

物理信息驱动从超稀疏时空数据中重建 4D X 射线图像

Zisheng Yao^{1*}, Yuhe Zhang¹, Zhe Hu¹, Robert Klöfkor²,
Tobias Ritschel³ and Pablo Villanueva-Perez¹

¹ Division of Synchrotron Radiation Research and NanoLund, Lund University, Box 118, 22100, Lund, Sweden

² Center for Mathematical Sciences, Lund University, Box 117, 22100, Lund, Sweden

³ Department of Computer Science, University College London, WC1E 6BT London, UK

E-mail: zisheng.yao@sljus.lu.se

March 2025

摘要. 现代 X 射线源提供的前所未有的 X 射线通量密度为快速动态过程的 X 射线成像提供了新的时空可能性。利用这些可能性的方法通常会导致要么 i) 由于扫描速度有限, 如时间分辨断层摄影中所见的时间分辨率或空间信息受限, 或者 ii) 在频闪成像中时间点数量受限, 使得重建问题成为不适宜问题且不太可能通过经典重建方法解决。此类数据的 4D 重建需要样本先验, 这些可以通过深度学习 (DL) 来纳入。最先进的 X 射线成像 4D 重建方法结合了人工智能和 X 射线传播物理的力量以应对稀疏视图下的挑战。然而, 大多数方法并未约束所研究过程的物理学, 即一个完整的物理模型。这里我们介绍了 4D 物理信息优化神经隐式 X 射线成像 (4D-PIONIX), 这是一种将完整物理模型与最先进的基于 DL 的 4D X 射线图像重建方法相结合的新颖 4D X 射线图像重建方法, 用于从稀疏视图进行 4D X 射线成像。我们通过从模拟二进制液滴碰撞的超稀疏时空采集中恢复 4D 信息来展示和评估我们的方法潜力, 这是一个相关的流体动力学过程。我们设想这项工作将为各种 4D X 射线成像模式 (如时间分辨 X 射线断层摄影以及更新型的稀疏采集方法如 X 射线多投影成像) 开启新的时空可能性, 这将为研究各种快速 4D 动态现象 (如流体动力学和复合材料测试) 铺平道路。

关键词 / 超快 X 射线成像, 物理信息驱动的, 深度学习, 超稀疏时空数据, 四维 (4D) 重建

1. 介绍

在过去几十年中，现代大规模 X 射线设施（同步光源和自由电子激光器）的发展推动了 X 射线成像领域的发展。特别是，这些设施提供的增强的通量密度为探索新的时空分辨率 [1], [2], [3], [4] 开启了新可能性，这对于在原位和操作条件下进行快速动态的非破坏性 4D 研究至关重要。这类研究在流体力学 [5]、增材制造 [6] 和能源材料 [7] 等多个科学和工程领域具有广泛的应用前景。

为了充分利用现代 X 射线设施在 4D 成像研究中的独特能力，开发实用的 4D 重建工具至关重要。标准的时间分辨层析成像 4D 重建，即现代大型 X 射线设施最先进的 4D 成像技术，依赖于将单独重建的 2D 切片堆叠到每个时间点上的 3D 体积中。最成熟的重建方法包括解析重建 [8]，如滤波反投影 (FBP)，以及迭代重建 [9]，如同时代数重建技术 (SART)。然而，当提供的时空数据稀疏时，例如投影数量有限或频闪时间采集 [10]，重建质量会迅速下降。一个实用的例子是 X 射线多角度成像 (XMPI) [11], [12], [13]，这是一种无需旋转的技术，能够捕获比时间分辨层析成像更快的动态变化，但以提供极稀疏的观测动态投影角度为代价。在这样的情况下，重建问题变得极其不适定 [14]。此外，在研究动态过程时，被观察到的过程快速运动可能会恶化记录图像的质量，导致可用于恢复 4D 动力学的有效时间点更少 [15]。上述挑战突显了当前 2D 重建方法解决 4D 问题的局限性。因此，我们希望有一个可以直接重建 4D 动态的工作流程。这样的工作流程应考虑 4D 先验知识，如观测对象的形状和运动 [16], [17]。

由于人工智能 (AI) 和深度学习 (DL) 的近期进展，捕捉复杂的样本先验 [18] 变得可行，为从稀疏时空数据进行图像重建铺平了道路。具体而言，基于神经辐射场 (NeRF) [19], [20] 的方法为各种 3D 和 4D 成像模态中的稀疏视图重建开辟了新机遇。尽管这些 NeRF 基方法起源于可见光设置，但它们已通过嵌入 X 射线传播定律 [21], [22], [23], [24] 并且其中一些能够进行 4D 重建 [25] 而适应到 X 射线成像中。然而，这样的 X 射线方法通常需要大量数据集来训练，无论是通过数据增强 [24] 还是通过重现类似的 X 射线实验 [25]。本质上，这些方法得益于大型数据集和由数据驱动的 DL 方法提供的泛化能力，提供了适当的 4D 重建，但未能解决时间域中稀疏性带来的挑战。与此同时，所研究动态过程的完整物理模型可以作为 4D 重建任务的重要样本先验。特别地，物理信息神经网络 (PINN) [26], [27], [28] 是一种新兴的工具，可以提升 4D 重建的表现。通过将完整的物理模型应用于重建流程中，在时间域内实现超分辨率 [29], [30] 成为可能。本质上，结合基于 NeRF 的方法和物理信息方法 [31], [32], [33] 有可能解决由极稀疏时

空采集导致的难题。然而,在超快速 4D X 射线成像领域中,这种结合仍需进一步研究。

在这项工作中,我们提出了 4D-PIONIX,这是一种新型的基于物理信息的 4D X 射线图像重建方法,旨在解决从有限视角和有限时间点带来的挑战。为了验证我们的提议方法,我们根据 XMPI [15] 的实验设置模拟了 4D 液滴碰撞过程,并解决了从超稀疏时空数据中的 4D 重建问题,例如,在有限数量的时间点上两个相隔 23.8 度的投影。结果表明,使用超稀疏时空数据可以恢复可靠 4D 动态,即使在未见时间点也能实现这一点,这将为快速动力学的 4D X 射线图像重建开辟新的可能性。除了我们的 XMPI 演示之外,我们设想其他 X 射线成像模式也可以从我们的基于物理信息的工作流程中受益,例如现代大规模 X 射线设施和 X 射线实验室光源中的时间分辨层析成像。论文结构如下。首先,我们介绍了 XMPI 配置,它定义了本工作的模拟和 4D 重建框架。其次,我们在 XMPI 配置下介绍液滴碰撞过程的模拟作为展示我们提出的重建方法的一个示例。第三,我们描述了一种基于自监督深度学习方案的基于物理信息的 4D 重建方法。第四,我们使用 4D-PIONIX 展示了重建结果,并通过与最先进的 XMPI 4D 重建方法 4D-ONIX 进行比较验证其独特能力。最后,我们对未来可能的应用和发展进行了展望。

2. XMPI 配置

图 1 描述了传统时间分辨 X 射线断层扫描设置和 XMPI 设置的概念配置。一方面,传统的时态分辨率 X 射线断层成像需要以适合追踪研究过程的速度连续旋转。这种旋转速度可能会因为产生的离心力而改变观察到的动力学特性。例如,在假设一个 1 mm 半径 [34] 的情况下,采集速率为每秒 1000 个断层面时可以施加 500 g 的力。另一方面,XMPI 是一种无旋转的 4D X 射线成像技术,更适合捕捉具有高时间分辨率的旋转敏感动力学特性 [15], [35]。XMPI 依赖于高亮度 X 射线源和多个晶体束分裂器 [36] 来将主 X 射线束分裂为几个次级光束,从而允许从不同角度同时照射样品。需要一套同步的超快探测器(超过 kHz)来记录来自不同角度的投影图像。可以在后续的数据处理步骤中进行 4D 重建。值得注意的是,最先进的 XMPI 设置在瞄准 kHz 动态及更高频率时包含少于十个投影。此外,由于某些快速相机如岛津 Hyper Vision CMOS 相机 (HPV-X2) [37] 的录制长度限制,可用于重建的有效记录图像数量通常受到限制。因此,用于 4D 重建的 XMPI 数据集在投影角度和时间点上可能极度稀疏。尽管这里提出的方法可以应用于如时态分辨断层成像等不太严格的方案中,在本工作的背景下,我们使用来自 XMPI 实验的模拟数据演示了 4D 重建,这是现有空间和时间条件下最具

挑战性的场景之一。

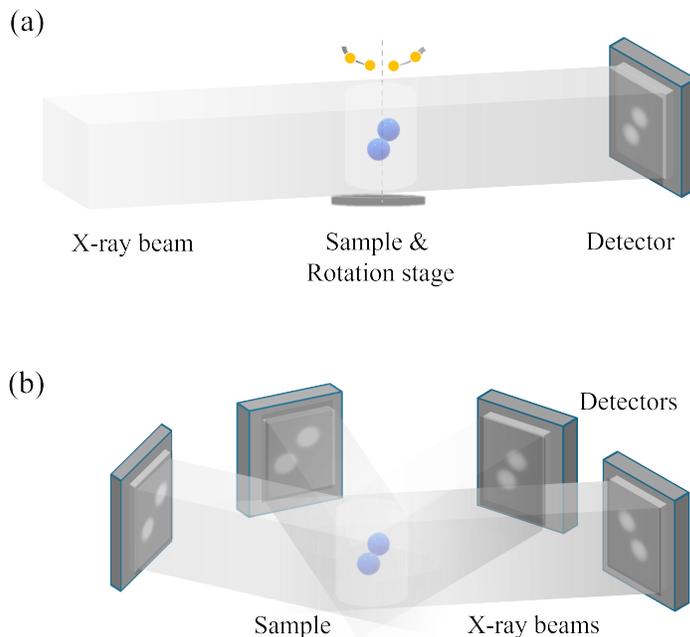


图 1. 时间分辨 X 射线断层成像和 XMPI 的概念配置。(a) 时间分辨 X 射线断层成像需要样品的连续旋转，以在不同时间从不同的角度获取投影图像；(b) XMPI 是一种无需旋转的技术，它生成多个二次 X 射线束，同时从不同角度照亮样品。此图改编自参考文献 [38]。

3. 模拟

为了为测试我们提出的物理信息重建方法提供合适的数据集，我们进行了二元液滴碰撞的数值模拟。本工作的模拟包括两个步骤，分别在子章节 3.1 和 3.2 中解释。第一步中，我们通过数值求解控制这种动态的偏微分方程来模拟碰撞的 4D 动力学。这一步可以为评估 4D 重建提供真实情况。第二步中，我们模拟了 XMPI 实验以在每个时间点获取 2D 投影图像，这些图像随后用于 4D 重建。

3.1. 二元水滴碰撞的四维模拟

我们模拟了两个直径为 80μ 米的相同液滴以恒定速度正面碰撞的 4D 液滴碰撞过程。此过程由以下非量纲化不可压缩流体的 Navier-Stokes 方程控制，该流体具有潜在的表

面张力 $\eta \nabla \psi$ (η 表示如 Cahn-Hilliard 方程 [39] 中所定义的化学势):

$$\rho(\psi)(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) - \frac{\mu(\psi)}{\text{Re}} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p + \frac{\eta \nabla \psi}{\text{We}} = \mathbf{0} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

在上述方程中, $\psi \in [-1, 1]$ 是相变量, 其中 $\psi = 1$ 代表纯水, $\psi = -1$ 代表纯空气, 而 $\psi \in (-1, 1)$ 则表示水和空气的混合相; \mathbf{u} 和 p 分别表示矢量速度场和标量压力场; 密度 (ρ) 和粘度 (μ) 作为 ψ 的函数表达如下:

$$\rho(\psi) = \frac{1}{2}((1 + \psi)\rho_1 + (1 - \psi)\rho_2) \quad \text{and} \quad \mu(\psi) = \frac{1}{2}((1 + \psi)\mu_1 + (1 - \psi)\mu_2) \quad (3)$$

我们使用开源框架 DUNE [40], [41] 来数值求解相变量 ψ 和场变量 \mathbf{u} 及 p 。对于本工作中进行的模拟, 使用了以下参数: $\text{Re} = 200$, $\text{We} = 6.94$, $\rho_1 = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\rho_2 = 1 \text{ kg/m}^3$, $\mu_1 = 10^{-3} \text{ Ns/m}^2$ 和 $\mu_2 = 10^{-5} \text{ Ns/m}^2$ 。4D 模拟包含总共 75 个时间点或帧, 两个相邻帧之间的时间差为 0.075μ 秒。不同时间点的 3D 物体展示了液滴碰撞过程的不同阶段, 显示在图 2 的第一行。

3.2. XMPI 数据集的模拟

基于第 3.1 节中展示的 4D 模拟, 使用 X 射线投影近似 (弱散射) [42] 生成了像素大小为 4μ 米的投影图像。我们模仿了在欧洲 XFEL 进行的现有 MHz XMPI 实验中的苛刻条件, 每个时间点只有两个投影 [15]。具体来说, 我们将 X 射线能量设置为 10 千电子伏特, 并将两个投影之间的角度设为 $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1 = 23.8^\circ$ 。为了简洁起见, 我们把从两个视角获取的一系列投影图像的采集称为 XMPI 实验。特定时间点的模拟投影显示在图 2 的第二行和第三行。

为了分析我们提出的基于物理信息的重建方法的能力, 我们在同一 XMPI 实验的基础上建立了两个具有不同时间点稀疏度的数据集。第一个数据集 (75 帧数据集) 包含了所有 75 个时间点的投影图像, 对应的帧率为 13.3 MHz; 而第二个数据集 (15 帧数据集) 是第一个数据集的一个子集, 在这里我们每隔 5 个时间点从第一个数据集中取一次数据, 对应的帧率为 2.7 MHz。

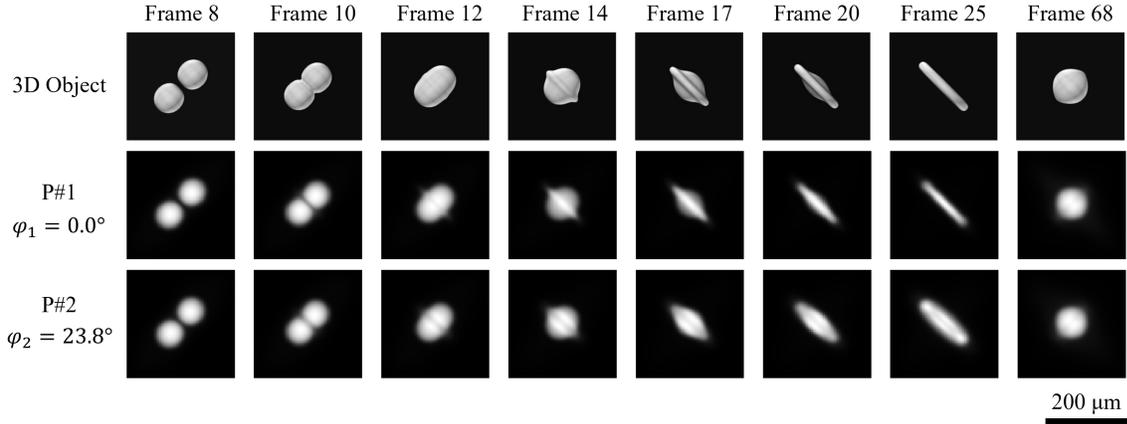


图 2. 示例的模拟 3D 物体和八个不同时间点的投影图像。第一行显示了模拟的 3D 物体。第二行和第三行分别显示了在 $\varphi_1 = 0^\circ$ 和 $\varphi_2 = 23.8^\circ$ 时的模拟 2D 投影图像。

4. 四维重建方法

4.1. 4D-PIONIX

为了解决从超稀疏时空数据进行 4D 重建的挑战,我们设计了一种基于自监督深度学习方案的物理信息重建方法,如图 3 所示,该方法灵感来源于最先进的算法 4D-ONIX[25]。4D-PIONIX 结合了神经隐式表示、生成对抗神经网络 (GAN) 和物理信息神经网络 (PINN) 的关键概念,可靠地生成所观察动态的 4D 表示。

我们的方法由两个神经网络组成:一个 4D 生成器和一个判别器。该 4D 生成器由包含五层 ResBlocks [43] 的全连接多层感知器 (MLP) 构成。它生成从 4D 时空坐标 (\mathbf{x} , 时间) 到样本物理属性的映射。这些物理属性不仅包括样本的折射率,还包括在完整物理模型中涉及的两个辅助变量 (速度场 \mathbf{u} 和压力场 p , 用于计算基于 PDE 的损失函数)。折射率用两个非负分量的复数 (δ, β) 表示,如公式 4 所示;它与相位变量 ψ 的关系在公式 5 中给出,其中 n_1 和 n_2 分别表示给定 X 射线能量下水和空气的折射率,在 XMPI 实验中。

$$n = 1 - \delta + i\beta \quad (4)$$

$$n(\psi) = \frac{1}{2}((1 + \psi)n_1 + (1 - \psi)n_2) \quad (5)$$

折射率决定了 X 射线相互作用的规律,使我们能够基于四维表示从任意角度在任何时间点生成投影图像。生成投影图像 [25] 的过程如图 3(b) 所示。对于给定的时间和一个以特定投影角度定向的光线,我们使用射线传播和物质相互作用在投影近似下的原理

沿着光线积分折射率 [42]。通过组装形成探测器图像的所有光线在一个方向上，生成投影图像。判别器由卷积神经网络 (CNN) 构成。判别器的目标是区分来自真实 (测量) 的投影图像和重构算法预测的投影图像之间的图像块 [44] 差异。利用判别器的反馈信息，生成器可以被训练提供更高质量的 4D 表示，从而使得生成的投影图像更难以被判别器区分开来。

三种不同的损失函数用于约束 4D 重建和完整的物理模型：自一致性损失、GAN 损失以及基于 PDE 的损失。在实施 4D-ONIX 之后，自洽损失和 GAN 损失分别由公式 6 和公式 7 描述，

$$\mathcal{L}_{\text{MSE}} = \sum_{\nu \in \{\alpha, \beta\}} \|\mathbf{c}_\nu - \hat{\mathbf{c}}_\nu\|_2^2, \quad (6)$$

$$\mathcal{L}_{\text{GAN}} = \mathbb{E}_{\mathbf{c}_\nu \sim p_D} \log(D(\mathbf{c}_\nu)) + \mathbb{E}_{\hat{\mathbf{c}}_\nu \sim p_\nu} \log(1 - D(\hat{\mathbf{c}}_\nu)) \quad (7)$$

其中 \mathbf{c}_ν 和 $\hat{\mathbf{c}}_\nu$ 分别表示来自真实和生成投影的图像块； α 和 β 表示记录投影的两个角度； D 表示判别器。

基于 PDE 的损失是基于方程 1 和 2，可以通过自动微分来计算：

$$\mathcal{L}_{\text{PDE}} = \left\| \rho(\psi) (\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) - \frac{\mu(\psi)}{\text{Re}} \nabla \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla p + \frac{\eta \nabla \psi}{\text{We}} \right\|_2^2 + \|\nabla \cdot \mathbf{u}\|_2^2 \quad (8)$$

4.2. 训练详情

为了高效利用三个损失函数来约束 4D 表示并避免 GANs [45] 的模式坍塌问题，我们在训练过程中采用了以下策略。在第一阶段，对于每次迭代，我们生成了模拟中提供的两个固定角度 ($\varphi_1 = 0^\circ$ 和 $\varphi_2 = 23.8^\circ$) 的投影图像，并基于 \mathcal{L}_{MSE} 和 \mathcal{L}_{PDE} 优化损失函数。在第二阶段，我们允许每次迭代有 50% 的概率生成任意角度的投影图像，即除了 φ_1 和 φ_2 之外的角度。当生成随机角度的投影时，我们基于 L_{GAN} 和 \mathcal{L}_{PDE} 优化损失函数，因为在这些角度上的测量投影不可用。

我们在 Python 3.9 和 PyTorch 1.12 中实现了该算法。训练在配备 32 GB 内存的 NVIDIA V100 GPU 上进行。训练周期的数量根据数据集中包含的帧数进行了调整。例如，对于 15 帧的数据集我们训练了 9600 个周期，而对于 75 帧的数据集则训练了 5400 个周期。在这两种情况下，训练模型大约需要 35 小时。

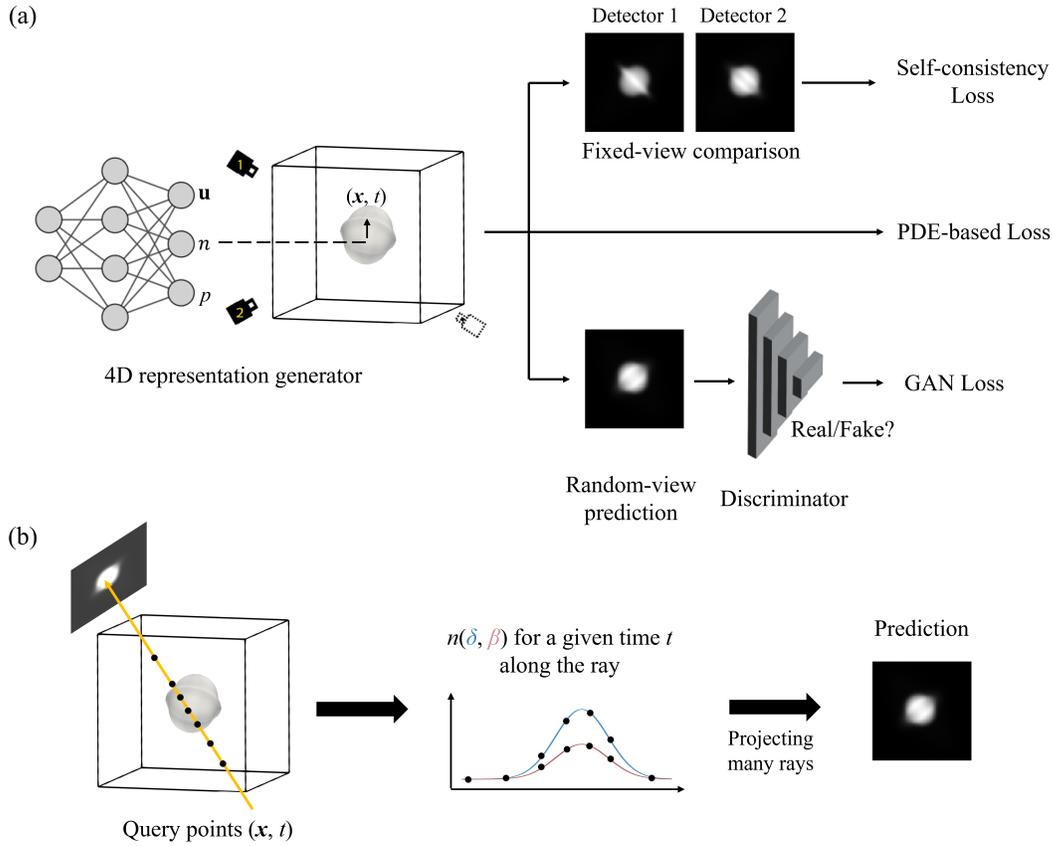


图 3. (a) 4D-PIONIX 工作流程概述。4D 表示生成从 4D 空间-时间坐标 $(\mathbf{x}, \text{时间})$ 到样本物理属性的映射。该表示受到以下约束：i) 在给定角度下，生成和记录的投影之间的自洽性；ii) 完整物理模型提供的偏微分方程 (PDE)；iii) 基于随机角度生成的投影的判别器反馈。(b) 投影图像的生成。对于每个以特定投影角度射出的光线，我们使用 X 射线传播和与物质相互作用的原则沿光线积分折射率。在采样所有产生检测器图像的光线后形成投影图像。该图改编自参考文献 [25]。

5. 结果与讨论

在本节中，我们评估了 4D-PIONIX 的性能，并展示了它如何提供一个解决方案来克服使用单一模拟 XMPI 实验产生的极有限数据集进行 4D 重建的挑战。在第 5.1 节中，我们使用两个对应同一 XMPI 实验但可用时间点数量不同的数据集评估其性能。在第 5.2 节中，我们将我们的方法与用于稀疏视图 4D X 射线成像的最新重建方法 4D-ONIX [25] 进行比较。为了使用 4D-ONIX 检索最优重建结果，我们使用了一个包含 16 次液滴碰撞的数据集，每次碰撞都模拟了在相似但不完全相同的条件下进行的 XMPI 实验。为方便起见，我们将这个额外的数据集称为 16 实验数据集。

5.1. 使用单一实验进行 4D-PIONIX 重建

在本节中，我们使用包含 75 帧的数据集和仅含一个 XMPI 实验的 15 帧数据集评估了我们提出的 4D-PIONIX 的性能，如第 3.2 节所述。在这两种情况下，我们都评估了所有 75 个时间点的 4D 表示的质量以验证我们的物理信息方法的能力。通过比较重建结果和真实值，计算了三个定量指标来评估重建质量：均方误差 (MSE)；不相似结构相似性指数度量 (DSSIM) [46]，以及基于傅里叶壳相关 (FSC) 并采用半位阈值标准的估算分辨率 [47]。对于这三个定量指标，数值越小表示重建质量越好。

基于 15 帧数据集和 75 帧数据集使用我们提出的 4D-PIONIX 算法重建的 3D 对象分别显示在图 4(a) 的第 (2) 行和第 (3) 行，以及第 (1) 行的真实值。需要注意的是，所有的 3D 真实值都无法被我们的算法访问到，它们仅用于评估。所有 75 个时间点上的 3D 指标的分布及统计数据（均值和标准差）分别显示在图 4(b)-(d)（绿色和黄色曲线）和表 1 中。除了 3D 指标，我们还计算了整个 3D 电影的 4D 指标（4D-MSE 和 4D-DSSIM）。与 75 帧数据集相比，15 帧数据集导致略微更高的 4D-DSSIM 和略微更低的 4D-MSE。这两个数据集的定量 3D 和 4D 指标相当，显示出通过基于 PDE 的损失约束物理过程的可能性。

总之，4D-PIONIX 可以使用仅包含单个 XMPI 实验的数据集提供整个 75 帧序列的可靠 4D 重建。具体来说，使用 15 帧数据集进行的 4D 重建质量与使用 75 帧数据集的质量相当，即使对于数据集中不可用的时间点也是如此。这清楚地展示了 4D-PIONIX 捕捉物理过程并在未见时间点重现它的能力。

5.2. 与 4D-ONIX 的比较

我们已经证明，4D-PIONIX 有潜力使用单一 XMPI 实验中的最少 15 个时间点来重建 4D 动态。在本节中，我们通过将其与最先进的 4D 重建方法 4D-ONIX 进行比较，验证了我们提出的 4D-PIONIX 方法的独特能力。

正如参考文献 [25] 中所述，当数据集中包含更多相似的 XMPI 实验时，4D-ONIX 的效果更好。因此，为了确保 4D-ONIX 正常工作，我们首先对单个实验数据集（与上一节中的 75 帧情况相同）和包含总共 1200 帧的 16 个实验数据集实施了 4D-ONIX，类似于参考文献 [25] 中所做的。需要注意的是，4D-ONIX 利用投影图像和编码器作为神经

表 1. 4D 和 3D 度量结果对于 4D-PIONIX 和 4D-ONIX。

Dataset	# Experiments	4D-PIONIX		4D-ONIX	
		1	1	1	16
conditions	# Time points	15	75	75	1200
3D metrics (mean \pm std)	3D-MSE $\times 10^{-4}$	2.2 \pm 1.1	2.3 \pm 1.0	4.2 \pm 2.0	2.5 \pm 1.1
	3D-DSSIM $\times 10^{-3}$	2.7 \pm 0.6	2.5 \pm 0.6	5.0 \pm 1.5	2.3 \pm 0.8
	3D-resolution (voxels)	3.9 \pm 0.5	4.3 \pm 1.0	4.2 \pm 0.4	4.4 \pm 1.3
4D metrics	4D-MSE $\times 10^{-4}$	2.22	2.27	4.23	2.52
	4D-DSSIM $\times 10^{-3}$	2.69	2.51	5.12	2.34

网络的输入。因此，它不能为未见过的时间点提供合适的 4D 重建。换句话说，使用 15 帧数据集作为输入来重构所有 75 个时间点是不可可能的，这突显了 4D-PIONIX 的独特能力。使用 4D-ONIX 在几个时间点上重构的对象如图 4 (a) 中的第 (4) 行和第 (5) 行所示。这些结果与参考文献 [25] 中发现的一致，即 4D-ONIX 更喜欢使用从不同视角看到的相同或相似动力学的几个 XMPI 实验来重构 4D 过程。

其次，我们将 4D-ONIX 的结果与前一节展示的 4D-PIONIX 结果进行比较。表 1 总结了数据集的条件、重建的 4D 指标以及分别使用 4D-PIONIX 和 4D-ONIX 时相对于时间的 3D 指标。与使用 16 实验数据集的 4D-ONIX 相比，使用单个实验数据集（无论是使用 15 帧数据集还是 75 帧数据集）的 4D-PIONIX 在 3D 指标上提供了类似的统计数据，并且 4D-MSE 略低，4D-DSSIM 略高。此外，为了比较随时间变化的 3D 指标（3D-MSE、3D-DSSIM 和 3D 分辨率）分布，给出了图 4(b)-(d)，合并了这些三个重建条件下表 1 所示的 3D 指标相似性。简而言之，除了在单个实验数据上使用 4D-ONIX 的情况外，所有三种重建条件都能在空间和时间上检索到高质量的 4D 重建。

总之，4D-PIONIX 在两个关键方面优于 4D-ONIX。首先，仅使用单个实验的 4D-PIONIX 可以提供与使用多个实验的 4D-ONIX 相媲美的 4D 重建质量，表明其能够应对来自极有限数据的挑战。其次，得益于 4D-PIONIX 中使用的完整物理模型，它可以提供在未见时间点上的 3D 重建，并且通过捕捉物理过程可能提升时间分辨率。在这里，我们通过比较 4D-PIONIX 和 4D-ONIX 的工作流程来定性解释。一方面，在 4D-ONIX 中，生成器的输入不仅包括时空坐标 (\mathbf{x} , 时间)，还包括来自两个视角的投影图像的编码版本。后者，特别是基于 CNN 的编码器，在训练过程中扮演着重要角色，因

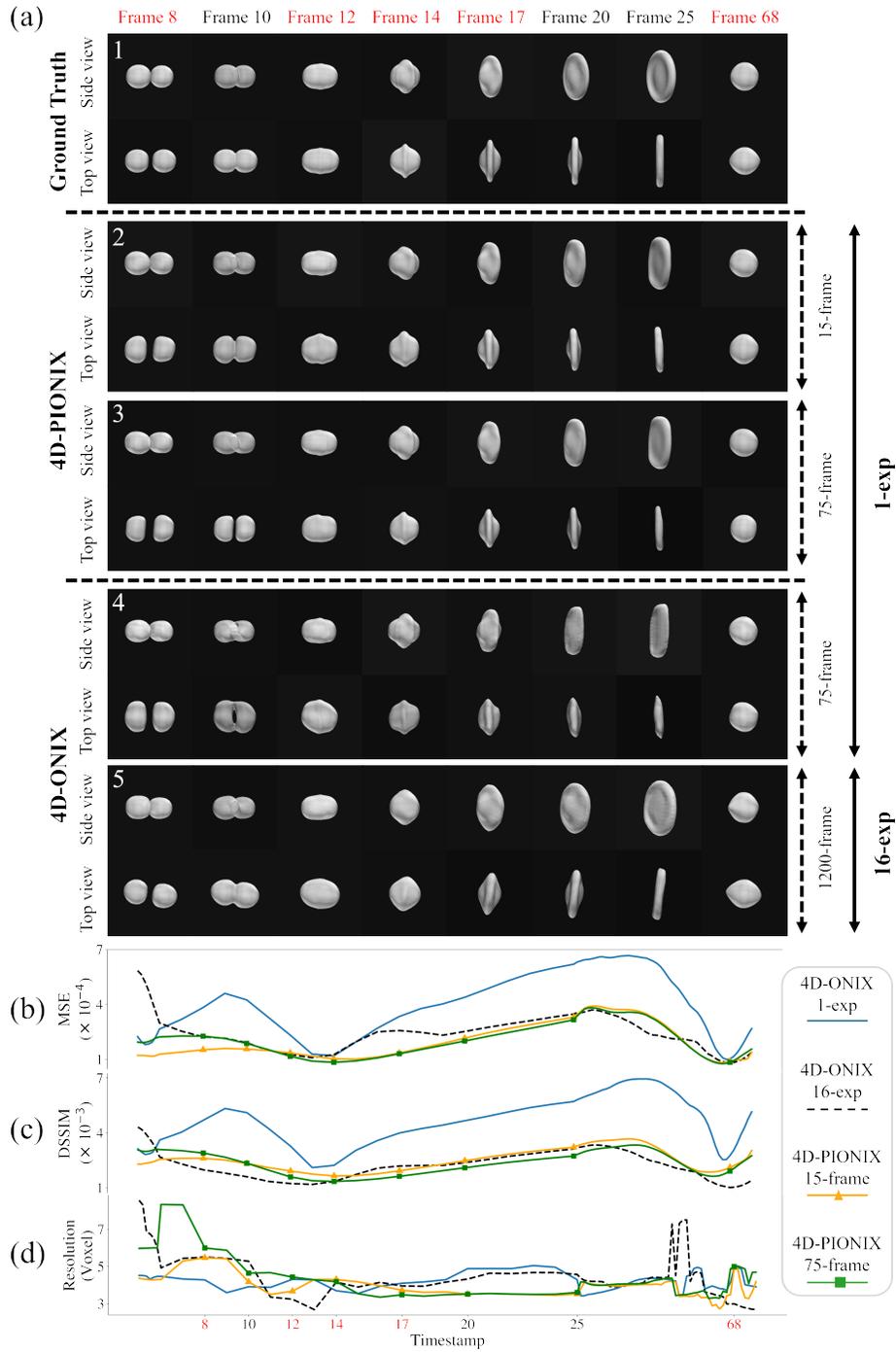


图 4. 重建结果。(a) 真实值 (1) 和使用 4D-PIONIX、15 帧数据集 (2); 4D-PIONIX、75 帧数据集 (3); 4D-ONIX、1 次实验数据集 (4); 4D-ONIX、16 次实验数据集 (5) 在八个时间点的重建结果。在标记为红色的时间点上, 15 帧数据集中没有投影图像, 而在标记为黑色的时间点上, 四个数据集都有可用的投影图像。(b) - (d) 在所有四种重建设置下, 作为时间函数的 3D MSE (b)、3D DSSIM (c) 以及通过 FSC 分析估计的 3D 分辨率 (d) 的分布比较。

为它有助于在不同相似实验之间传递知识。因此，4D-ONIX 本质上是一种数据驱动的方法，并且只能在给定合适投影图像的时间点上提供适当的 3D 重建。另一方面，在 4D-PIONIX 中，生成器的输入仅仅是时空坐标。这意味着即使在未见过的时间点上，我们仍然可以利用基于偏微分方程的损失函数 \mathcal{L}_{PDE} 来约束四维表示。4D-PIONIX 的优势显著减少了超快三维成像实验如 XMPI 的操作时间和难度。此外，随机动力学的研究可以从 4D-PIONIX 中获得巨大益处，因为这类实验通常是不可重现的。

我们提出的 4D-PIONIX 方法也面临着几个挑战。首先，建模观测动力学的完整物理过程通常是一项艰巨的任务，但在 4D-PIONIX 工作流程中这是至关重要的。其次，尽管与 4D-ONIX 相比，4D-PIONIX 可以接受更小的数据集，但总计算时间并没有显著减少。这是因为当我们计算基于偏微分方程的损失时，特别是二阶导数时，存在繁重的计算映射。很有可能通过实现数值差分 [48] 而不是完全依赖自动微分来解决这个问题。

6. 总结与展望

在本研究中，我们介绍了 4D-PIONIX，一个用于 4D X 射线成像的完全基于物理信息的重建工具。通过包含观测动力学以及 X 射线传播和与物质相互作用的完整物理模型，4D-PIONIX 即使使用超稀疏时空数据也能提供可靠的 4D 重建。此外，它还可能利用完整的物理模型作为约束条件，在没有记录投影图像的时间点上进行正确的 3D 重建。我们预计 4D-PIONIX 将为各种 X 射线成像模式中的快速动态 4D X 射线图像重建开辟新的可能性。例如，在时间分辨断层扫描中，结合完整物理模型的重建工作流程可以帮助减少旋转速度的要求和重建所需的投影数量，而不影响时空分辨率。除了 4D 重建之外，我们的基于物理信息的工作流程还可能扩展到检索物理模型中的未知物理参数 [26]，为各种快速 4D 动态研究铺平道路，如流体动力学和复合材料测试。

Acknowledgments

我们感谢 Z. Matej 对我们使用 MAX IV 集群的支持和访问权限。我们感谢 Lund 大学的科学和技术计算中心 LUNARC 提供用于仿真的计算资源。本工作得到了 ERC-2020-STG, 3DX-FLASH (948426), 瑞典研究委员会, AI-Twin (2024-04904) 和 HorizonEIC-2021-PathfinderOpen-01-01, MHz-TOMOSCOPY (101046448) 的资金和支持。

References

- [1] Y. Wang et al., “Ultrafast x-ray study of dense-liquid-jet flow dynamics using structure-tracking velocimetry,” *Nature Physics*, vol. 4, no. 4, pp. 305–309, 2008.
- [2] M. P. Olbinado et al., “Mhz frame rate hard x-ray phase-contrast imaging using synchrotron radiation,” *Optics Express*, vol. 25, no. 12, pp. 13 857–13 871, 2017, ISSN: 1094-4087 (Electronic) 1094-4087 (Linking).
- [3] P. Vagovič et al., “Megahertz x-ray microscopy at x-ray free-electron laser and synchrotron sources,” *Optica*, vol. 6, no. 9, pp. 1106–1109, 2019.
- [4] Z. Yao et al., “New opportunities for time-resolved imaging using diffraction-limited storage rings,” *Synchrotron Radiation*, vol. 31, no. 5, 2024.
- [5] A. Tekawade, B. A. Sforzo, K. E. Matusik, K. Fezzaa, A. L. Kastengren, and C. F. Powell, “Time-resolved 3d imaging of two-phase fluid flow inside a steel fuel injector using synchrotron x-ray tomography,” *Scientific Reports*, vol. 10, no. 1, p. 8674, 2020.
- [6] M. G. Makowska et al., “Operando tomographic microscopy during laser-based powder bed fusion of alumina,” *Communications Materials*, vol. 4, no. 1, p. 73, 2023.
- [7] R. F. Ziesche et al., “4d imaging of lithium-batteries using correlative neutron and x-ray tomography with a virtual unrolling technique,” *Nature communications*, vol. 11, no. 1, p. 777, 2020.
- [8] A. Ziegler, T. Köhler, and R. Proksa, “Noise and resolution in images reconstructed with fbp and osc algorithms for ct,” *Medical physics*, vol. 34, no. 2, pp. 585–598, 2007.
- [9] P. Ning, S. Zhu, D. Shi, Y. Guo, and M. Sun, “X-ray dose reduction in abdominal computed tomography using advanced iterative reconstruction algorithms,” *PloS one*, vol. 9, no. 3, e92568, 2014.
- [10] Z. Yu, X. Wen, and Y. Yang, “Reconstruction of sparse-view x-ray computed tomography based on adaptive total variation minimization,” *Micromachines*, vol. 14, no. 12, p. 2245, 2023.
- [11] P. Villanueva-Perez et al., “Hard x-ray multi-projection imaging for single-shot approaches,” *Optica*, vol. 5, no. 12, pp. 1521–1524, 2018.

- [12] J. Duarte et al., “Computed stereo lensless x-ray imaging,” *Nature photonics*, vol. 13, no. 7, pp. 449–453, 2019.
- [13] W. Voegeli, K. Kajiwara, H. Kudo, T. Shirasawa, X. Liang, and W. Yashiro, “Multibeam x-ray optical system for high-speed tomography,” *Optica*, vol. 7, no. 5, pp. 514–517, 2020.
- [14] S. I. Kabanikhin, *Inverse and ill-posed problems: theory and applications*. de Gruyter, 2011.
- [15] P. Villanueva-Perez et al., “Megahertz x-ray multi-projection imaging,” *arXiv preprint arXiv:2305.11920*, 2023.
- [16] H. Zhang et al., “Iterative reconstruction for x-ray computed tomography using prior-image induced nonlocal regularization,” *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, vol. 61, no. 9, pp. 2367–2378, 2013.
- [17] F. Engelmann, J. Stückler, and B. Leibe, “Samp: Shape and motion priors for 4d vehicle reconstruction,” in *2017 IEEE Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV)*, IEEE, 2017, pp. 400–408.
- [18] D. Ulyanov, A. Vedaldi, and V. Lempitsky, “Deep image prior,” in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, 2018, pp. 9446–9454.
- [19] B. Mildenhall, P. P. Srinivasan, M. Tancik, J. T. Barron, R. Ramamoorthi, and R. Ng, “Nerf: Representing scenes as neural radiance fields for view synthesis,” *Communications of the ACM*, vol. 65, no. 1, pp. 99–106, 2021.
- [20] A. Yu, V. Ye, M. Tancik, and A. Kanazawa, “Pixelnerf: Neural radiance fields from one or few images,” in *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition*, 2021, pp. 4578–4587.
- [21] Y. Zhang, Z. Yao, T. Ritschel, and P. Villanueva-Perez, “Onix: An x-ray deep-learning tool for 3d reconstructions from sparse views,” *Applied Research*, vol. 2, no. 4, e202300016, 2023.
- [22] Y. Cai, J. Wang, A. Yuille, Z. Zhou, and A. Wang, “Structure-aware sparse-view x-ray 3d reconstruction,” in *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 2024, pp. 11 174–11 183.

- [23] A. Corona-Figueroa, J. Frawley, S. Bond-Taylor, S. Bethapudi, H. P. Shum, and C. G. Willcocks, “Mednerf: Medical neural radiance fields for reconstructing 3d-aware ct-projections from a single x-ray,” in *2022 44th annual international conference of the IEEE engineering in medicine & Biology society (EMBC)*, IEEE, 2022, pp. 3843–3848.
- [24] Y. Zheng and K. B. Hatzell, “Ultrasparse view x-ray computed tomography for 4d imaging,” *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 15, no. 29, pp. 35 024–35 033, 2023.
- [25] Y. Zhang, Z. Yao, R. Klöfkorn, T. Ritschel, and P. Villanueva-Perez, “4d-onix: A deep learning approach for reconstructing 3d movies from sparse x-ray projections,” *arXiv preprint arXiv:2401.09508*, 2024.
- [26] M. Raissi, P. Perdikaris, and G. E. Karniadakis, “Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations,” *Journal of Computational physics*, vol. 378, pp. 686–707, 2019.
- [27] G. E. Karniadakis, I. G. Kevrekidis, L. Lu, P. Perdikaris, S. Wang, and L. Yang, “Physics-informed machine learning,” *Nature Reviews Physics*, vol. 3, no. 6, pp. 422–440, 2021.
- [28] S. Cuomo, V. S. Di Cola, F. Giampaolo, G. Rozza, M. Raissi, and F. Piccialli, “Scientific machine learning through physics-informed neural networks: Where we are and what’s next,” *Journal of Scientific Computing*, vol. 92, no. 3, p. 88, 2022.
- [29] F. Shone et al., “Deep physics-informed super-resolution of cardiac 4d-flow mri,” in *International Conference on Information Processing in Medical Imaging*, Springer, 2023, pp. 511–522.
- [30] K. Yang, X. Liu, W. Feng, F. Lian, and Y. Kong, “A super resolution flow field reconstruction method using pinn,” in *First Aerospace Frontiers Conference (AFC 2024)*, SPIE, vol. 13218, 2024, pp. 874–883.
- [31] M. Chu et al., “Physics informed neural fields for smoke reconstruction with sparse data,” *ACM Transactions on Graphics (ToG)*, vol. 41, no. 4, pp. 1–14, 2022.
- [32] Z. Duan and Z. Ren, “Physics-informed neural fields with neural implicit surface for fluid reconstruction,” 2024.

- [33] N. Maul et al., “Physics-informed learning for time-resolved angiographic contrast agent concentration reconstruction,” *arXiv preprint arXiv:2403.01993*, 2024.
- [34] F. Garcia-Moreno et al., “Tomoscopy: Time-resolved tomography for dynamic processes in materials,” *Advanced Materials*, vol. 33, no. 45, p. 2104659, 2021.
- [35] E. M. Asimakopoulou et al., “Development towards high-resolution khz-speed rotation-free volumetric imaging,” *Optics Express*, vol. 32, no. 3, pp. 4413–4426, 2024.
- [36] V. Bellucci et al., “Development of crystal optics for x-ray multi-projection imaging for synchrotron and xfel sources,” *Journal of Synchrotron Radiation*, vol. 31, no. 6, 2024.
- [37] P. Vagovič et al., “Megahertz x-ray microscopy at x-ray free-electron laser and synchrotron sources,” *Optica*, vol. 6, no. 9, pp. 1106–1109, 2019.
- [38] Y. Zhang, “Advancing x-ray imaging with deep learning: Physics-inspired reconstruction approaches,” PhD thesis, Lund University, Lund, Sweden, 2024.
- [39] A. Lovrić, W. G. Dettmer, and D. Perić, “Low order finite element methods for the navier-stokes-cahn-hilliard equations,” *arXiv preprint arXiv:1911.06718*, 2019.
- [40] P. Bastian et al., “The dune framework: Basic concepts and recent developments,” *Computers & Mathematics with Applications*, vol. 81, pp. 75–112, 2021.
- [41] A. Dedner and R. Klöforn, “Extendible and efficient python framework for solving evolution equations with stabilized discontinuous galerkin methods,” *Communications on Applied Mathematics and Computation*, pp. 1–40, 2021.
- [42] D. Paganin, *Coherent X-ray optics*. Oxford University Press, USA, 2006, pp. 71–77.
- [43] K. He, X. Zhang, S. Ren, and J. Sun, “Deep residual learning for image recognition,” in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, 2016, pp. 770–778.
- [44] C. Ledig, L. Theis, F. Huszar, J. Caballero, A. Cunningham, A. Acosta, et al., “Photo-realistic single image super-resolution using a generative adversarial network,” in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, vol. 2017, 2017, pp. 4681–4690.

- [45] N. Kodali, J. Abernethy, J. Hays, and Z. Kira, “On convergence and stability of gans,” *arXiv preprint arXiv:1705.07215*, 2017.
- [46] Z. Wang, A. C. Bovik, H. R. Sheikh, and E. P. Simoncelli, “Image quality assessment: From error visibility to structural similarity,” *IEEE transactions on image processing*, vol. 13, no. 4, pp. 600–612, 2004.
- [47] M. Van Heel and M. Schatz, “Fourier shell correlation threshold criteria,” *Journal of structural biology*, vol. 151, no. 3, pp. 250–262, 2005.
- [48] P.-H. Chiu, J. C. Wong, C. Ooi, M. H. Dao, and Y.-S. Ong, “Canpinn: A fast physics-informed neural network based on coupled-automatic-numerical differentiation method,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 395, p. 114 909, 2022.