

Программный комплекс cdi-kit для обработки данных когерентной дифракционной визуализации

А.В. Мурзина^{1,2}

¹ Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53

² НИЦ «Курчатовский институт», 123182, г. Москва, площадь академика Курчатова, д. 1

Когерентная дифракционная визуализация (CDI) – безлинзовый метод рентгеновской микроскопии, основу которого составляет численное итерационное решение фазовой проблемы по зарегистрированной дифракционной картине. CDI позволяет восстанавливать структуру объекта за счёт реконструкции комплексного поля рассеянного объектом излучения, с пространственным разрешением, теоретически ограниченным только длиной волны. Благодаря этим свойствам когерентная безлинзовая визуализация за последние десятилетия получила широкое применение в исследованиях микро- и нанобъектов в биологии, материаловедении и других областях [1].

В связи с развитием когерентных ярких источников рентгеновского излучения, в частности, с появлением источников синхротронного излучения четвёртого поколения и лазеров на свободных электронах (СКИФ, СИЛА и др.), метод полнопольной когерентной безлинзовой визуализации представляет особый интерес [2]. Для проектируемых экспериментальных станций с реализацией метода CDI необходимы программные средства, обеспечивающие обработку данных, включая чтение и предобработку исходных измерений, реализацию различных итерационных алгоритмов восстановления фазы, а также вычисление специализированных метрик качества реконструкции, позволяющих контролировать и оптимизировать стратегию восстановления комплексного поля объекта. На данный момент, на

большинстве экспериментальных станций CDI эти шаги реализованы набором разрозненных программ, что затрудняет воспроизводимость кода для различных экспериментов, его масштабируемость и сравнительный анализ работы различных алгоритмов реконструкции фазы.

В данной работе представлена библиотека cdi-kit, разработанная на языке программирования Python, которая позволяет реализовать полный цикл обработки данных CDI, включая восстановление изображений методами реконструкции фазы. Описана архитектура библиотеки, а также продемонстрированы основные инструменты и примеры типичных сценариев использования. Обсуждаются перспективы расширения программного пакета за счёт включения актуальных подходов и алгоритмов метода восстановления фазы и интеграции с существующими открытыми пакетами [3] для родственных когерентных методов.

1. J. Miao. Nature (2025), 637, 281–295.
2. Я. В. Ракиун, Ю. В. Хомяков, Е. И. Глушков, А. С. Гоголев, М. В. Горбачев, А. В. Дарьин, Ф. А. Дарьин, И. П. Долбня, С. В. Раценко, В. А. Чернов, Н. И. Чхало, М. Р. Шарафутдинов. Известия ТПУ. Инжиниринг георесурсов (2025), 336, 229-251.
3. B. Enders, P. Thibault. Proc. R. Soc. A (2016), 472, 20160640.