УДК 004.932; 004.925.4; 51-73

ГРАФИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССОРЫ В ЗАДАЧАХ ЭЛЕКТРОННОЙ ТОМОГРАФИИ*

Е. В. Пустовалов, О. В. Войтенко, Б. Н. Грудин, В. С. Плотников

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Дальневосточный федеральный университет», 690950, г. Владивосток, Суханова, 8
E-mail: pust@lemoi.phys.dvgu.ru

Реализованы алгоритмы томографического восстановления структуры по микроскопическим изображениям с использованием графических процессоров общего применения. Исследованы влияние шумов и выбор восстанавливающих фильтров применительно к томографическим задачам в материаловедении. Показано, что применение ρ-фильтрации при реконструкции позволяет оценивать геометрические характеристики объёмных микроструктур в аморфных металлических сплавах.

Ключевые слова: электронная томография, графические процессоры, фильтрация изображений.

Введение. Будем считать, что в микроскопе образец просвечивается плоскопараллельным пучком электронов. В случае, если функция пропускания образца является функцией двух переменных $f(x, y)$, то с помощью оптической системы микроскопа формируется одномерная проекция этой функции (рис. 1). Электронная томография (ЭТ) в двумерном случае предполагает получение при различных углах наклона образца θ по отношению к электронному пучку серии одномерных проекций и восстановление по ним двумерного распределения $f(x, y)$ [1]. Для математического описания связи проекций с искомым распределением $f(x, y)$ наряду с неподвижной системой координат (x, y) вводится вращающаяся вместе с образцом система координат (ξ, ζ), в которой $\xi = x\cos\theta + y\sin\theta$, $\zeta = -y\sin\theta + x\cos\theta$. При повороте образца на угол θ в микроскопе регистрируется одномерная проекция $p(\xi, \theta)$, которая связана с функцией $f(x, y)$ преобразованием Радона [2, 3]. Для обращения преобразования Радона нами использовались методы двумерной и одномерной фильтрации [2].

В трёхмерном случае в системе координат (x, y, z) (ось Oz перпендикулярна плоскости (xOy), см. рис. 1) в выходной плоскости электронного микроскопа при вращении образца вокруг оси Oz наблюдаются изображения, каждая строка которых является одномерной проекцией двумерного сечения распределения $f(x, y, z)$. При этом исходная задача разбивается на ряд двумерных реконструкций в плоскостях $z = \text{const}$. В этом случае для восстановления распределения $f(x, y, z)$ необходимы значительные вычислительные ресурсы. Ещё бо́льшие ресурсы требуются при исследовании различных особенностей методов и алгоритмов реконструкции и при работе с реальными микроскопическими изображениями.

Целью данной работы является исследование результатов применения графических процессоров типа GPGPU с архитектурой NVIDIA (технология CUDA) [4] в задачах

*Работа выполнена при поддержке Федеральных целевых программ «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.» (ГК № 14.740.11.1015) и «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 гг.» (ГК № 16.515.12.5005).

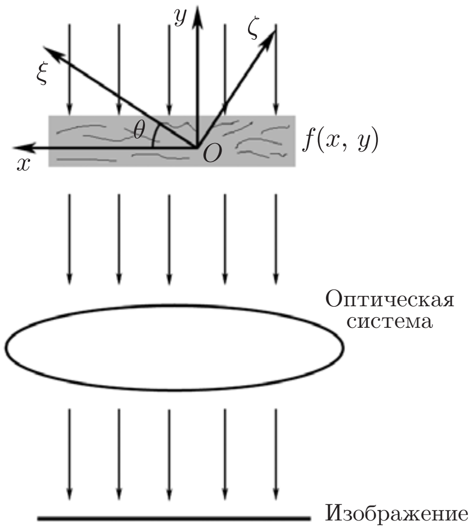

Рис. 1. Схема регистрации проекций в электронном микроскопе

электронной томографии при проведении вычислительных экспериментов на моделях и с реальными данными, полученными на электронных микроскопах "Titan 80-300"("FEI Company", Голландия) и "Libra 200FE"("Carl Zeiss", Германия).

1. Вычислительные эксперименты с моделями. В качестве тестовых объектов на пространственной дискретной сетке размером $512 \times 512 \times 512$ отсчётов генерировались случайные распределения эллипсоидов, параметры и количество которых задаются исследователем. В наших экспериментах с моделями средний размер полуосей эллипсоидов $\lambda \in [1, 50]$ отсчётов. Также устанавливаются диапазон углов наклона модели и количество проекций. На каждую из проекций тестового распределения мог накладываться белый гауссов шум.

Пусть (k, l) — дискретные отсчёты на квадратной сетке двумерных проекций $p(k; l; \theta_i)$, регистрируемые в микроскопе; $\theta_i = (\Delta\theta)i/I$ — угол наклона образца; $\Delta\theta$ — диапазон углов; I — количество проекций; $i = 1, 2, \ldots, I$. В случае реконструкции по методу одномерной фильтрации [2] каждая l-я строка проекции $p(k; l; \theta_i)$ обрабатывалась фильтром с импульсной характеристикой $h(k)$. Затем производилось обратное проецирование $b(m, n; l; \theta_i) = p_h(m \cos\theta_i + n \sin\theta_i; l; \theta_i)$ каждой из отфильтрованных одномерных проекций $p_h(k; l; \theta_i)$, а реконструкция осуществлялась по формуле

$$f(m, n; l) = \sum_{i=1}^{I} b(m, n; l; \theta_i),$$

где $(m, n; l)$ — дискретные отсчёты пространственной реконструкции. В данном методе реконструкции программно реализованы фильтры Шеппа — Логана $h_1(k)$ и $1/z^2$-фильтры $h_2(k)$ [5].

При реконструкции по методу двумерной фильтрации [2] для каждой l-й строки изображения проекции $p(k; l; \theta_i)$ вначале производится обратное проецирование:

$$c(m, n; l; \theta_i) = p(m \cos\theta_i + n \sin\theta_i; l; \theta_i),$$

затем вычисляется сумма:

$$g(m, n; l) = \sum_{i=1}^{I} c(m, n; l; \theta_i).$$

Далее проводилась двумерная фильтрация функций $g(m, n; l)$ в частотной области с помощью фильтров $H(u_1, u_2)$ ((u_1, u_2) — дискретные отсчёты пространственных частот). Реконструкция каждой из l функций $f(m, n; l)$ осуществлялась в результате обратного дискретного преобразования Фурье (ДПФ) от произведения $G(u_1, u_2; l)H(u_1, u_2)$, где $G(u_1, u_2; l)$ — ДПФ функции $g(m, n; l)$. В данном методе программно реализованы косинус-фильтр [6]

$$H_3(u) = \begin{cases} a_0 + \dfrac{a_1 - a_0}{2}\Big(1 - \cos\dfrac{u}{u_\text{c}}\Big)^\gamma, & u \le u_\text{c}, \\[2ex] a_0 + \dfrac{a_1 - a_0}{2}\Big(1 - \sin\dfrac{u}{u_\text{c}}\Big)^\gamma, & u > u_\text{c}, \end{cases}$$

и ρ-фильтр [2]

$$H_4(u) = \begin{cases} u, & u \le u_0, \\ 0, & u > u_0, \end{cases}$$

где частота $u = \sqrt{u_1^2 + u_2^2} \in [0, \pi]$. Параметр u_0 определяет частоту среза ρ-фильтра, а a_0 и a_1 задают значения косинус-фильтра $H_3(u)$ на краях: $a_0 = H_3(0)$, $a_1 = H_3(\pi)$. Параметр u_c определяет частоту среза, на которой $H_3(u_\text{c}) = (a_0 + a_1)/2$, а γ — крутизну изменения $H_3(u)$ вблизи частоты среза.

Для вычислений использовалась 64-разрядная графическая рабочая станция HP Z800 (процессор Intel i7, 32 Гбайта оперативной памяти), в которую установлены три графических ускорителя: два из них — "NVIDIA GTX 580"(512 ядер, 1,5 Гбайта графической памяти в каждом) и один — "NVIDIA Tesla C1060"(240 ядер, 4 Гбайта графической памяти). Графические ускорители поддерживают асинхронный режим работы, что позволяет, например, загружать данные в память, производить обработку ранее загруженной информации и передавать уже обработанные данные в общую память компьютера одновременно. Выполнение операций происходит по принципу: одна инструкция — множественные данные, что в задачах ЭТ даёт возможность значительно повысить производительность.

Смоделированные данные передаются в графический ускоритель "Tesla", где осуществляется расчёт изображений проекций $p(k; l; \theta_i)$ на равномерной сетке размером 512×512 отсчётов с использованием бикубической интерполяции. Далее по методу одномерной либо двумерной фильтрации также с использованием бикубической интерполяции синтезируется томограмма $f(m, n, l)$ на пространственной сетке размером $512 \times 512 \times 512$ отсчётов.

Для моделей выполнены вычислительные эксперименты по исследованию влияния шумов и вида восстанавливающего фильтра на результаты реконструкции. Степень соответствия томограммы $f(m, n, l)$ модельным данным $f_0(m, n, l)$ оценивалась с помощью расчёта среднеквадратического расстояния

$$d(f, f_0) = \sqrt{M[(f(m, n, l) - f_0(m, n, l))^2]},$$

где M — оператор усреднения [7]. На рис. 2 представлены нормированные зависимости $d(f, f_0)$ от λ при реконструкции с использованием одномерных $h_1(k)$, $h_2(k)$ и двумерных $H_3(u)$ фильтров при $a_0 = 0$, $a_1 = 1$, $u_\text{c} = \pi/2$, $\gamma = 1$ и $H_4(u)$ при $u_0 = 4\pi/5$. Отметим, что расстояние $d(f, f_0)$ при использовании фильтров $h_1(k)$, $h_2(k)$, $H_3(u)$ уменьшается с

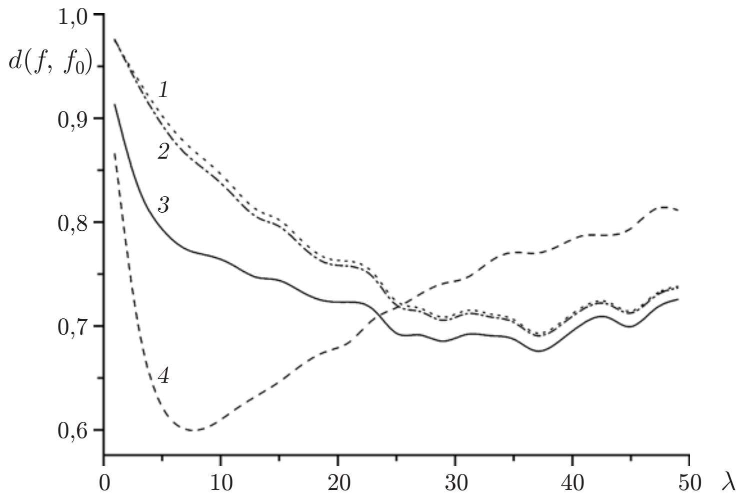

Рис. 2. Изменение расстояния между моделью и томограммой в зависимости от размера объектов для различных фильтров: кривая *1* — $1/z^2$-фильтр, *2* — фильтр Шеппа — Логана, *3* — косинус-фильтр, *4* — ρ-фильтр

увеличением λ, но для фильтра $H_4(u)$ реализуется наилучшая реконструкция при $\lambda \sim 7$–8 отсчётов. Вместе с тем при использовании фильтра $H_4(u)$ расстояние $d(f, f_0)$ достаточно резко возрастает при увеличении уровня шума, тогда как для остальных фильтров влияние шума не так критично.

Одной из задач ЭТ в материаловедении является определение границ, формы и объёма объектов на томограмме. На рис. 3, *a* приведена одна из моделей ($\lambda = 11$ отсчётов), визуализированная средствами программы "Amira 5.2". На каждую проекцию модели был наложен гауссов шум с нулевым средним и дисперсией, составляющей 8 % от максимального значения яркости на проекции. Затем для выделения объектов осуществлялась бинаризация с глобальным порогом яркостей каждой томограммы. На рис. 3, *b*—*d* показаны визуализированные томограммы модели, полученные при использовании фильтров $h_1(k)$, $H_3(u)$ и $H_4(u)$ соответственно. Параметры косинус-фильтра и ρ-фильтра такие же, как и в эксперименте, результаты которого представлены на рис. 2. Видно, что применение фильтров $h_1(k)$ и $H_3(u)$ приводит к существенному размыванию границ объектов, особенно в местах их перекрытия. Использование же ρ-фильтрации позволяет лучше визуализировать границы объектов, хотя при этом существенно возрастает уровень шумов.

2. Вычислительные эксперименты с реальными электронно-микроскопическими данными. Томографические эксперименты в предлагаемой работе выполнялись для образцов аморфных металлических сплавов (АМС). Экспериментальный набор данных, получаемый с электронного микроскопа, представляет собой стек изображений проекций $p_1(k; l; \theta_i)$, размер которых в нашем случае 1024×1024 отсчёта. В томографических держателях образцов электронных микроскопов обычно угол наклона $\theta_i \in [-70°, 70°]$.

Механическая нестабильность гониометра и держателя образцов электронного микроскопа приводит к случайным сдвигам проекций, для устранения которых нами использовался метод кросскорреляции [8]. В этом случае загруженные в центральный процессор изображения $p_1(k; l; \theta_i)$ разделялись на две группы: первая соответствовала углам наклона $\theta_i \in [-70°, 0°]$, вторая — $\theta_i \in [0°, 70°]$. Центральный процессор создавал два потока вычислений для графических ускорителей GTX 580. В каждом потоке находились кросскорреляционные функции проекций $p_1(k; l; \theta_i)$ и $p_1(k; l; \theta_{i+1})$ на основе ДПФ с помощью алгоритма БПФ. Результат передавался в центральный процессор, где вычислялись ко-

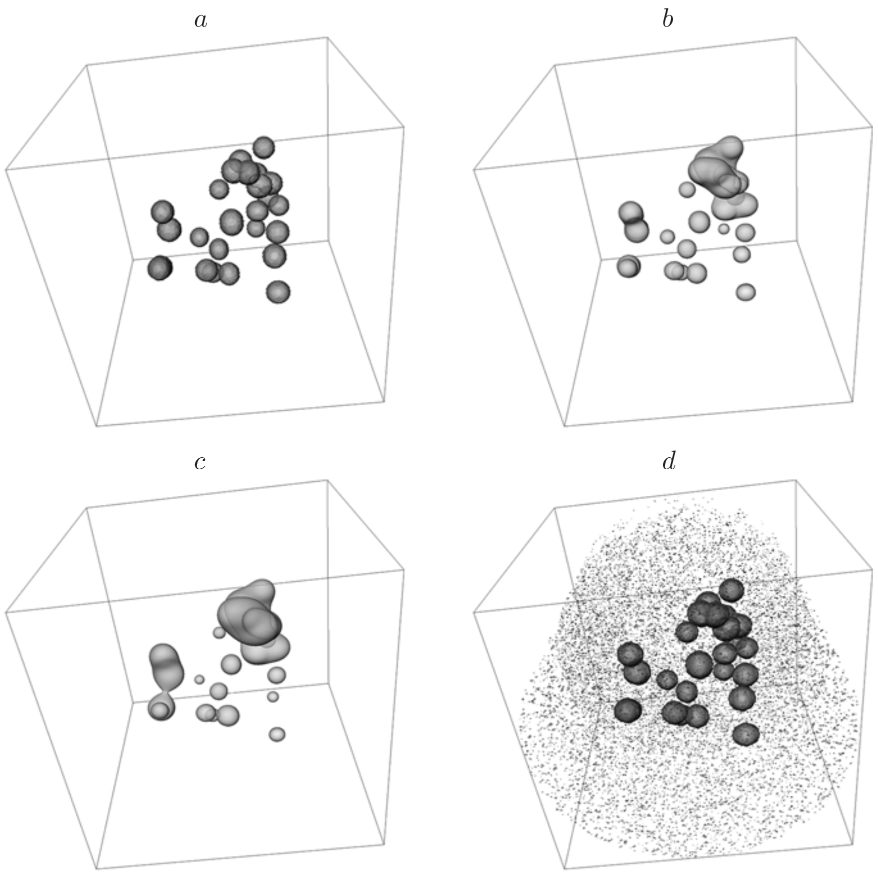

Рис. 3. Результаты вычислительного эксперимента: визуализированная модель (a) и её визуализированные реконструкции (b—d), полученные с использованием различных фильтров

ординаты максимумов и величина смещения с использованием бикубической интерполяции. Затем графические ускорители выполняли необходимые смещения каждой проекции и рассчитывали выровненные проекции $p_0(k;l;\theta_i)$. Процедура повторялась итеративно до получения заданной точности. Обычно приемлемая точность выравнивания достигается за время от 20 до 200 с.

Далее необходимо определить положение оси вращения образца и осуществить соответствующий поворот каждой из проекций $p_0(k;l;\theta_i)$ так, чтобы ось вращения была перпендикулярна в данном случае строкам проекций. Для этого на одном из графических ускорителей GTX 580 вычисляются сумма

$$p_0(k;l) = \sum_{i=1}^{I} p_0(k;l;\theta_i)$$

и её спектр

$$I(u_1;u_2) = |P_0(u_1;u_2)|^2,$$

где $P_0(u_1;u_2)$ — ДПФ суммы $p_0(k;l)$. Затем в полярной системе координат плоскость пространственных частот спектра разбивается на J секторов с одинаковым угловым растром и находится интегральная пространственная характеристика спектра $S(j)$ (j — номер сектора, $j = 1,\ldots,J$) [9, 10]. Отметим, что в данном случае распределение спектральной

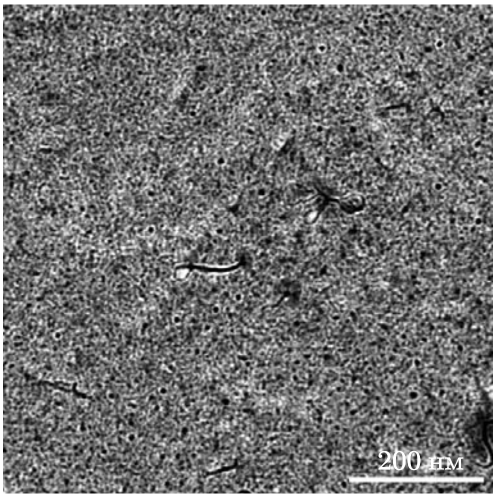

Рис. 4. Электронно-микроскопическое изображение структуры АМС

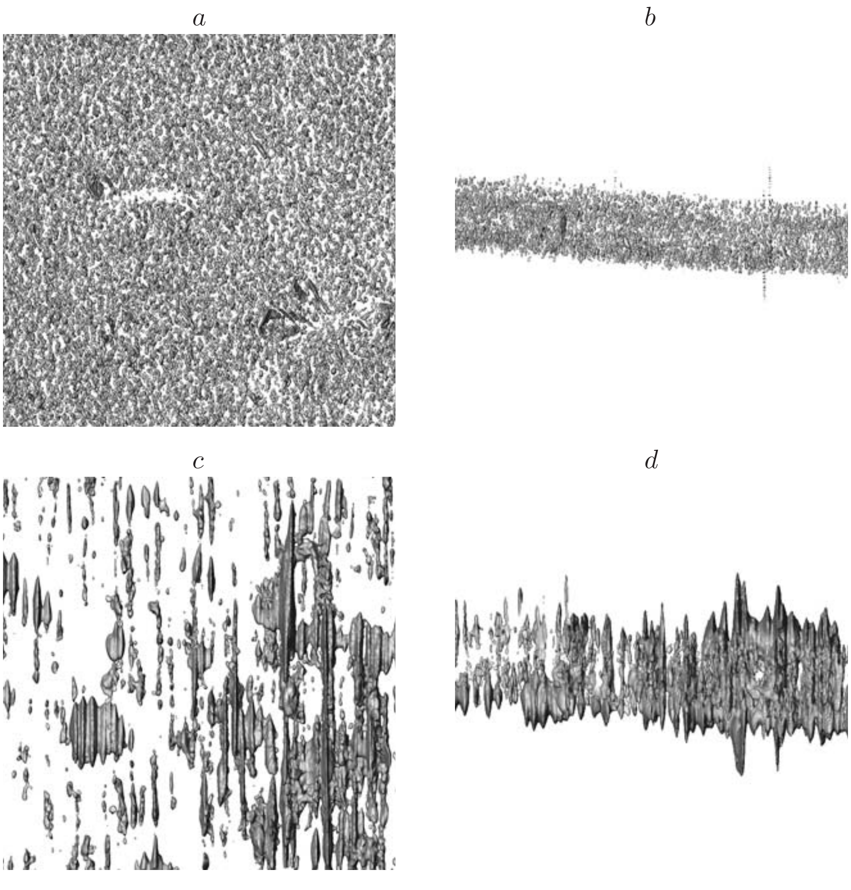

Рис. 5. Визуализированные томограммы: полученные с использованием ρ-фильтра (a, b) и $1/z^2$-фильтра (c, d)

энергии анизотропно [8]. По значению полярного угла (номера сектора), соответствующего глобальному максимуму $S(l)$, определяется угол, на который графические ускорители осуществляют поворот проекций $p_0(k; l; \theta_i)$. Расчёты окончательно выровненных проекций $p(k; l; \theta_i)$ на равномерной сетке размером 512×512 отсчётов выполнялись с использованием бикубической интерполяции. Общее время вычисления для 140 проекций около 800 мс. Проекции $p(k; l; \theta_i)$ передаются в графический ускоритель "Tesla"для дальнейших вычислений по рассмотренным в разд. 1 алгоритмам.

Изображение участка образца АМС, полученное на электронном микроскопе "FEI Titan 80-300", показано на рис. 4. Очевидно, что сплав имеет пористую наноструктуру.

На рис. 5 представлены визуализированные под различными углами зрения томограммы данного образца. Несмотря на высокий уровень шумов по визуализированной томограмме (a) можно оценить распределение пор в пространстве, а по томограмме (b) определить, что образец представляет собой плёнку толщиной около 70 нм. В то же время по визуализированным томограммам (c, d) сложно оценить толщину плёнки и тем более произвести количественную оценку размеров пор в образце.

Заключение. Таким образом, в данной работе показано, что применение графических процессоров в электронной томографии позволяет за приемлемое время (5–10 мин) получать томограммы трёхмерных моделей и реальных пространственных распределений микроструктуры. Это значительно расширяет спектр возможных вычислительных экспериментов при решении задач ЭТ в материаловедении. В частности, в данной работе установлено, что использование при реконструкции $1/z^2$-фильтра, фильтра Шеппа — Логана, косинус-фильтра даёт возможность получить томограммы с приемлемым уровнем шума, но при этом бинаризация с глобальным порогом яркости проекций, необходимая для выделения интересующих исследователя объектов, приводит к их слиянию и размытию границ между ними. Применение же при реконструкции ρ-фильтрации позволяет при сегментации объектов на проекциях визуализировать на томограмме с приемлемым качеством их границы. Это даёт возможность точнее оценивать геометрические характеристики объёмных микроструктур в задачах материаловедения.

Авторы выражают благодарность профессору А. Л. Чувилину (NanoGUNE, Испания), профессору Ute Kaiser и доктору Jens Leschner (Ulm University, Германия) за помощь в проведении томографических экспериментов и плодотворное обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Midgley P. A., Weyland M.** 3D electron microscopy in the physical sciences: The development of Z-contrast and EFTEM tomography // Ultramicroscopy. 2003. **96**, N 3–4. P. 413–431.

2. **Терещенко С. А.** Методы вычислительной томографии. М.: Физматлит, 2004. 320 с.

3. **Литвин О. Н., Першина Ю. И.** Решение трёхмерной и четырёхмерной задач компьютерной томографии с использованием интерфлетации функций // Автометрия. 2011. **47**, № 3. С. 41–48.

4. **Архитектура** параллельных вычислений CUDA на GPGPU. URL: http://www.nvidia.ru/object/what_is_cuda_new_ru.html (дата обращения: 18.07.2011).

5. **Лихачев А. В.** Оценивание $1/z^2$-фильтрации в алгоритмах томографии // Автометрия. 2007. **43**, № 3. С. 57–64.

6. **Рабинер Л., Гоулд Б.** Теория и применение цифровой обработки сигналов. М.: Мир, 1978. 848 с.

7. **Розанов Ю. А.** Случайные процессы. М.: Наука, 1971. 288 с.
8. **Electron** Tomography: Methods for Three-Dimensional Visualization of Structures in the Cell /Ed. J. Frank. N. Y.: Springer, 2006. 455 p.
9. **Грудин Б. Н., Кисленок Е. Г., Плотников В. С., Фищенко В. К.** Анализ, фильтрация и декомпозиция микроскопических изображений на основе ортогональных преобразований // Автометрия. 2007. **43**, № 1. С. 24–36.
10. **Грудин Б. Н., Плотников В. С., Смольянинов Н. А.** Моделирование изображений с заданными фрактальными характеристиками // Автометрия. 2010. **46**, № 3. С. 13–21.

Поступила в редакцию 18 июля 2011 г.