致 MSE 值偏大。而这种特性恰恰有利于人们在后续分析中重点关注这些误差, 以便进行针对性的修正。如今, 均方误差在众多领域得到了广泛应用。在回归分析里, 它常常作为评估模型预测准确性的重要标准之一。模型的核心目标通常是将 MSE 降至最低, 从而使预测结果与真实数据尽可能接近。在图像处理领域, 当需要比较原始图像与经过处理或重建后的图像差异时, MSE 同样能够提供量化的评估依据。一般来说, MSE 值越小意味着处理或重建后的图像与原始图像的相似度越高, 图像质量也就越好。进一步说明就是如果校正后的 MSE 值显著降低, 说明位置校正算法有效地减少了图像的误差, 提高了成像的准确性, 即位置校正效果良好; 反之, 如果 MSE 值没有明显变化或增加, 则可能意味着位置校正算法未能有效发挥作用或存在问题。而对于 RMSE 是 MSE 的平方根, RMSE 和 MSE 度量的本质相同, 但 RMSE 与

原数据的单位相同, 因而更加直观, 公式为:

$$RMSE = \sqrt{MSE}。$$

对于位置校正后的成像分辨率估计可以使用特征尺寸测量, 使用具有已知特征尺寸的样本进行成像, 然后直接测量图像中能够清晰分辨的最小特征尺寸作为分辨率。比如可以使用标准的测试样品模型, 如 Ptychography 中常用的测试样品, USAF1951 分辨率板<sup>[69]</sup>, 西门子星靶<sup>[70]</sup> 等, 通过成像后观察能够准确分辨的最小线宽, 以此确定图像的分辨率。也可以使用 FRC<sup>[61-63]</sup>, 它是一种在图像处理和分析领域用于评估图像分辨率或确定两个图像之间相关性的方法, 广泛应用于结构生物学、显微成像和光学系统中。其原理是基于傅里叶变换, 对于给定的图像, 首先进行二维傅里叶变换, 将图像从空间域转换到频率域。然后, 在频率域中以原点为中心划分出一系列同心圆环 (即傅里叶环)。接着计算相邻圆环或特定圆环之间的相关性系数。FRC 方法通过比较两幅独立采集的图像来评估图像的分辨率, 通常用于评估显微镜或图像重建算法的性能。其优势在于能够客观地量化图像在频率域的相关性, 通过这种方式, 可以得到一条相关性曲线。当相关性下降到某个阈值以下时, 这意味着图像在该频率下的信息已经损失到无法被可靠区分的程度, 此时所对应的频率就可以作为图像分辨率的估计。它提供一种基于频率成分的分辨率评估标准, 相比于一些基于直观视觉判断的方法更加准确和科学。

另一种成像分辨率判断方法 PSD<sup>[64-66]</sup>, 可以用于分析图像的频率特性, 进而与图像分辨率建立一定的联系, 但它并不是直接估计图像分辨率的常规方法。通常可以基于 PSD 的特性, 从空间频率特性、高频成分占比、PSD 曲线变化等方面来间接估计图像分辨率。图像可以看作是二维信号, 其功率谱密度反映了图像在不同空间频率上的能量分布。在理想情况下, 高分辨率图像能够包含更多的高频信息, 而低分辨率图像由于像素数量有限, 高频信息会被严重衰减。高分辨率图像通常具有丰富的边缘、纹理等细节信息, 这些细节在频域中对应着高频成分。通过分析 PSD 在高频区域的分布情况, 可以大致推断图像的分辨率。可以设定一个空间频率阈值, 将功率谱密度分为高频部分和低频部分, 计算图像的二维功率谱密度, 观察功率谱密度在高频部分的变化。如果 PSD 在较高空间频率处仍然有明显的能量分布,

说明图像可能具有较高的分辨率，能够捕捉到更多细节；反之，如果 PSD 在较低空间频率处就迅速衰减，表明图像分辨率可能较低，细节信息较

少。表 1 给出了位置误差校正效果的不同评价方法对比。

表 1 位置误差校正效果的不同评价方法对比  
Table 1 Comparison of different evaluation methods for the effect of position error correction

| 方法                   | 均方误差                                                                                                                                                                                                                    | 傅里叶环相关                                                                                                                                                                                             | 功率谱密度                                                                                                                                                                                                    |
|----------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Method               | MSE                                                                                                                                                                                                                     | FRC                                                                                                                                                                                                | PSD                                                                                                                                                                                                      |
| 使用条件                 | 需要测量的衍射强度                                                                                                                                                                                                               | 需要重建出的结果                                                                                                                                                                                           | 需要重建出的结果                                                                                                                                                                                                 |
| Conditions for use   | Requires measured diffraction intensities<br>信噪比不能过低<br>The signal-to-noise ratio (SNR) must not be too low                                                                                                             | Requires the reconstructed result<br>需统计独立的两份数据<br>Requires two statistically independent datasets                                                                                                 | Requires the reconstructed result                                                                                                                                                                        |
| 优点                   | 不依赖最终重建结果                                                                                                                                                                                                               | 天然区分信号与噪声                                                                                                                                                                                          | 只需一幅图像                                                                                                                                                                                                   |
| Advantages           | Does not rely on the final reconstruction<br>对位置误差高度敏感<br>Highly sensitive to position errors<br>无阈值判断、易于排序与比较<br>No thresholding required; easy to rank and compare<br>直接反映数据一致性<br>Directly reflects data consistency | Naturally distinguishes signal from noise<br>图像无关、模型无关<br>Independent of the image and the reconstruction model<br>可给出可信截止频率(有效分辨率)<br>Provides a reliable cutoff frequency (effective resolution) | Requires only a single image<br>不需要独立数据集<br>No need for an independent dataset<br>对单次实验友好<br>Well-suited to single-shot experiments<br>计算复杂度低、实现简单<br>Low computational complexity and easy to implement |
| 缺点                   | 对噪声高度敏感                                                                                                                                                                                                                 | 对系统性偏差 insensitive(共同错误无法识别)                                                                                                                                                                       | 无法区分信号与噪声                                                                                                                                                                                                |
| Disadvantages        | Highly sensitive to noise<br>只保证“数据拟合”，不保证“图像质量”<br>Ensures only “data fitting,” not necessarily “image quality”<br>不能区分信号与噪声<br>Cannot distinguish signal from noise                                                   | Insensitive to systematic biases (shared errors cannot be identified)<br>在弱信号或小区域统计不稳定<br>Statistically unstable under weak-signal conditions or when computed over small regions                  | Cannot distinguish signal from noise<br>高频噪声易被误认为有效信息<br>High-frequency noise is easily mistaken for meaningful information<br>极易误判分辨率<br>Prone to severe resolution misestimation                       |
| 适用场景                 | 位置误差校正、参数搜索、优化过程中的代价函数                                                                                                                                                                                                  | 图像分辨率的定量评估                                                                                                                                                                                         | 频谱结构分析                                                                                                                                                                                                   |
| Applicable scenarios | Used as a cost function in position-error correction, parameter search, and optimization<br>不用于最终图像质量或分辨率评价<br>Not intended for evaluating the final image quality or resolution                                        | Quantitative evaluation of image resolution<br>局部分辨率 / 不确定性评估<br>Local resolution / uncertainty assessment                                                                                         | Spectral structure analysis<br>定性展示频率覆盖、各向异性<br>Qualitative display of frequency coverage and anisotropy<br>不要求给出具体分辨率数值的场景<br>Scenarios that do not require providing specific resolution values        |

4 总结与展望

随着中国第三代同步辐射光源十几年的发展，以及第四代同步辐射光源的建成，光源的相干性

与亮度得到了一个巨大提升。这种状态下相干衍射会得到一个进一步发展，它的一种重要实现方式 Ptychography 同时也会得到一个进一步的发展。在 X 射线领域中的 Ptychography，各种相位恢复算

法层出不穷,其中典型的PIE<sup>[1]</sup>、ePIE<sup>[16]</sup>、DM<sup>[71-73]</sup>等算法都有一个重要的特点,就是依赖于精确的探针位置以及系统位置信息。十几年来各种位置校正方法不断出现,其中大部分算法都是依赖于其扫描过程中的光斑重叠特性以及数据的冗余性,在迭代重建过程中逐步修正扫描位置,位置校正方法为最大限度地提高叠层成像向着理想分辨率发展提供了一种途径。但它们大都有各自的缺点,包括易陷入局部最优解、全局最优难以保证、额外增加计算的复杂度、增加图像重建时间等。当前,随着人工智能的发展,将其与Ptychography融合有望在快速相位恢复、先验约束正则化、参数与位置估计及噪声抑制等环节提升重建效率与结果质量。为了进一步提高人工智能在Ptychography中的应用效率和性能,目前已广泛采用图形处理单元(Graphics processing unit, GPU)、现场可编程门阵列(Field-programmable gate array, FPGA)等高性能计算硬件加速Ptychography与人工智能中的关键内容(如大规模FFT、卷积运算与自动微分优化),从而缩短重建时间并提升吞吐能力。另一方面,量子计算具有强大的计算能力和并行处理能力,与人工智能结合有望为Ptychography带来更高效的算法和解决方案。未来可以探索将量子计算应用于Ptychography中的数据处理、相位恢复等问题,进一步推动该领域的发展。另外,随着高性能计算平台的发展与算力提升,Ptychography海量冗余数据的存储、传输与重建计算瓶颈将得到显著缓解,并更有利于推动近实时和在线重建流程。同时,新型探测器在动态范围、计数率、读出噪声与稳定性等方面的提升,有助于降低背景与系统噪声对衍射数据的影响,并为后续的算法去噪与高质量重建提供更可靠的数据基础。综合来看,这些技术进步预计将为人工智能方法在Ptychography位置误差建模、预测与校正方面提供更丰富的数据条件与更强的计算支撑,从而推动相关方法向更高精度与更强鲁棒性发展。

最近几年,也出现了一些与人工智能相结合的位置校正的方法,但目前还只是初期的探索阶段,如PtychoNN等模型通过监督训练,可在较大探针位置误差场景下实现位置预测与初值修正,并在后续优化重建中显著改善成像质量。当前人工智能与Ptychography的融合已成为一个颇具前景的发展方向,不仅有望提升成像效率与重建质量,

也推动了一系列新算法思路的出现与落地。例如,借鉴深度学习中优化思想与计算框架的动量加速方法<sup>[74-75]</sup>,借助自动微分框架实现可微优化的方法<sup>[56-57]</sup>等。预计类似的思想也将进一步扩展到位置误差校正研究中:一方面,可以通过这种新型的方式去处理传统方法无法处理的复杂问题,为相关研究人员打开一个新思路;另一方面,新方法的引入也会启发传统的位置误差处理方法进一步发展,进而推动Ptychography的发展。

**作者贡献声明** 张文采负责文献资料收集整理,文章撰写;许子健负责文章审阅修改,整体结构把控监督。所有作者均已阅读并同意最终文本。

## 参考文献

- 1 Faulkner H M L, Rodenburg J M. Movable aperture lensless transmission microscopy: a novel phase retrieval algorithm[J]. *Physical Review Letters*, 2004, **93**(2): 023903. DOI: 10.1103/physrevlett.93.023903.
- 2 Dierolf M, Bunk O, Kynde S, *et al.* Ptychography & lensless X-ray imaging[J]. *Europhysics News*, 2008, **39**(1): 22-24. DOI: 10.1051/epn:2008003.
- 3 Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G. Transmission microscopy without lenses for objects of unlimited size [J]. *Ultramicroscopy*, 2007, **107**(2/3): 227-231. DOI: 10.1016/j.ultramic.2006.07.007.
- 4 许文慧, 宁守琼, 张福才, 等. 部分相干衍射成像综述[J]. *物理学报*, 2021, **70**(21): 214201. DOI: 10.7498/aps.70.20211020.  
XU Wenhui, NING Shoucong, ZHANG Fucui, *et al.* Review of partially coherent diffractive imaging[J]. *Acta Physica Sinica*, 2021, **70**(21): 214201. DOI: 10.7498/aps.70.20211020.
- 5 孙媛惠. 基于叠层衍射成像的相位恢复技术研究[D]. 无锡: 江南大学, 2018.  
SUN Aihui. Research on phase retrieval technology based on ptychographic imaging[D]. Wuxi: Jiangnan University, 2018.
- 6 潘兴臣, 刘诚, 肖伟刚, 等. 相干衍射成像技术的最新进展: 层叠相位重建技术[J]. *激光与光电子学进展*, 2022, **59**(22): 2200001. DOI: 10.3788/LOP202259.2200001.  
PAN Xingchen, LIU Cheng, XIAO Weigang, *et al.* Recent progress in coherent diffractive imaging: ptychographic phase retrieval technology[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2022, **59**(22): 2200001. DOI: 10.3788/LOP202259.2200001.
- 7 刘海岗, 许子健, 张祥志, 等. 中心光束阻挡对叠层相干

- 衍射成像的影响[J]. 物理学报, 2013, **62**(15): 150702. DOI: 10.7498/aps.62.150702.
- LIU Haigang, XU Zijian, ZHANG Xiangzhi, *et al.* Influence of central beamstop on ptychographic coherent diffractive imaging[J]. Acta Physica Sinica, 2013, **62**(15): 150702. DOI: 10.7498/aps.62.150702.
- 8 刘海岗, 许子健, 王春鹏, 等. 同步辐射X射线光斑信息对扫描相干衍射成像的影响[J]. 辐射研究与辐射工艺学报, 2013, **31**(6): 060101.
- LIU Haigang, XU Zijian, WANG Chunpeng, *et al.* Influence of synchrotron X-ray spot information on scanning coherent diffractive imaging[J]. Journal of Radiation Research and Radiation Processing, 2013, **31**(6): 060101.
- 9 潘新宇, 毕筱雪, 董政, 等. 叠层相干衍射成像算法发展综述[J]. 物理学报, 2023, **72**(5): 054202. DOI: 10.7498/aps.72.20221889.
- PAN Xinyu, BI Xiaoxue, DONG Zheng, *et al.* Review of the development of ptychographic coherent diffractive imaging algorithms[J]. Acta Physica Sinica, 2023, **72**(5): 054202. DOI: 10.7498/aps.72.20221889.
- 10 Hübner F, Rodenburg J M, Maiden A M, *et al.* Extended ptychography in the transmission electron microscope: possibilities and limitations[J]. Ultramicroscopy, 2011, **111**(8): 1117-1123. DOI: 10.1016/j.ultramic.2011.02.005.
- 11 Maiden A M, Humphry M J, Sarahan M C, *et al.* An annealing algorithm to correct positioning errors in ptychography[J]. Ultramicroscopy, 2012, **120**: 64-72. DOI: 10.1016/j.ultramic.2012.06.001.
- 12 Guizar-Sicairos M, Fienup J R. Phase retrieval with transverse translation diversity: a nonlinear optimization approach[J]. Optics Express, 2008, **16**(10): 7264. DOI: 10.1364/oe.16.007264.
- 13 Zhang F C, Peterson I, Vila-Comamala J, *et al.* Translation position determination in ptychographic coherent diffraction imaging[J]. Optics Express, 2013, **21**(11): 13592. DOI: 10.1364/oe.21.013592.
- 14 Shenfield A, Rodenburg J M. Evolutionary determination of experimental parameters for ptychographical imaging [J]. Journal of Applied Physics, 2011, **109**(12): 124510. DOI: 10.1063/1.3600235.
- 15 Dwivedi P, Konijnenberg A P, Pereira S F, *et al.* Lateral position correction in ptychography using the gradient of intensity patterns[J]. Ultramicroscopy, 2018, **192**: 29-36. DOI: 10.1016/j.ultramic.2018.04.004.
- 16 Maiden A M, Rodenburg J M. An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging[J]. Ultramicroscopy, 2009, **109**(10): 1256-1262. DOI: 10.1016/j.ultramic.2009.05.012.
- 17 Wang H Y, Liu C, Pan X C, *et al.* Phase imaging with rotating illumination[J]. Chinese Optics Letters, 2014, **12**(1): 10501-10504. DOI: 10.3788/col201412.010501.
- 18 Sun A H, He X L, Kong Y, *et al.* Ultra-high speed digital micro-mirror device based ptychographic iterative engine method[J]. Biomedical Optics Express, 2017, **8**(7): 3155. DOI: 10.1364/boe.8.003155.
- 19 Sun A H, Kong Y, Meng X, *et al.* Variable aperture-based ptychographical iterative engine method[J]. Journal of Biomedical Optics, 2018, **23**(2): 1. DOI: 10.1117/1.jbo.23.2.026007.
- 20 Sun A H, Kong Y, Jiang Z L, *et al.* Sub-aperture switching based ptychographic iterative engine (sasPIE) method for quantitative imaging[J]. Optics Communications, 2018, **410**: 514-519. DOI: 10.1016/j.optcom.2017.10.042.
- 21 张福才, 许文慧, 何振飞, 等. 相干衍射成像研究进展: 叠层扫描相干衍射成像和相干调制成像[J]. 红外与激光工程, 2019, **48**(6): 603011. DOI: 10.3788/IRLA201948.0603011.
- ZHANG Fucui, XU Wenhui, HE Zhenfei, *et al.* Progress in coherent diffraction imaging: ptychographic scanning coherent diffraction imaging and coherent modulation imaging[J]. Infrared and Laser Engineering, 2019, **48**(6): 603011. DOI: 10.3788/IRLA201948.0603011.
- 22 潘兴臣, 刘诚, 陶华, 等. Ptychography相位成像及其关键技术进展(特邀)[J]. 光学学报, 2020, **40**(1): 0111010. DOI: 10.3788/AOS202040.0111010.
- PAN Xingchen, LIU Cheng, TAO Hua, *et al.* Ptychographic phase imaging and its key technological advances[J]. Acta Optica Sinica, 2020, **40**(1): 0111010. DOI: 10.3788/AOS202040.0111010.
- 23 刘诚, 潘兴臣, 朱健强, 等. 基于光栅分光法的相干衍射成像[J]. 物理学报, 2013, **62**(18): 184204. DOI: 10.7498/aps.62.184204.
- LIU Cheng, PAN Xingchen, ZHU Jianqiang, *et al.* Coherent diffractive imaging based on grating splitting method[J]. Acta Physica Sinica, 2013, **62**(18): 184204. DOI: 10.7498/aps.62.184204.
- 24 Aidukas T, Phillips N W, Diaz A, *et al.* High-performance 4-nm-resolution X-ray tomography using burst ptychography[J]. Nature, 2024, **632**(8023): 81-88. DOI: 10.1038/s41586-024-07615-6.
- 25 Thibault P, Menzel A. Reconstructing state mixtures from diffraction measurements[J]. Nature, 2013, **494**(7435): 68-71. DOI: 10.1038/nature11806.
- 26 Whitehead L W, Williams G J, Quiney H M, *et al.*

- Diffraction imaging using partially coherent X rays[J]. Physical Review Letters, 2009, **103**(24): 243902. DOI: 10.1103/physrevlett.103.243902.
- 27 Flewett S, Quiney H M, Tran C Q, *et al.* Extracting coherent modes from partially coherent wavefields[J]. Optics Letters, 2009, **34**(14): 2198. DOI: 10.1364/ol.34.002198.
  - 28 窦建泰, 高志山, 马骏, 等. 基于图像信息熵的ptychography轴向距离误差校正[J]. 物理学报, 2017, **66**(16): 164203. DOI: 10.7498/aps.66.164203.  
DOU Jiantai, GAO Zhishan, MA Jun, *et al.* Axial distance error correction of ptychography based on image information entropy[J]. Acta Physica Sinica, 2017, **66**(16): 164203. DOI: 10.7498/aps.66.164203.
  - 29 Dou J T, Gao Z S, Ma J, *et al.* Iterative autofocusing strategy for axial distance error correction in ptychography[J]. Optics and Lasers in Engineering, 2017, **98**: 56-61. DOI: 10.1016/j.optlaseng.2017.06.003.
  - 30 Ma R, Yang D Y, Yu T, *et al.* Sharpness-statistics-based auto-focusing algorithm for optical ptychography[J]. Optics and Lasers in Engineering, 2020, **128**: 106053. DOI: 10.1016/j.optlaseng.2020.106053.
  - 31 He X L, Veetil S P, Jiang Z L, *et al.* Analysis of influence of object - detector distance error on the reconstructed object and probe in ptychographic imaging[J]. AIP Advances, 2022, **12**(6): 065312. DOI: 10.1063/5.0089305.
  - 32 郑晨, 何小亮, 刘诚, 等. 关于轴向距离误差对PIE成像质量影响的研究[J]. 光学学报, 2014, **34**(10): 1011003. DOI: 10.3788/AOS201434.1011003.  
ZHENG Chen, HE Xiaoliang, LIU Cheng, *et al.* Study on the influence of axial distance error on PIE imaging quality[J]. Acta Optica Sinica, 2014, **34**(10): 1011003. DOI: 10.3788/AOS201434.1011003.
  - 33 Lin A Y, Sheng P J, Ning S C, *et al.* Rotational position error correction in ptychography[J]. Applied Optics, 2024, **63**(3): 804. DOI: 10.1364/ao.510143.
  - 34 魏金文, 李儒佳, 吴佳琛, 等. 相位恢复波前重构技术的发展与应用(特邀)[J]. 激光与光电子学进展, 2024, **61**(2): 0211001. DOI: 10.3788/LOP232710.  
WEI Jinwen, LI Rujia, WU Jiachen, *et al.* Development and application of phase retrieval wavefront reconstruction technology (invited) [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2024, **61**(2): 0211001. DOI: 10.3788/LOP232710.
  - 35 McCulloch W S, Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity[J]. The Bulletin of Mathematical Biophysics, 1943, **5**(4): 115-133. DOI: 10.1007/BF02478259.
  - 36 Hinton G E, Osindero S, Teh Y W. A fast learning algorithm for deep belief nets[J]. Neural Computation, 2006, **18**(7): 1527-1554. DOI: 10.1162/neco.2006.18.7.1527.
  - 37 LeCun Y, Bengio Y, Hinton G. Deep learning[J]. Nature, 2015, **521**(7553): 436-444. DOI: 10.1038/nature14539.
  - 38 Hinton G E, Salakhutdinov R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks[J]. Science, 2006, **313**(5786): 504-507. DOI: 10.1126/science.1127647.
  - 39 LeCun Y, Bottou L, Bengio Y, *et al.* Gradient-based learning applied to document recognition[J]. Proceedings of the IEEE, 1998, **86**(11): 2278-2324. DOI: 10.1109/5.726791.
  - 40 Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks[J]. Communications of the ACM, 2017, **60**(6): 84-90. DOI: 10.1145/3065386.
  - 41 Simonyan K, Zisserman A. Very deep convolutional networks for large-scale image recognition[C]// Proceedings of the International Conference on Learning Representations (ICLR). San Diego, CA, USA: ICLR, 2015.
  - 42 He K M, Zhang X Y, Ren S Q, *et al.* Deep residual learning for image recognition[C]//2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Las Vegas, NV, USA, June 27-30, 2016. Piscataway: IEEE, 2016: 770778. DOI: 10.1109/CVPR.2016.90.
  - 43 Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, *et al.* Attention is all you need[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 30. Red Hook: Curran Associates, 2017: 5998-6008. DOI:10.48550/arXiv.1706.03762.
  - 44 Van Veen F, Leijnen S. The neural network zoo[EB/OL]. (2016-09-14) [2025-03-03]. <https://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo>.
  - 45 Ronneberger O, Fischer P, Brox T. U-Net: convolutional networks for biomedical image segmentation[C]// Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention - MICCAI 2015. Cham: Springer, 2015: 234-241. DOI: 10.1007/978-3-319-24574-4\_28.
  - 46 Işıl Ç, Oktem F S, Koç A. Deep iterative reconstruction for phase retrieval[J]. Applied Optics, 2019, **58**(20): 5422. DOI: 10.1364/ao.58.005422.
  - 47 Kappeler A, Ghosh S, Holloway J, *et al.* Ptychnet: CNN based Fourier ptychography[C]//2017 IEEE International Conference on Image Processing (ICIP). September 17-

- 20, 2017. Beijing: IEEE, 2017: 1712-1716. DOI: 10.1109/icip.2017.8296574.
- 48 Zhang K, Zuo W M, Chen Y J, *et al.* Beyond a Gaussian denoiser: residual learning of deep CNN for image denoising[J]. IEEE Transactions on Image Processing, 2017, **26**(7): 3142-3155. DOI: 10.1109/tip.2017.2662206.
- 49 Pan X Y, Wang S, Zhou Z Z, *et al.* An efficient ptychography reconstruction strategy through fine-tuning of large pre-trained deep learning model[J]. iScience, 2023, **26**(12): 108420. DOI: 10.1016/j.isci.2023.108420.
- 50 Cherukara M J, Zhou T, Nashed Y, *et al.* AI-enabled high-resolution scanning coherent diffraction imaging[J]. Applied Physics Letters, 2020, **117**(4): 044103. DOI: 10.1063/5.0013065.
- 51 Wang K Q, Song L, Wang C T, *et al.* On the use of deep learning for phase recovery[J]. Light: Science & Applications, 2024, **13**: 4. DOI: 10.1038/s41377-023-01340-x.
- 52 Fienup J R. Phase retrieval algorithms: a comparison[J]. Applied Optics, 1982, **21**(15): 2758-2769. DOI: 10.1364/AO.21.002758.
- 53 Zhang J L, Tao X, Yang L, *et al.* Forward imaging neural network with correction of positional misalignment for Fourier ptychographic microscopy[J]. Optics Express, 2020, **28**(16): 23164. DOI: 10.1364/oe.398951.
- 54 Yang D, Zhang S, Zheng C, *et al.* Fourier ptychography multi-parameter neural network with composite physical priori optimization[EB/OL]. (2022-02-18) [2025-03-02]. <http://arxiv.org/abs/2202.10239>. DOI: 10.48550/arXiv.2202.10239.
- 55 Zheng C J, Zhang S H, Yang D L, *et al.* Robust full-pose-parameter estimation for the LED array in Fourier ptychographic microscopy[J]. Biomedical Optics Express, 2022, **13**(8): 4468. DOI: 10.1364/boe.467622.
- 56 Guzzi F, Kourousias G, Billè F, *et al.* Refining scan positions in ptychography through error minimisation and potential application of machine learning[J]. Journal of Instrumentation, 2018, **13**(6): C06002. DOI: 10.1088/1748-0221/13/06/C06002.
- 57 Guzzi F, Kourousias G, Gianoncelli A, *et al.* A parameter refinement method for ptychography based on deep learning concepts[J]. Condensed Matter, 2021, **6**(4): 36. DOI: 10.3390/condmat6040036.
- 58 Du M, Zhou T, Deng J, *et al.* Predicting ptychography probe positions using single-shot phase retrieval neural network[EB/OL]. (2024-05-31) [2025-03-02]. <http://arxiv.org/abs/2405.20910>. DOI: 10.48550/arXiv.2405.20910.
- 59 Sohil F, Sohali M U, Shabbir J. Book review: an introduction to statistical learning with applications in R [J]. Statistical Theory and Related Fields, 2022, **6**(1): 87. DOI: 10.1080/24754269.2021.198026.
- 60 伊恩·古德费洛, 约书亚·本吉奥, 亚伦·库维尔. 深度学习[M]. 北京: 人民邮电出版社, 2017: 95-96.
- Goodfellow I, Bengio Y, Courville A. Deep learning[M]. Beijing: Posts & Telecom Press, 2017: 95-96.
- 61 Koho S, Tortarolo G, Castello M, *et al.* Fourier ring correlation simplifies image restoration in fluorescence microscopy[J]. Nature Communications, 2019, **10**: 3103. DOI: 10.1038/s41467-019-11024-z.
- 62 Zhao W S, Huang X S, Yang J Y, *et al.* Quantitatively mapping local quality of super-resolution microscopy by rolling Fourier ring correlation[J]. Light: Science & Applications, 2023, **12**: 298. DOI: 10.1038/s41377-023-01321-0.
- 63 Nieuwenhuizen R P J, Lidke K A, Bates M, *et al.* Measuring image resolution in optical nanoscopy[J]. Nature Methods, 2013, **10**(6): 557-562. DOI: 10.1038/nmeth.2448.
- 64 Wilke R N, Priebe M, Bartels M, *et al.* Hard X-ray imaging of bacterial cells: nano-diffraction and ptychographic reconstruction[J]. Optics Express, 2012, **20**(17): 19232. DOI: 10.1364/oe.20.019232.
- 65 Wilke R N, Wallentin J, Osterhoff M, *et al.* High-flux ptychographic imaging using the new 55  $\mu\text{m}$ -pixel detector 'Lambda' based on the Medipix3 readout chip[J]. Acta Crystallographica Section A Foundations and Advances, 2014, **70**(6): 552-562. DOI: 10.1107/s2053273314014545.
- 66 Giewekemeyer K, Thibault P, Kalbfleisch S, *et al.* Quantitative biological imaging by ptychographic X-ray diffraction microscopy[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2010, **107**(2): 529-534. DOI: 10.1073/pnas.0905846107.
- 67 Rohou A. Fourier shell correlation criteria for local resolution estimation[EB/OL]. (2020-03-02) [2025-03-02]. <http://biorxiv.org/lookup/doi/10.1101/2020.03.01.972067>. DOI: 10.1101/2020.03.01.972067.
- 68 van Heel M, Schatz M. Fourier shell correlation threshold criteria[J]. Journal of Structural Biology, 2005, **151**(3): 250-262. DOI: 10.1016/j.jsb.2005.05.009.
- 69 Gonçalves D P. Estimating uncertainty in resolution tests [J]. Optical Engineering, 2006, **45**(5): 053601. DOI: 10.1117/1.2202914.
- 70 Loeb C, Wueller D, Klinge B, *et al.* Digital camera resolution measurement using sinusoidal Siemens stars [C]//Digital Photography III. San Jose, CA, USA: SPIE,

2007. DOI: 10.1117/12.703817.
- 71 Elser V. Phase retrieval by iterated projections[J]. Journal of the Optical Society of America A, 2003, **20**(1): 40-55. DOI: 10.1364/JOSAA.20.000040.
- 72 Thibault P, Dierolf M, Bunk O, *et al.* Probe retrieval in ptychographic coherent diffractive imaging[J]. Ultramicroscopy, 2009, **109**(4): 338-343. DOI: 10.1016/j.ultramic.2008.12.011.
- 73 Thibault P, Dierolf M, Menzel A, *et al.* High-resolution scanning X-ray diffraction microscopy[J]. Science, 2008, **321**(5887): 379-382. DOI: 10.1126/science.1158573.
- 74 陶旭磊, 许子健, 王春鹏, 等. 动量加速方法提高层叠衍射成像的质量[J]. 核技术, 2019, **42**(5): 050101. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2019.hjs.42.050102. TAO Xulei, XU Zijian, WANG Chunpeng, *et al.* Improving the quality of ptychographic imaging by momentum acceleration method[J]. Nuclear Techniques, 2019, **42**(5): 050101. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2019.hjs.42.050102
- 75 Maiden A, Johnson D, Li P. Further improvements to the ptychographical iterative engine[J]. Optica, 2017, **4**(7): 736. DOI: 10.1364/optica.4.000736.