



Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich



Department of Information Technology
and Electrical Engineering

Diss. ETH No. 23945

Fast reconstruction methods for underconstrained datasets of synchrotron-based tomographic microscopy

A thesis submitted to attain the degree of
DOCTOR of SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr.sc. ETH Zurich)

presented by

Filippo Arcadu

MSc., University of Florence, Italy
born on the 24th August 1987
citizen of Italy

accepted on the recommendation of

Examiner: Prof. Dr. Marco Stampanoni
Co-examiner: Prof. Dr. Jean-Philippe Thiran
Co-examiner: Prof. Dr. Joost Batenburg
Co-examiner: Dr. Federica Marone

2016

Abstract

Synchrotron radiation based X-ray tomographic microscopy (SRXTM) allows non-destructive 3D investigation of a large variety of samples at micrometer and submicrometer scale in few minutes. Several pioneering studies in the field of biology, material science, chemistry and paleontology were based on data acquired with this X-ray imaging technique.

If the specimen under study is either sensitive to X-ray radiation or fast-evolving, the dose irradiated to the sample or the total scan time are bounded to be under a certain limit, respectively. To fulfill this constraint, the exposure time per projection and the total number of views have to be reduced, leading in most cases to the acquisition of noisy, undersampled datasets, labeled as “underconstrained”, that present a major challenge for analytical tomographic reconstruction.

This thesis focuses on the development of methods and strategies to address the reconstruction of underconstrained SRXTM absorption-contrast, in-line phase-contrast and differential phase-contrast datasets, acquired in low-dose scans of standard and full interior tomography. Considering the large amount of raw data (several terabytes) created by high-throughput SRXTM acquisitions and the heterogeneity of the samples investigated with this imaging technique, the guiding thread of this work was designing algorithmical solutions characterized by: (i) a good trade-off between reconstruction accuracy and computational efficiency; (ii) versatility in dealing with different types of specimens and imaging modalities; (iii) a minimum amount of supervised a-priori knowledge and required input hyper-parameters to foster the practicality of the tomographic reconstruction. Several standard and state-of-the-art iterative methods, already published in literature and proved effective for medical or non-medical underconstrained datasets, had to be discarded due to the lack of versatility, computational efficiency or “user-friendliness”.

To guarantee computational efficiency and the flexibility necessary to address a large variety of different datasets and imaging modalities, the alternate direction method of multipliers plug-and-play (ADMP) has been identified as one of the most suitable iterative reconstruction scheme. The ADMP provides reconstructions with satisfactory trade-off between contrast and resolution after very few iterations. At the same time, it allows the direct incorporation of any forward tomographic operator and any denoising method for the problem regularization.

The computational efficiency of the ADMP has been greatly boosted by the usage of the gridding projectors with minimal oversampling. The low complexity of these Fourier operators enables very fast iterative reconstructions on a single core, with speed comparable to what can be achieved with tomographic operators implemented on graphics processing units. The ADMP working with gridding projectors and parallel beam geometry is computationally suited to run on central processing unit (CPU) clusters.

Here, it is also shown that the degree of coupling between the implementations of the forward and backprojector plays a crucial role in the performance of an iterative algorithm: the absence of coupling between the tomographic operators leads in the best case scenario to sub-optimal accuracy and slower convergence rates, in the worst case scenario it causes the algorithm to diverge or reconstructions to be affected by severe artifacts.

Furthermore, a procedure, called “virtual strategy”, is proposed to perform efficient iterative reconstruction of full interior tomographic datasets. The virtual strategy transforms the interior dataset into a standard one, avoiding to use differentiation or edge-padding throughout the entire iterative reconstruction process, which reduces the amount of computations and required memory.

The Helgason-Ludwig sinogram filter is, finally, introduced as a fast unsupervised method to boost the accuracy of analytical reconstructions of strongly underconstrained datasets in standard tomography. This filter allows to reach an accuracy which is halfway between what achievable with analytical and iterative reconstruction.

Studies conducted on SRXTM datasets of mouse lung tissue in full interior tomography at a resolution of $1.1\mu\text{m}$ show that the proposed iterative reconstruction scheme enables a dose reduction per scan by a factor between 2.5 and 3. For other SRXTM datasets of high structural complexity in standard tomography, dose can be reduced by a factor 5 or even more, depending on the specimen under study and the envisaged quantification goal. Considering a CPU cluster with 50 cores and an underconstrained SRXTM dataset of typical size (e.g. $500 \text{ views} \times 2048 \text{ detector pixels} \times 2048 \text{ slices}$), the run time expected for the proposed iterative reconstruction algorithm is around 25-35 minutes.

Other aspects were also addressed, including the design of a reliable simulation framework to test reconstruction algorithms and assess their performance.

Apart from the single results, the hope with this doctoral project is to convince the reader that a goal-oriented vision and approaching iterative algorithms as “puzzles”, whose pieces deserve both an independent and inter-mixed inspection, are indispensable ingredients to further expand the frontiers of tomographic image reconstruction and to see complex methods becoming practical and effective tools in the hand of scientists from diverse fields.

Zusammenfassung

Synchrotron-basierte tomographische Röntgen-Mikroskopie (Synchrotron-based X-ray Tomographic Microscopy, SRXTM) liefert hochauflösende dreidimensionale Abbildungen von mannigfaltigsten Materialien auf Grundlage von Durchleuchtungsbildern. Sie ermöglicht so zerstörungsfreie Untersuchung eines Probestücks im Mikrometer- und Sub-Mikrometer-Bereich. Zahlreiche wegweisende Studien, etwa in der Biologie, den Werkstoffwissenschaften, der Chemie oder der Paläontologie, basieren auf derartigen Daten.

Wenn dabei eine zu untersuchende Probe strahlungsempfindlich ist, oder wenn sie sich während der Aufnahme verändert, dann führt das zu Einschränkungen im Bildgebungsverfahren. In ersterem Fall darf die Strahlendosis einen gewissen Höchstwert nicht überschreiten, in letzterem Fall ist die zur Messung verfügbare Zeit begrenzt. Dementsprechend werden von solchen Proben tendenziell weniger Bilder in kürzerer Zeit aufgenommen. Es stehen zur Rekonstruktion des räumlichen Modells folglich weniger und aufgrund Rauschens schlechtere Rohdaten zur Verfügung. Ein derartiger Datensatz wird als "unterbestimmt" bezeichnet, und seine Verarbeitung stellt eine grosse Herausforderung dar, insbesondere bei Nutzung analytischer Rekonstruktionsverfahren.

Diese Doktorarbeit befasst sich mit der Entwicklung von Methoden und Strategien für die tomographische Rekonstruktion aus derartig unterbestimmten und mit niedrigen Strahlungs Dosen gemessenen SRXTM-Rohdaten. Sie beschäftigt sich dabei mit Absorptions- und (ausbreitungsbasiertem wie differenziellem) Phasenkontrast, und sie behandelt sowohl klassische als auch innere Rekonstruktionsprobleme. Angesichts der enormen Datenmengen von mehreren Terabytes, die bei SRXTM in kurzer Zeit anfallen, und aufgrund der Heterogenität der abzubildenden Proben orientieren sich die präsentierten algorithmischen Lösungen an folgenden Anforderungen: (i) gute Balance zwischen Genauigkeit und Berechnungseffizienz; (ii) Anpassungsfähigkeit an verschiedene zu untersuchende Materialien und Messprozeduren; (iii) minimale Nutzung von a-priori-Wissen oder "magischen" Parametern, insbesondere nicht um überhaupt Konvergenz zu erzielen. Mehrere Standardverfahren und spezialisierte hochmoderne iterative Methoden mussten angesichts dieser Vorgaben mangels Anpassungsfähigkeit, Berechnungseffizienz oder Nutzerfreundlichkeit verworfen werden, auch wenn deren grundsätzlicher Nutzen für medizinische und nicht-medizinische Anwendungen bereits in der Literatur bewiesen wurde.

Hinsichtlich Berechnungseffizienz und Flexibilität lässt sich die Alternate Direction Method of Multipliers in der "Plug and Play"-Variante (ADMP) als geeignetes iteratives Rekonstruktionsverfahren identifizieren. ADMP liefert nämlich nach bereits sehr wenigen Durchläufen Bilder mit ausreichendem Kontrast und guter Auflösung. Allgemein gesprochen berechnet ADMP die tomographische Rekonstruktion als regularisierte Näherungslösung des inversen Problems, das sich aus dem Bildgebungsverfahren ergibt: Gesucht ist nämlich das räumliche Bild, dessen künstliche Projektionen möglichst mit den gemessenen Bildern übereinstimmen. ADMP gestattet dabei freie Wahl sowohl hinsichtlich der verwendeten Projektionsoperatoren als auch in Bezug auf das zur Regularisierung genutzte Entauschungsverfahren.

Die Berechnungseffizienz von ADMP ist in dieser Arbeit durch Verwendung von neuartigen Grid-

dingprojektoren mit minimaler Überabtastung massiv erhöht worden. Die niedrige numerische Komplexität dieser Operatoren ermöglicht sehr schnelle iterative Rekonstruktion auf einzelnen Cores, wobei die Geschwindigkeit vergleichbar ist mit komplexen GPU-basierten Ray-Casting-Projektoren. ADMP mit Griddingprojektoren ist insofern optimal geeignet für die Ausführung auf einem CPU-Cluster, wie er an Großforschungsanlagen vorhanden ist.

Weiterhin zeigt diese Arbeit experimentell, dass die Wahl übereinstimmender Vorwärts- und Rückwärtsprojektoren wesentlich für die Leistung der iterativen Methode ist: Nicht zueinander passende tomographische Operatoren verursachen im Bestfall suboptimale Genauigkeit und langsame Konvergenz, im schlechtesten Fall konvergiert das Verfahren entweder gar nicht, oder das Rekonstruktionsergebnis weist starke Bildfehler auf.

Hinsichtlich innerer Rekonstruktionsprobleme schlägt diese Arbeit eine "virtuelle Strategie" vor, um effizient iterative Rekonstruktionen zu berechnen. Problem in diesem Fall ist ja, dass die gemessenen Projektionen durch Bildanteile "verfälscht" sind, die nicht rekonstruierbar sind, da die verursachenden Strukturen außerhalb des Rekonstruktionsbereichs liegen. Ziel der Strategie ist folglich die virtuelle Umwandlung solcher "innerer" Rohdaten in äquivalente Standarddaten ohne Verwendung bekannter rechen- und speicherintensiver Verfahren zur Auffüllung fehlender Information. Ein solches Vorgehen macht durch Einsparung überflüssiger Rechenoperationen und Speicherzugriffe iterative Methoden letztlich überhaupt erst praktisch anwendbar.

In einem letzten Teil widmet sich die Arbeit schließlich dem Helgason-Ludwig-Sinogramm-Filter. Es handelt sich dabei um eine schnelle, parameterfreie Methode zur Verbesserung der Genauigkeit der analytischen Rekonstruktion aus stark unterbestimmten Daten. Dieser Filter ermöglicht die analytische Berechnung einer Rekonstruktion, deren Qualität etwa halbwegs die eines iterativ berechneten Ergebnisses erreicht, obwohl der Aufwand für die Filterung nur unwesentlich zu Buche schlägt.

Zusätzlich zu diesen Aspekten behandelt die Arbeit auch die Gestaltung eines zuverlässigen Simulationsrahmens zum Testen von Rekonstruktionsalgorithmen. Diese Regeln wurden bei Experimenten mit synthetischen Daten angewendet, um reproduzierbar zu verlässlichen Qualitätsaussagen zu kommen.

Zur praktischen Überprüfung der in dieser Arbeit vorgeschlagenen Verbesserungen wurden Studien mit SRXTM-Rohdaten durchgeführt. Für lokale Röntgenbilder von Mäuselungen mit einer Auflösung von $1.1 \mu\text{m}$ lässt sich zeigen, dass bei Verwendung der vorgeschlagenen iterativen Rekonstruktionsmethode eine 2,5- bis 3-fache Dosisreduktion pro Scan möglich ist. Für andere SRXTM-Datensätze mit höherer struktureller Komplexität kann die Dosis um Faktor 5 oder höher reduziert werden, abhängig von der untersuchten Probe und dem Quantifizierungsziel. Auf einem CPU-Cluster mit 50 Cores lässt sich ein typischer SRXTM-Datensatz (etwa 500 Projektionen \times 2048 Detektorpixel \times 2048 Schichten) mit den vorgeschlagenen iterativen Verfahren in ungefähr 25-35 Minuten verarbeiten.

Abgesehen von den konkreten Ergebnissen dieser Doktorarbeit besteht die Hoffnung, den Leser davon

zu überzeugen, dass eine zielorientierte Herangehensweise an iterative Verfahren notwendig ist. Insbesondere sollten derartige Methoden als Puzzle verstanden werden, und die Teile sollten individuell und im Zusammenspiel analysiert werden. So können die bestehenden Grenzen tomographischer Bildrekonstruktion erweitert werden, und es wird möglich, komplexe numerische Methoden als praktische und effektive Werkzeuge in die Hände von Wissenschaftlern aus den verschiedensten Bereichen zu geben.