arXiv:2303.18043v1 [physics.ins-det] 31 Mar 2023

欧洲XFEL的兆赫兹显微成像数据在线动态平场校正

Sarlota Birnsteinova[a, *]、Danilo E. Ferreira de Lima[a]、Egor Sobolev[a]、Henry J. Kirkwood[a]、Valerio Bellucci[a]、Richard J. Bean[a]、Chan Kim[a]、Jayanath C. P. Koliyadu[a]、Tokushi Sato[a]、Fabio Dall' Antonia[a]、EleniMyrto Asimakopoulou[b]、Zisheng Yao[b]、Khachiwan Buakor[a, b]、Yuhe Zhang[b]、Alke Meents[c]、Henry N. Chapman[c, d]、Adrian P. Mancuso[a, e, f]、Pablo Villanueva-Perez[b]、Patrik Vagovič[c, a]

a 欧洲XFEL GmbH，Schenefeld，德国 b 同步辐射研究与NanoLund，隆德大学，瑞典隆德 c 自由电子激光科学中心（CFEL），DESY，汉堡，德国 d 汉堡大学，汉堡，德国 e Diamond Light Source Ltd.，哈维尔科学与创新园区，迪德科特，OX11 0DE，英国 f 化学与物理系，拉筹伯分子科学研究所，拉筹伯大学，墨尔本，维多利亚州，澳大利亚

* sarlota.birnsteinova@xfel.eu

摘要

欧洲X射线自由电子激光器（EuXFEL）的X射线显微成像技术以MHz重复频率运行，与其他X射线光源上的常规显微成像技术相比，具有更优异的对比度和时空分辨率。在显微成像实验的在线可视化和离线数据分析中，基线归一化对于相位恢复和模态分解等后续处理步骤至关重要。此外，在数据采集期间获取归一化投影，有助于决策并提升数据质量。然而，XFEL光源的随机性使现有平场归一化方法难以应用于MHz X射线显微成像实验。本文提出一种在线动态平场校正方法，该方法基于动态演变的平场图像进行主成分分析。该方法用于对单个X射线投影进行归一化，并已作为在线分析工具部署于EuXFEL的单颗粒、团簇与生物分子和串行飞秒晶体学（SPB/SFX）仪器上。

1 引言

在过去几十年中，X射线显微成像已成为研究从生物学到材料研究等广泛应用领域的重要工具，应用于第三代和第四代X射线同步辐射光源，在这些光源中，可实现的空间分辨率和灵敏度已提升至极限 [1]。最近，在先进光子源（APS） [2] 以及ESRF（欧洲同步辐射装置） [3, 4], , 同步于单个脉冲的快速MHz频率X射线显微成像技术取得了开创性进展，从而能够对快速随机现象进行成像。最近，欧洲XFEL（EuXFEL） [5]已实现了帧采集与单个X射线脉冲同步的MHz频率X射线显微成像实验。这一发展

得益于X射线自由电子激光器（XFEL）的独特性质。具体而言，EuXFEL是目前唯一能够以MHz频率 [6], 提供高强度脉冲的XFEL光源，为新型方法和应用开辟了潜在空间。EuXFEL每个脉冲提供的光子数（$\sim 10^{12} - 10^{13}$）比最明亮的同步辐射源（即ESRF）多两个到四个数量级。EuXFEL还具有很高的空间相干性，光束路径长达1 km，最大 4 μ弧度发散角，光子能量最高可达30 keV。EuXFEL的独特性质也带来了独特的问题，使高质量MHz显微数据的采集变得复杂。XFEL的X射线脉冲通过SASE过程 [7],产生，这会导致强烈的随机空间波动和时间波动。显微数据中出现的另一类像差通常称为固定模式噪声。它源于探测器像素响应的差异，以及光学系统中的缺陷，例如闪烁体屏、透镜等。理想情况下，应校正图像像差，使观测到的仅是源自X射线与样品相互作用的信号变化。旨在实现这一目标的方法通常称为“平场校正”方法。

平场校正方法依赖于对采集图像的多次重复结果取平均值，以获得参考图像。使用光束照明采集的参考图像称为“平场图像”，而在没有光束照明的情况下采集的图像则称为“暗场图像”。然而，传统平场校正是一种稳态方法，假设平场随时间保持稳定，因此无法充分归一化随机效应，例如由 SASE过程引起的效应；SASE过程会导致 XFEL 光束场在不同脉冲之间发生变化。

已有多种方法可用于校正这两种效应 [8–11]。针对动态变化平场的归一化问题，有一种方法 [8], 将参考平场表示在潜在低维向量空间中，并在该空间内为每幅输入图像选取一个“有效”平场。这种称为动态平场校正的方法最初在文献 [8] 中针对同步辐射数据提出。类似方法也已应用于 EuXFEL 的高放大全场成像数据 [9]，并与深度学习方法 [10]相结合。

本文介绍了一种在 EuXFEL 使用的在线方法，用于对 MHz显微数据执行动态平场归一化。EuXFEL 用户在进行实验时通常需要快速反馈，以便调整配置，提高所采集数据的质量。在这种情况下，能否在实验期间获得校正图像，可能决定实验能否成功，或是否会因无法获得可靠数据而失败。本文所述的在线平场校正方法经过优化，可在数据到达时向用户提供输出，从而将数据采集与分析之间的延迟降至最低。本文提出的方法还可指示作为参考收集的平场图像是否足够，或者是否因实验条件发生变化而必须收集新的数据集。这有助于提升该方法的性能，因为在 SASE照明发生波动的情况下，能够充分描述特定测量时刻照明状况的平场数据集会对归一化的最终质量产生关键影响。此外，实验期间提供的归一化数据还可作为其他处理工具的输入重复使用，而这些工具必需使用预处理数据。我们的主要目标是以高速获得高质量的图像数据。我们使用 EuXFEL 提供的软件工具，使我们能够使用在线数据，并以近实时方式执行归一化过程。用于兆赫兹显微成像的在线归一化工具在 EuXFEL 的单颗粒、团簇与生物分子和串行飞秒晶体学（SPB/SFX）仪器上开发并实现。我们基于动态方法的在线实现，与采用传统平场校正方法的结果相比，显著提高了校正图像的质量。

本文的组织结构如下：第 2 节介绍平场校正方法。第 3 节介绍归一化算法及其实现。第 4 节使用测试数据讨论结果及实现性能，随后

详见第5节中的结论与讨论。

2 平场校正

本节简要回顾传统平场校正方法，然后详细介绍本文实现的动态平场校正方法。尽管我们严格遵循 [8,10], ，但仍会在必要时指出方法之间的差异。

静态的传统平场校正可消除照明函数空间分布不均的影响。这类影响可能由不同像素或模块的探测器响应差异，或闪烁体和光学配置造成。假设此前已采集过 N_f 平场图像 f_j 和 N_d暗场 d_k，其中 $j \in [1, N_f]$ 和 $k \in [1, N_d]$ 表示参考图像的索引。静态平场校正仅利用平均平场图像和平均暗场图像，即 $\bar{f} = \frac{1}{N_f} \sum_j f_j$ 和 $\bar{d} = \frac{1}{N_d} \sum_k d_k$。

校正探测器响应不均的一种简单方法是，对每幅原始输入图像 p_i 进行校正，计算如下：

$$p_i^c = \frac{p_i - \bar{d}}{\bar{f} - \bar{d}}. \tag{1}$$

如前所述，由于自放大自发辐射过程的特性，噪声会因次次曝光而异，从而导致不同次曝光之间闪烁体屏上的强度分布发生变化。仅凭平均平场图像无法反映这种变化，因此传统方法在此类条件下会失效。为了校正EuXFEL等自放大自发辐射光源中观察到的随机效应，动态平场校正以有效平场 f_i'取代平均平场，该有效平场取决于采集到的样本图像 p_i本身。采用这一替代方法后，校正图像为

$$p_i^c = \frac{p_i - \bar{d}}{f_i' - \bar{d}}. \tag{2}$$

原则上，真实的照明函数可以是任意图像。不过，采用一些简化假设，就可以近似估计 f_i'。首先，自然可以假设，这种平场可表示为先前采集的平场 f_j 的函数。尽管这种函数可能极为复杂，但一种简单的一阶近似是， f_i' 是已采集平场的线性组合。也就是说，$f_i' = \sum_j w_j f_j$。对于在线平场校正，这一初始假设能够实现快速而可靠的实现，并可通过后续的离线校正加以补充。

虽然可以为每个已采集的平场分别设置一个权重，以此近似有效平场，但还可以进一步简化这种描述：假设只有少数几个已采集的平场是总和的主要贡献项。因此，可以采用数据降维技术来减少所需的系数数量。若假设采集到的平场是高斯分布的样本，则可以使用主成分分析（PCA） [12,13] 将平场的线性组合改写为主成分的线性组合，并仅保留方差最大的分量。被舍弃的分量对线性组合的贡献很小。通常，可以使用 M 个分量，其中 $M \ll N_f$。在这种情况下，我们将有效平场 f_i'展开为：

$$f_i' = \bar{f} + \sum_m^M u_m w_{i\,m}, \tag{3}$$

其中， u_m是均值去除的平场的第 m个主成分， $\{f_j - f\}$和 $w_{i\,m}$是需要在线确定的自由参数。

虽然可以使用函数形式对有效平场 f_i'进行参数化，但必须确定一种选择权重 $w_{i\,m}$的程序，使得对于给定的样本图像 p_i，能够唯一确定有效平场。必须对校正图像施加约束，才能有意义地选择权重。

一项关键限制是保留源自X射线与样品相互作用的细节。这些细节在图像中表现为清晰的过渡或边缘，将信号与背景内容区分开来。因此，自由参数 $w_{i\,m}$ 必须保留此类边缘效应，同时去除由探测器响应不均匀造成的图像伪变化。此外，还希望去除由平场不均匀引入的图像伪变化。图像处理中常使用全变分（TV）去噪这一正则化技术来实现这些目标：最小化校正图像的总变差，同时尽可能使图像与未校正图像相似。有关权重 w_i 计算的详细信息，请参阅以下文章 [8,14]。

此处所述的方法分为两个独立步骤。首先，采集参考平场和暗场，并使用主成分分析从平场数据集中提取最相关的主成分。在含有样品的数据采集过程中，针对每一帧，计算适用于有效平场的权重。完成计算后，将这些权重应用于公式 2 中的线性组合，从而得到最终的校正帧。

此类过程必须以能够在线运行且速度足够快的方式实现，以跟上 EuXFEL 的数据采集速率。下一节将进一步介绍其技术实现。

3 实现

本节对上一节概述的主要在线归一化算法的两个步骤进行了示意性说明。此处详细介绍了该算法实现的部分细节，以及应用于 EuXFEL 的可视化特定功能。

算法第一部分的示意图采用主成分分析，可见于图1(a)；而图1(b)概述了第二部分，该部分为每幅样本图像估计独立的平场，并对所得归一化数据进行可视化。

接下来，我们列出算法实现中使用的一些具体功能和细节。为对目标函数进行全变分最小化，采用了拟牛顿算法 [15]。通过调节精度参数，以最大化校正算法的处理速率。在提高处理速度的同时，也进行了调整以保持校正图像的质量。

通过对进入最小化过程的所有图像进行下采样，算法速度得以进一步提升 [8,10],，同时也降低了校正图像中的噪声。为避免引入更耗时的步骤，我们没有采用任何专门用于降噪的额外算法；这些算法可在后续阶段用于离线处理。

本工作展示了一种新颖的动态平场校正算法实现，可用于EuXFEL的基础设施，并可在实验期间作为归一化技术使用。此外，考虑到在线归一化工具的易用性目标，这里使用EuXFEL的软件框架Karabo [16]进行在线可视化。其中一种实现使用了$metropc$ 框架和$extra\text{-}metro$软件包 [17],，该软件包集成在Karabo框架及其图形用户界面（GUI）中。$metropc$ 框架支持在实验期间灵活调整脚本。除了原始样品图像外，它还支持对校正后的输入数据进行可视化。在线动态平场校正算法的第二种实现使用Karabo bridge [17] 访问Karabo流水线中的在线数据，并使用Qt工具包 [18]执行并行分析和进一步的可视化。

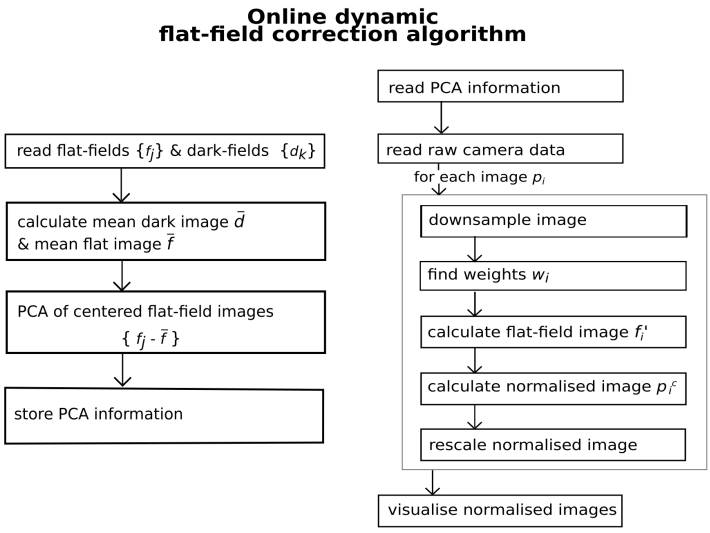


图1。 第一部分对平场数据集进行主成分分析的算法概览（a），以及第二部分执行在线动态平场校正和可视化的算法概览（b）。

4 结果

本文介绍了我们在EuXFEL实现动态平场校正所获得的结果。我们在一个文丘里管数据集 [19]上展示了该算法。数据于2021年3月在EuXFEL的SPB/SFX仪器 [20] 上采集，光子能量为9.3 keV。采用高速帧率的Shimadzu HPV-X2相机，并与一块 $8\mu m$ 厚的LYSO:Ce闪烁体耦合，作为成像系统，具有 $10\times$ 的放大倍率 [5]。为测试我们的方法，采集了由68个暗场序列和67个平场序列组成的数据集。每个脉冲列包含128幅图像，每幅图像的尺寸为 250×400 像素。有效像素尺寸为 $3.2\mu m$。图像的曝光时间极短，由X射线脉冲持续时间决定，并转换为闪烁体中的潜影。闪烁体发出的信号持续时间由闪烁体发光时间决定 τ （LYSO:Ce $\tau \sim 40$ ns）。脉冲列内采集帧的频率为1.128 MHz，脉冲列的采集频率为 $0.08 - 0.1$ Hz，受相机空闲时间限制。本节展示了动态平场校正算法在上述数据集上的性能。

在线数据归一化的第一步是处理平场和暗场数据。我们的目标是采集数百至数千张平场图像，而按照当前的采集速度，这需要进行最长达10分钟的测量。算法的第一步如图1（a）所述，随后可以查看主成分解释方差比累积和的预览图。这有助于监测所选主成分数量对平场数据集方差的解释程度。此外，在对样品图像进行归一化之前，还可以增加或减少主成分的数量。

平场数据集由约 10 000 张平场图像组成，其中几张示例见图2 (a)；(b) 部分展示了在整个数据集上计算得到的平均平场图像。图3展示了按主成分索引$m = \{1, 2, 3, 16\}$选取的主成分。第一个主成分，标记为 $m = 1$，与图2 (b)中的平均平场图像相似，并解释了数据集中最大比例的方差。接下来的两个主成分 $m \in \{2, 3\}$捕捉了水平方向和垂直方向的强度变化。主成分 $m \leq 4$ 主要显示强度的水平变化，并带有明显的条纹

特征，如主成分 $m = 16$所示。图3展示了平场数据集前 25 个主成分的解释方差比累积和。图 3 (b)显示，前三个主成分解释了约 83% 的方差。加入更多主成分并不会显著提高这一比例；在第三个主成分之后，解释方差的累积和仅略有增加。然而，正如本章稍后将详细讨论的，为了校正样品图像中的大部分垂直特征，还需要纳入那些解释方差比看似较低的主成分，因为它们包含实现高质量校正所需的变化。

识别出描述平场照明的最重要成分后，即可继续进行第 3 节所述的样品图像归一化过程。为了更直观地展示动态平场校正在测试数据上的效果，我们在图 4 中绘出了样本图像 (a) 以及分别经传统方法 (b) 和动态方法 (c) 校正后的对应图像。此处考虑的主成分数量默认设为 20。图 4 表明，与传统校正方法 (b) 相比，动态方法 (c) 能更有效地去除垂直特征。我们可以看到，垂直特征贯穿图像的整个宽度，并且逐帧改变位置；图 2 (a) 中的示例捕捉到了这一现象。此外，平均平场图像中缺少这些特征（图 2 (b)），导致传统方法无法有效去除采集图像中的此类伪影。即使是左侧出现在平均平场图像（图 2 (b)）中的细条纹，采用传统归一化方法也无法去除（图 4 (b)），这是因为测量过程中条纹位置略有变化。另一个难以消除的细节是样本图像 (a) 中央的圆形斑点。与前一个示例中的细条纹类似，只有采用动态方法（图 2 (c)）才能更好地减弱斑点，但无法将其完全消除。

平场校正图像的质量主要通过目视进行评估。为了定量估计该方法的性能，我们将像素值离散度（pvs）计算为图像相对于其平均像素值的偏差

$$\mathrm{pvs} = \sqrt{\frac{\sum_l^{N'} (p_l - \mu)^2}{N'}},\ \mu = \sum_l^{N'} p_l \tag{4}$$

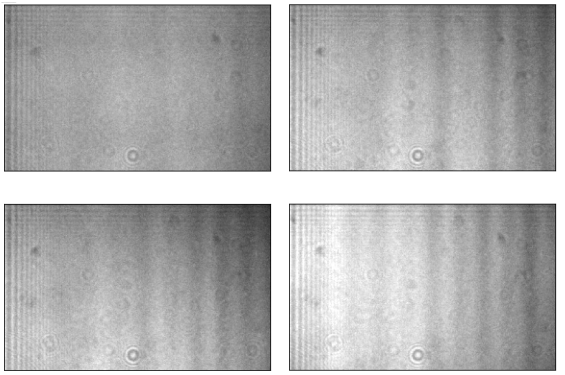
其中，索引 l 遍历图像 p 的像素。为了估计图像中存在的噪声量，我们仅使用图像中没有样品的“平坦”部分。对于具有不均匀强度分布的未校正图像，预期会得到较高的 pvs 值；而对于经过校正、能够减少大部分不均匀结构和噪声像素的图像，预期会得到较低的值。

为了评估脉冲列内相同位置的图像的校正质量，我们计算了一个脉冲列中获取的 128 幅图像中每一幅的 TV 和 pvs，并对 15 个脉冲列进行了平均。两个变量的平均值及其标准差如图 5 所示。尽管每一帧的 pvs 和 TV 值有所变化，但从图 5 可以看出，动态平场校正图像始终具有较低的 TV（a）和离散度（b），这表明所选无样品图像区域中的噪声水平有所降低。相比之下，与完全不进行校正相比，传统平场校正带来的改善非常有限，因为在 TV 和 pvs 值方面，未校正图像与采用传统方法校正的图像之间没有发现统计学显著差异。根据图 4 中的目视比较，这一结果是预期之中的，因为其中未观察到垂直特征被明显去除。图 5 中以彩色区域表示的未校正图像及两种归一化方法的标准差，描述了数据集中给定帧的 TV 和 pvs 值在不同脉冲列之间的变化。平均而言，动态校正图像的 pvs 值为 0.069，而传统校正图像的离散度为 0.098。未校正图像的 pvs 为 0.102。

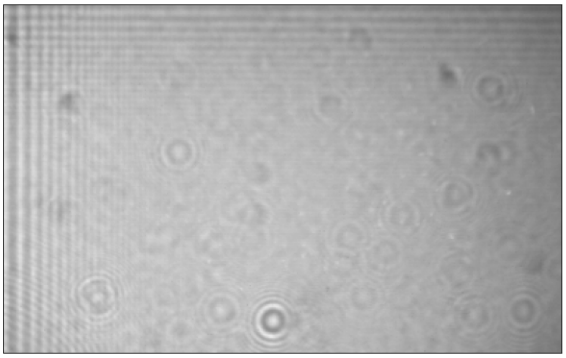
此外，我们研究了由 TV 值评估的归一化图像质量随主成分数量变化的情况。我们还对生成的校正图像进行了目视评估。图 6 描述了归一化过程中所使用的主成分数量变化导致的 TV 值变化。可以注意到，

当主成分数量为 15 和 20 时，TV 值的平均值下降；超过 20 个主成分后，TV 值开始上升。为便于目视比较，图 7 给出了在归一化算法中使用不同数量主成分得到的平场校正图像示例。图 7 表明，在归一化过程中纳入 2–10 个主成分会导致非最优的平场校正结果。在使用 2 个和 4 个主成分的情况下，图像左侧仍可见细线结构。使用 10 个主成分时，贯穿整个宽度的垂直特征仍未被完全消除。将主成分数量增加至 10 个可降低垂直特征的可见度，这也支持了图 6 中 TV 值下降的观察结果。随着主成分数量增加，中间的圆形斑点变得不那么明显，但在所有使用不超过 100 个主成分的校正图像中仍可检测到该斑点。纳入约 20 个主成分似乎可以去除大部分不需要的特征，而图 6 中使用 40 个和 100 个主成分的结果并未带来视觉上更好的效果。图 6 中的 TV 值在主成分数量超过 20 个后逐渐升高，这可能是由过拟合造成的。图 6 和图 7 所列结果表明，最优主成分数量约为 20 个，此时可以去除平场图像中出现的大多数特征。

考虑到相机的空闲时间，我们的目标是在采集到下一列脉冲之前完成校正。相机的空闲时间约为 15 秒，这意味着相机每 150 列 EuXFEL 脉冲才能采集一列。此处未将分析平场和暗场数据集所需的准备时间考虑在内，因为这一过程通常需要几分钟，并且每当获取新的平场和暗场时，都需要每小时重复一次。第 3 节中提到的所提出的算法及其两种实现都能够更快地完成处理，跟上输入数据的速度。并行化版本对一个由一列脉冲、128 张图像组成的数据集进行校正，耗时约 1 秒。测试在在线集群 INTEL、Gold-6140 CPU @ 2.30 GHz、768G 上进行。此外，随着预期更新进一步缩短相机空闲时间，处理速度也应能承受相应负载。结果表明，该算法当前的性能适合在实验期间用作近实时分析工具。



(a)



(b)

图2。 测试平场数据集的示例实例（a），该数据集由约10 000幅图像组成；以及基于整个测试数据集计算得到的平均平场图像（b）。

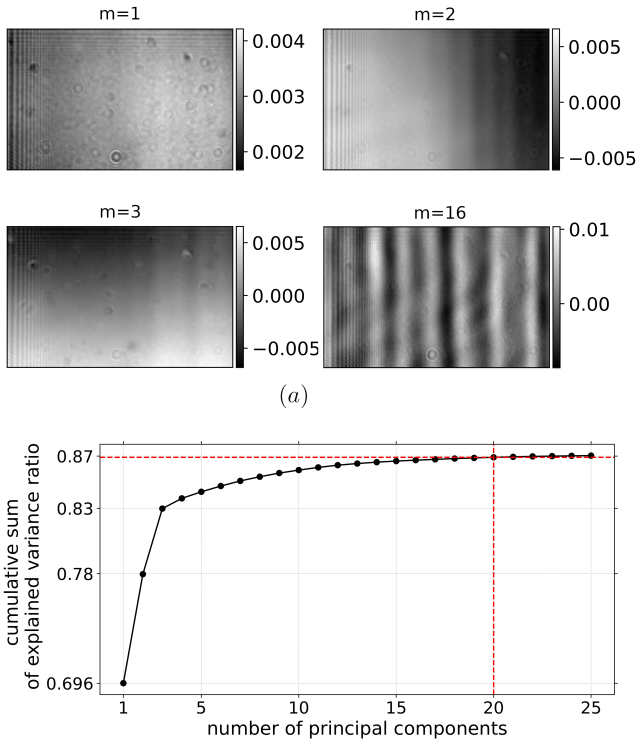


图3。 从图2所示测试平场数据中获得的 u_m $m = \{1, 2, 3, 16\}$ (a)的主成分示例。子图(b)展示了前25个主成分的解释方差比累积和。

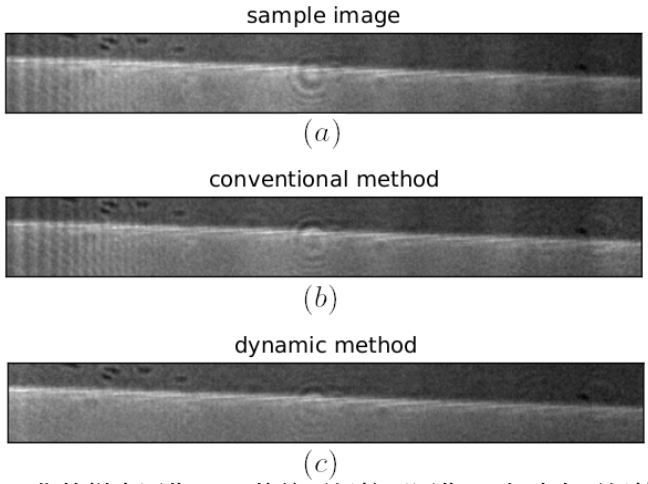
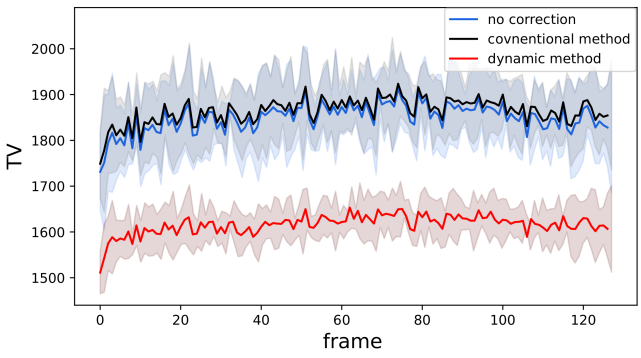
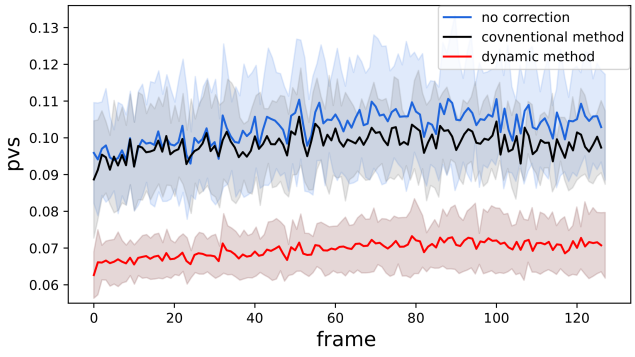


图4。 未进行任何归一化的样本图像(a)、传统平场校正图像(b)和动态平场校正数据(c)的比较。此处仅显示原始尺寸图像（(250，400)像素）的底部区域（(50，400)像素）。



(a)



(b)

图5. 未校正图像以及经传统方法和动态方法校正的图像的总变差 (a) 和像素值离散度 (b) 对比。TV 和 pvs 的值根据其在脉冲列中的位置计算，其中最大帧编号为 128。对每个帧编号，TV 和 pvs 均取 15 个脉冲列的平均值；列车间变化则以标准差表示，并以彩色区域呈现。

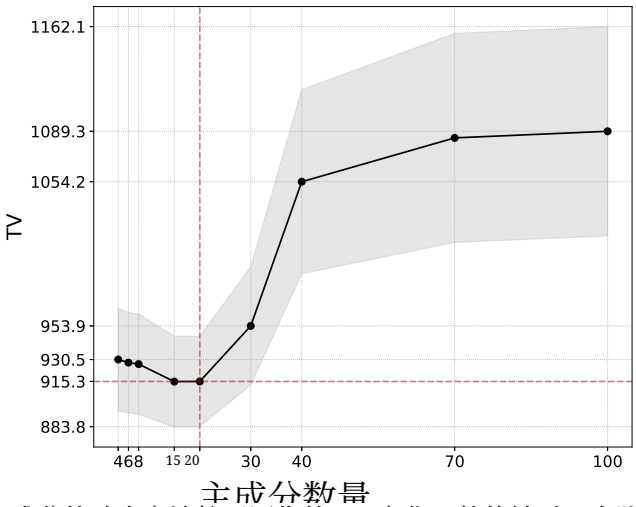


图6. 采用不同数量主成分的动态方法校正图像的 TV 变化。数值针对一个脉冲列计算，并对 128 张图像取平均；灰色区域表示脉冲列内帧间变化的标准差。

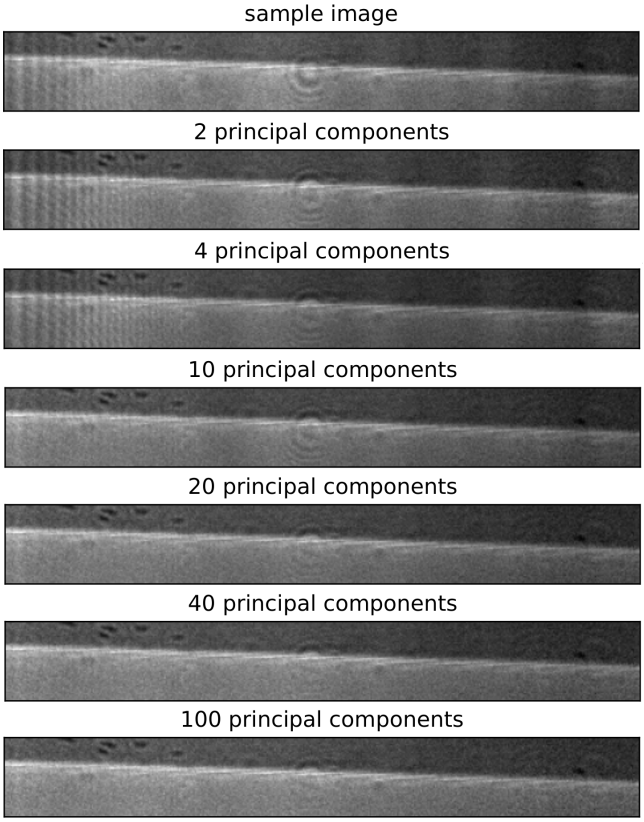


图 7。 使用动态方法和 $[2, 4, 10, 20, 40, 100]$ 个主成分得到的未校正的样品图像和平场校正图像的比较。

5 结论与讨论

我们展示了一种针对MHz重复频率EuXFEL数据进行动态平场校正的方法。研究表明，对于X射线MHz显微数据 [10], ，与传统平场校正方法相比，动态方法能够实现更好的校正效果，并考虑了平场数据集中的时间变化，这种变化是XFEL设施的典型特征。为了比较传统方法和动态方法应用于测试数据时的性能，我们计算了总变差，以及无样品图像区域的像素值离散度。定量比较和视觉评估均表明，与传统方法相比，采用动态归一化方法能够获得更好的结果。

归一化算法已在线实现，可在欧洲XFEL的SPB/SFX仪器上进行实验期间，近实时地显示数据和平场校正后的数据。该实现能够在MHz帧频相机采集下一批数据之前，对传入数据进行校正并近实时显示。未来，我们计划通过实现新的数据分析工具（例如数据分解方法）并为图形用户界面增加更多功能，进一步扩展其应用。

致谢

本工作是在研发项目“EuXFEL的MHz显微术：从演示到方法”（2020—2022年）框架内完成的。

参考文献

1. A. Morgan, M. Prasciolu, A. Andrejczuk, J. Krzywinski, A. Meents, D. Pennicard, H. Graafsma, A. Barty, R. Bean, M. Barthelmess, D. Oberthuer, O. Yefanov, A. Aquila, H. Chapman, and S. Bajt, “高数值孔径多层劳厄透镜”，《科学报告》, 第5卷，第9892页，2015年6月。2. K. Fezzaa 和 Y. Wang，“两个水滴初始聚并阶段的超快X射线相位衬度成像”，《物理评论快报》, 第100卷，第104501页，2008年3月。3. M. P. Olbinado, X. Just, J.-L. Gelet, P. Lhuissier, M. Scheel, P. Vagovic, T. Sato, R. Graceffa, J. Schulz, A. Mancuso, J. Morse, and A. Rack，“利用同步辐射进行MHz帧频硬X射线相位衬度成像”，《光学快报》, 第25卷，第13857–13871页，2017年6月。4. M. P. Olbinado, V. Cantelli, O. Mathon, S. Pascarelli, J. Grenzer, A. Pelka, M. Roedel, I. Prencipe, A. L. Garcia, U. Helbig, D. Kraus, U. Schramm, T. Cowan, M. Scheel, P. Pradel, T. D. Resseguier, and A. Rack，“利用同步辐射光对激光驱动冲击压缩进行超高速X射线成像”，《物理学杂志*D*：应用物理》, 第51卷，第055601页，2018年1月。5. P. Vagovi˘c, T. Sato, L. Mike˘s, G. Mills, R. Graceffa, F. Mattsson, P. Villanueva-Perez, A. Ershov, T. Farag´o, J. Uli˘cn´y, H. Kirkwood, R. Letrun, R. Mokso, M.-C. Zdora, M. P. Olbinado, A. Rack, T. Baumbach, J. Schulz, A. Meents, H. N. Chapman, and A. P. Mancuso，“在X射线自由电子激光器和同步辐射源上进行兆赫兹X射线显微成像”，《*Optica*》, 第6卷，第1106–1109页，2019年9月。6. W. Decking等人，“由超导直线加速器驱动的MHz重复频率硬X射线自由电子激光器”，《自然·光子学》, 第14卷，第6期，第391–397页，2020年。7. S. Milton, E. Gluskin, N. Arnold, C. Benson, W. Berg, S. Biedron, M. Borland, Y. Chae, and R. Dejus，“自放大自发辐射自由电子激光器的指数增益与饱和”，《科学》, 第292卷，2001年6月。

8. V. V. Nieuwenhove, J. D. Beenhouwer, F. D. Carlo, L. Mancini, F. Marone, and J. Sijbers, “利用特征平场进行X射线成像的动态强度归一化”, 《光学快报》, 第23卷, 第27975–27989页, 2015年10月。9. J. Hagemann, M. Vassholz, H. Hoeppe, M. Osterhoff, J. M. Rossell´o, R. Mettin, F. Seiboth, A. Schropp, J. M¨oller, J. Hallmann, C. Kim, M. Scholz, U. Boesenberg, R. Schaffer, A. Zozulya, W. Lu, R. Shayduk, A. Madsen, C. G. Schroer, and T. Salditt, “硬X射线波段自由电子激光器的单脉冲相衬成像”, 《同步辐射杂志》, 第28卷, 第52–63页, 2021年1月。10. K. Buakor, Y. Zhang, S. Birnsteinova, V. Bellucci, T. Sato, H. Kirkwood, A. P. Mancuso, P. Vagovic, and P. Villanueva-Perez, “X射线自由电子激光器的逐发平场校正”, 《光学快报》, 第30卷, 第10633–10644页, 2022年3月。11. D. S. Hodge, A. F. T. Leong, S. Pandolfi, K. Kurzer-Ogul, D. S. Montgomery, H. Aluie, C. Bolme, T. Carver, E. Cunningham, C. B. Curry, M. Dayton, F.-J. Decker, E. Galtier, P. Hart, D. Khaghani, H. J. Lee, K. Li, Y. Liu, K. Ramos, J. Shang, S. Vetter, B. Nagler, R. L. Sandberg, and A. E. Gleason, “用于成像冲击波动力学的多帧超快X射线显微镜”, 《光学快报》, 第30卷, 第38405–38422页, 2022年10月。12. K. Pearson F.R.S., “LIII. 关于空间点系的最佳拟合直线和平面”, 《伦敦、爱丁堡和都柏林哲学杂志与科学期刊》, 第2卷, 第11期, 第559–572页, 1901年。13. H. Hotelling, “两组变量集之间的关系”, 《生物计量学》, 第28卷, 第3/4期, 第321–377页, 1936年。14. A. Chambolle, “全变差最小化算法及其应用”, 《数学成像与视觉》, 第20卷, 第89–97页, 2004年1月。15. R. Byrd, P. Lu, J. Nocedal, and C. Zhu, “一种用于边界约束优化的有限内存算法”, 《美国工业与应用数学学会科学计算杂志》, 第16卷, 第1190–1208页, 1995年9月。16. B. Heisen, D. Boukhelef, S. Esenov, S. Hauf, I. Kozlova, L. Maia, A. Parenti, J. Szuba, K. Weger, K. Wrona, and C. Youngman, “Karabo：整合控制、数据管理和科学计算任务的软件框架”, 载于《第*14*届加速器与大型实验物理控制系统国际会议论文集》&《大型实验物理控制系统（*ICALEPCS 2013*）：美国加利福尼亚州旧金山，*2013*年*10*月*6*日至*11*日》, 第FRCOAAB02页, 第14届加速器与大型实验物理控制系统国际会议, 美国旧金山, 2013年10月6日至11日, 2013年10月。17. H. Fangohr 等人, “欧洲XFEL的Karabo数据分析支持”, 载于《加速器与大型实验控制系统国际会议论文集（*ICALEPCS’17*）, 西班牙巴塞罗那, *2017*年*10*月*8*日至*13*日》, 第16号, 加速器与大型实验控制系统国际会议（瑞士日内瓦）, 第245–252页, JACoW, 2018年1月。https://doi.org/10.18429/JACoW-ICALEPCS2017-TUCPA01。18. PyQT, “Pyqt参考指南”, 2012年。19. H. Soyama and J. Hoshino, “通过提高气泡塌陷区域的压力, 增强文丘里管中的水动力空化强度”, 《*AIP*进展》, 第6卷, 第045113页, 2016年4月。

20. A. P. Mancuso, A. Aquila, L. Batchelor, R. J. Bean, J. Bielecki, G. Borchers, K. Doerner, K. Giewekemeyer, R. Graceffa, O. D. Kelsey, Y. Kim, H. J. Kirkwood, A. Legrand, R. Letrun, B. Manning, L. Lopez Morillo, M. Messerschmidt, G. Mills, S. Raabe, N. Reimers, A. Round, T. Sato, J. Schulz, C. Signe Takem, M. Sikorski, S. Stern, P. Thute, P. Vagovič, B. Weinhausen, and T. Tschentscher, 《欧洲XFEL单颗粒、团簇与生物分子及串行飞秒晶体学仪器：初始安装》，《同步辐射杂志》，第26卷，第660–676页，2019年5月。