

Implementação de algoritmos para Tomografia de Campo Escuro por Varredura.

Orientador: Carlos Sato Baraldi Dias

Instituição: Laboratório Nacional de Luz Sincrotron

Introdução

O uso de técnicas de imageamento utilizando raios X tem se mostrado uma ferramenta cada vez mais importante e comum para o estudo dos mais diversos sistemas. De fato, podemos atribuir muito dos principais desenvolvimentos científicos ao desenvolvimento de diferentes técnicas de imagem (microscópios e telescópios) que nos permitem ver o que antes era inexplorado e desconhecido. Desta forma, não é difícil imaginar que explorando a capacidade dos materiais de espalhar os raios-X e desenvolvendo métodos para mapear tal característica da matéria abrimos mais uma nova janela para o desenvolvimento científico. Esta ideia, de forma geral, pode ser classificado como um imageamento por campo escuro (Dark Field - DF)¹ tendo análogos tanto na microscopia óptica quanto eletrônica. No contexto dos raios X o desenvolvimento de elementos ópticos capazes de focalizar o feixe de raios X abriu o campo da microscopia conhecido como Microscopia por transmissão de raios-X (Scanning Transmission X-ray Microscopy – STXM) que posteriormente permitiu o desenvolvimento de técnicas como DPC (Differential Phase Contrast), uma versão própria de DIC (Differential Phase Contrast) assim como DF². Adicionalmente, é pertinente comentar que a análise dos fótons de raios X espalhados também pode gerar imagens cujo contraste se relaciona as técnicas como SAXS (Small Angle X ray Scattering), WAXS (Wide Angle X ray Scattering) ou até mesmo difração de raios X desde que a devida instrumentação e interpretação das imagens seja feita.

Paralelamente, podemos destacar a capacidade dos raios X de fazer o imageamento de estruturas tridimensionais através da técnica de tomografia computadorizada (Computed Tomography - CT). Inicialmente dependente apenas do coeficiente de absorção para formação do contraste na imagem, os recentes desenvolvimentos na instrumentação e em novos algoritmos tem permitido uma diversificação da técnica explorando outras modalidades de contraste, incluindo a capacidade do material de espalhar raios X.

Este projeto se enquadra dentro do esforço para a construção da nova fonte de luz sincrotron, o projeto Sírius, que incluirá a linha de luz Carnáuba³. Nela teremos um feixe de raios X focalizado de aproximadamente 100 nm cuja luz espalhada será analisada por um detector de área localizado após a amostra. Desta forma o desenvolvimento proposto neste projeto se enquadra dentro dos desenvolvimentos em microscopia de raios X previstos para a linha Carnáuba.

O projeto aqui proposto visa implementar um algoritmo para tomografia de campo escuro, mais especificamente de DPC⁴. O que diretamente disponibilizaria mais uma modalidade para o imageamento de estruturas tridimensionais a linha Carnáuba. No entanto, destacamos também que, embora não esteja no escopo do trabalho, a implementação aqui proposta permitiria posteriores

desenvolvimentos afim de poder implementar outras modalidades de tomografia baseadas no espalhamento de raios X como as técnicas de SAXS, WAXS ou até mesmo difração.

Estado da arte

É possível identificar inúmeras modalidades de tomografia cada qual explorando diferentes formas de contraste com diferentes propósitos e aplicações. Dentre elas podemos destacar contrastes baseados em absorção de raios X como contraste elementar por XAS e magnético por XMCD; contraste baseados em fluorescência de raios X; e contraste por espalhamento por raios X como DPC e SAXS. A escolha pelo o tipo mais adequado de contraste deve obviamente passar pelas propriedades da amostra e o fenômeno que se deseja analisar. Neste contexto, DPC e DIC são técnicas que permitem um melhor contraste para amostras que apresentam pouca absorção, como por exemplo amostras biológicas. Sua implementação era inicialmente realizada com detectores dedicados⁴, mas hoje já podem ser substituídos por detectores de área seguido de um pós processamento entre regiões de interesse (Region of Interest - ROI) no detector⁵, ilustrado na Figura 1.

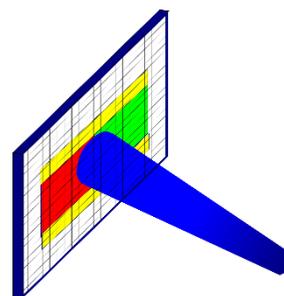


Figura 1- ROI para calculo de DPC

No que diz respeito à tomografia a versatilidade da técnica permite implementar inúmeros algoritmos de reconstrução especializados a diferentes modalidades. No entanto em sua maioria a reconstrução é feita sobre a projeção completa o que obriga o processamento da ROI antes da reconstrução de tomografia. Neste projeto propomos uma estratégia de reconstrução que permitiria o processamento da ROI e conseqüente processamento para DPC após a reconstrução tomográfica, dando assim mais versatilidade a técnica de tomografia. Esta estratégia tem um custo computacional mais elevado, e por isso iremos usar o algoritmo Raft⁶, que é extremamente eficiente.

Por fim, o algoritmo proposto servirá para o futuro desenvolvimento e testes de modos de tomografia mais sofisticados com contraste por SAXS e difração.

Objetivos

Implementação de algoritmos que permitam o processamento de ROIs na forma convencional para obtenção de projeções por DPC permitindo a implementação dos modos DPC e DIC para a linha Carnaúba. Estes modos serão testados durante o comissionamento da linha e incorporados a estrutura da linha ficando disponíveis a usuários.

O desenvolvimento do algoritmo de tomografia para campo escuro será construído a partir do algoritmo Raft um dos algoritmos mais eficientes para reconstrução tomográfica. Adicionalmente também serão incluídos ao algoritmo as ferramentas necessárias para o processamento dos volumes e obtenção da imagens tomográficas por contraste DPC.

Metodologia

No cronograma apresentado propomos o estudo e desenvolvimento de algoritmos de tomografia para a reconstrução de imagens de campo escuro. Diferentes técnicas poderiam ser exploradas mas o projeto irá focar na técnica de DPC dada sua simplicidade. A técnica será empregada na linha Carnaúba e ficará disponível aos usuários.

Tipicamente a imagem de DPC é calculada individualmente e gera uma imagem de projeção que então é usada para o cálculo da tomografia. O algoritmo proposto neste projeto consiste em analisar cada pixel do detector de forma independente tratando-o como um detector isolado gerando uma imagem de projeção para cada pixel: Considere uma varredura de $M \times M$ pontos sobre a amostra e um detector composto por $N \times N$ pixels. Convencionalmente cada imagem de N^2 pixels seria convertido a um valor escalar o que resulta numa única projeção de $M \times M$ pixels. Já na estratégia proposta teríamos N^2 projeções de $M \times M$ pixels, Figura 2.

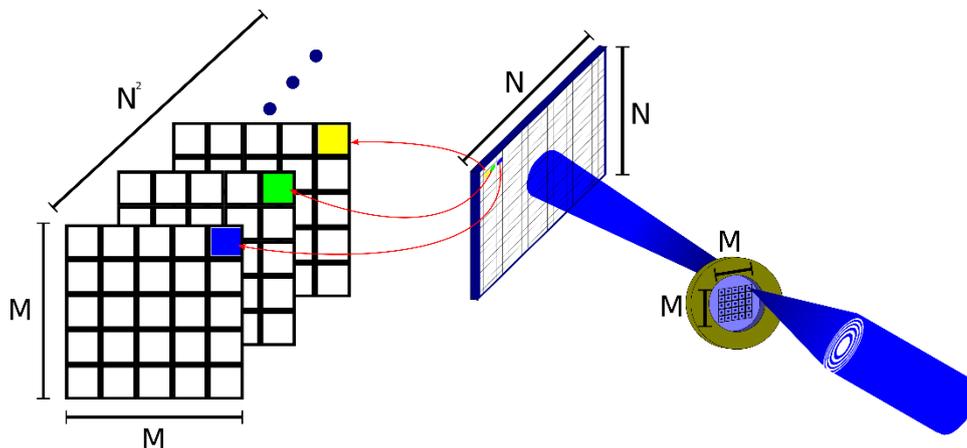


Figura 2- Processo de imageamento usado para o algoritmo de tomografia proposto

Como o intuito final é a aquisição e reconstrução tomográfica a estratégia convencional para DPC resulta em um único volume ao passo que na proposta teríamos N^2 volumes, estes então poderiam ser analisados para o cálculo de DPC. Fica assim óbvio o peso computacional para o reconstrução tomográfica, no entanto, destacamos que algoritmos de tomografia modernos como o Raft⁶ são capazes de reconstruir volumes inteiros em milésimos de segundos e portanto são rápidos para o processamento exigido.

Inicialmente o aluno deverá se familiarizar com os conceitos que envolvem a microscopia de varredura por raios X, principalmente no que diz respeito a técnica de STXM. Mais especificamente, ele deverá ser capaz de processar os dados do detector de área posicionado após a amostra e que coleta os fótons transmitidos pela amostra. Com isto o aluno poderá implementar algoritmos de ROI e análise para as primeiras implementações de DPC e conduzir as primeiras medidas durante o comissionamento da linha Carnáuba.

Em seguida o aluno deverá se familiarizar com os conceitos básicos de tomografia estudando seus fundamentos. Isto lhe permitirá escrever o código de processamento e de reconstrução utilizando o algoritmo Raft⁶ como kernel para reconstrução tomográfica. Por fim, ferramenta de análises simples como centro de massa e estatísticas como mediana permitirão extrair dos volumes reconstruídos os coeficientes de contraste da imagem tridimensional final.

Finalmente, é preciso destacar que o acesso do aluno alinhado durante o comissionamento fará com que ele seja exposto a um ambiente dinâmico de desenvolvimento permitindo ao aluno outros aprimoramentos que não estão previstos no projeto no que tange a microscopia de raios X.

Cronograma

1º Trimestre: Familiarização com a instrumentação da linha Carnaúba e com a linguagem de programação python. Prototipagem e simulação de dados visando a técnica de DPC e das ferramentas necessárias para o pós-processamento.

2º Trimestre: Familiarização e testes experimentais da técnica de DPC na linha Carnaúba com a aquisição e reconstrução de projeções com diferentes modos das análises e manipulação das ROIs

3º Trimestre: Aquisição de dados de tomografia para reconstrução tridimensional através de projeções por DPC convencional. Implementação do algoritmo proposto e análise.

4º Trimestre: Reconstrução tridimensional pelo algoritmo proposto e compilação dos resultados no relatório.

Bibliografia

1. Morrison, G. R. & Browne, M. T. Dark-field imaging with the scanning transmission x-ray microscope. *Rev. Sci. Instrum.* **63**, 611–614 (1992).
2. Feser, M. *et al.* Scanning transmission soft x-ray microscopy at beamline X-1A at the NSLS: advances in instrumentation and selected applications. in *Soft X-Ray and EUV Imaging Systems II* (eds. Tichenor, D. A. & Folta, J. A.) **4506**, 146–153 (2001).
3. Adams, W. S. *et al.* CARNAÚBA: The Coherent X-Ray Nanoprobe Beamline for the Brazilian Synchrotron SIRIUS/LNLS THE SPECTRUM OF THE COMPANION OF SIRIUS Multilayer Laue Lenses with Focal Length of 10 mm The dispersive x-ray absorption spectroscopy beamline at LNLS Ionization, d. *J. Phys. Ser. J. Phys. Conf. Ser.* **849**, (2017).
4. Hornberger, B. *et al.* Differential phase contrast with a segmented detector in a scanning X-ray microprobe. *J. Synchrotron Radiat.* **15**, 355–362 (2008).
5. Menzel, A. *et al.* Hard X-ray scanning transmission microscopy with a 2D pixel array detector. *J. Phys. Conf. Ser.* **186**, 4–7 (2009).
6. Eduardo Xavier Silva Miqueles. A Transformada Generalizada Atenuada de Radon: Inversão Analítica, Aproximações, Métodos Iterativos e Aplicações em Tomografia por Fluorescência. (2010).