

走査透過電子顕微鏡の実時間収差補正システムの予備的検討

高橋 翔[†] 市川 周一[†]

走査透過電子顕微鏡の分解能は、対物レンズの球面収差のため理論的限界の 1/100 程度に制約されている。生田は、多数の小面積検知器を用いて実時間信号処理を施し、無収差の振幅像と位相像を得る手法を提案した。本研究では、生田の手法を PC クラスタで実装するため、信号処理部のチューニングと性能評価を行い、システムの構成と処理性能を検討する。

Preliminary Study of a Real-time Aberration Correction System for Scanning Transmission Electron Microscopes

SHO TAKAHASHI [†] and SHUICHI ICHIKAWA[†]

The resolution of a scanning transmission electron microscope remains 100 times worse than its theoretical limit owing to the spherical aberration of objective lens. Ikuta proposed a system to generate an aberration-free amplitude image and phase image using multiple small detectors. This study shows the performance optimization results of its signal processing procedure, and discusses the system configuration and the performance of Ikuta's system.

1. はじめに

走査透過電子顕微鏡 (STEM; Scanning Transmission Electron Microscope) は、物質の構造や微小欠陥などを原子レベルで観察するために広く用いられている。STEM の分解能向上は強く望まれているが、磁界型電子レンズでは原理的に凹レンズが実現できないため、対物レンズの球面収差を補正することが困難である。その結果、STEM の分解能は電子の波長 (0.01 ~ 0.04Å) に基づく回折限界よりも低い 1Å 程度に制限されている。

生田¹⁾ は、2 次元フーリエ面上で収差補正バンドパスフィルタを適用することにより、振幅像・位相像の双方に対して無収差結像が可能であることを示した。生田はこの手法の有効性をシミュレーションで検証し²⁾、システムの構築方法についても提案した²⁾³⁾。本研究では、生田の収差補正システムを PC クラスタで実現する方法について検討し、収差補正時間を見積もる。

2. システム構成

図 1 は、生田のシステムの概念図である。生田のシステムでは多数の小面積検知器からなる検知器配列を用い、各検知器の出力 (2 次元画像) に信号処理を施して球面収差を補正する。図 2 は、図 1 の信号処理部以

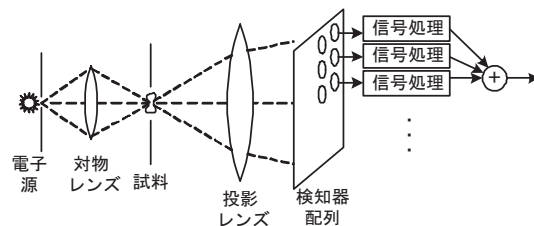


図 1 システム概念図²⁾³⁾

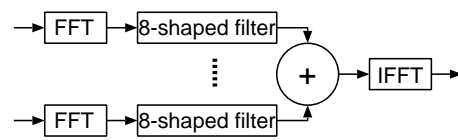


図 2 信号処理部の詳細

降を詳しく示したものである。まず各検知器の画像に 2 次元複素 FFT をかけ、得られたフーリエ像に収差補正フィルタ (8 の字フィルタ) を適用して球面収差成分を除去する。さらにフィルタ出力の総和をとり、逆 FFT をかけて無収差像を得る。

STEM を含む顕微鏡観察では、一般にステージ上で試料を移動させながら観察場所を探すため、実時間での画像表示が強く望まれる。従って、上に述べた収差補正処理もビデオレートで実行する必要がある。生田²⁾ は、各検知器の信号処理が並列処理可能であることを指摘し、並列信号処理によって実時間収差補正が可能であると予測した。しかし具体的な検討は行っており、実システムの処理時間は明らかになってい

[†] 豊橋技術科学大学 知識情報工学系
Dept. Knowledge-based Information Engineering, Toyohashi University of Technology

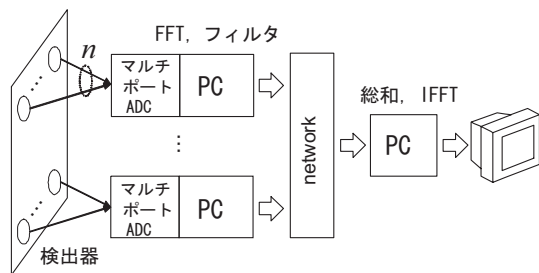


図 3 PC クラスタによる実現例

ない。

本研究の目的は、生田の収差補正システムを PC クラスタで実現する方法と、システムの処理性能を検査することである。図 3 に、PC クラスタを用いたシステム実現例を示す。要素プロセッサには、Pentium4 2.4GHz、主記憶 512MB、RedHatLinux9、gcc 3.2.2-5 の PC を仮定する。画像解像度は、市販電子顕微鏡と同程度の 1000×1000 とする。各画素の情報量は 12~16 ビット (AD 変換の精度) であるから、演算精度は単精度浮動小数点とする。

検知器数は出力画像の品質に影響するため、 16×16 の 256 個とする。しかし電子顕微鏡 1 台に 256 台の PC を接続することはコスト面で無理があるので、マルチポート ADC (AD 変換) ボードを利用して、各 PC に複数の検知器を接続する。図 3 では、1 台の PC に n 個の検知器を接続し、 $\lceil 256/n \rceil$ 台の PC で並列信号処理 (FFT と 8 の字フィルタ) を行っている。処理結果は 1 台の PC に送り、総和と逆 FFT を行って画面に表示する。総和・逆 FFT・画面表示を行う PC は、並列信号処理用 PC と別に用意すれば、フレーム単位でパイプライン処理することが可能である。

3. 性能予測

図 3 のシステムにおいて、信号処理時間 T は以下の式で見積もられる。(ここではパイプライン化は考慮せず、信号キャプチャ時間と画像出力時間を除外する。)

$$T = T_F(n) + nT_8 + T_\Sigma + T_I \quad (1)$$

$T_F(n)$ は n 画像の FFT 処理時間、 T_8 は 1 画像のフィルタ処理時間、 T_Σ は総和を求める時間、 T_I は画像 1 枚を逆 FFT で処理する時間である。FFT と逆 FFT の時間は (ほぼ) 同じなので、 $T_I = T_F(1)$ と近似することができる。本研究では、総和の時間は無視できると判断し、以下、 $T_\Sigma \approx 0$ と扱う。

FFT ライブラリとして FFTW3 を使用し、各種の最適化を施して実行時間を測定した⁴⁾。FTW3 の `fftw_plan_many_dft()` 関数を利用して、1 回の関数呼び出しで n 枚の画像を連続して FFT し、測定した処理時間から最小二乗法で $T_F(n)$ の近似式を求めた。

$$T_F(n) = 39.3n + 40.9 \quad (\text{ms}) \quad (2)$$

同様に、フィルタ処理時間 T_8 についても各種の最適化を施して実行時間を測定した結果、 $T_8 = 30$ (ms) で実現できることがわかった⁴⁾。

以上の結果から、 T の近似式は以下ようになる。

$$T \approx 69n + 121 \quad (\text{ms}) \quad (3)$$

64 プロセッサ ($n = 4$) で $T = 0.4$ 秒、16 プロセッサ ($n = 16$) で $T = 1.2$ 秒となる。十分に速くはないが、実用可能な処理時間と思われる。

動作確認のため、生田の収差補正シミュレーションプログラム `stemmda2.f2)` を C 言語に移植し、著者ら⁴⁾ が検討した性能改善手法を実装した。出力画像を生田の結果と比較して、問題がないことを確認した。このプログラムの実行時間内訳は、FFT と逆 FFT が 62%、8 の字フィルタが 31%、その他の処理が 7% であった。このプログラムは単一プロセッサで動作する逐次処理プログラムであるが、並列処理部分が実行時間の 9 割以上を占めるので、並列化の効果は大きいと予測される。

4. おわりに

本研究では信号処理の最適化を行い、その結果から PC クラスタでの実行時間を予測した。PC クラスタ上への実装と評価は、今後早急に進める予定である。また、今回の結果では収差補正時間は 1 秒前後であり、実時間処理 (毎秒 30 フレーム) に遠く及ばない。更なる性能向上は今後の重要な課題である。

プロセッサが高速化すれば処理時間 T は短縮されるが、その場合でも入力時間が問題になる。例えば $n = 16$ のとき、現状の信号処理時間で 16 検知器の画像入力 (各 2MB) を転送するには、 $16 \times 2/1.2 = 27$ MB/s の転送速度が必要となる。これは PCI バス (32 bit, 33 MHz) の帯域で足りる。しかし毎秒 30 フレームを転送しようとするれば、256 検知器で合計 15 GB/s、16 検知器でも 960 MB/s の転送速度が必要である。入出力転送幅の観点から見ても、複数 PC による分散入出力が必要と思われる。

参考文献

- Ikuta, T.: An Aberration-free Imaging Technique Based on Focal Depth Extension, *Journal of Electron Microscopy*, Vol. 47, No. 5, pp. 427-432 (1998).
- 生田孝: 画像処理による収差光学系収差補正機構をもつ透過型走査光学顕微鏡の試作, 科学研究費補助金 基盤研究 (B)(2)11555021 研究成果報告書 (2001).
- 志水隆一, 生田孝: 走査型顕微鏡装置, 特許 3035612 (2000).
- 高橋翔, 市川周一: 走査透過電子顕微鏡の実時間収差補正システムの性能予測, 情報研報 2004-HPC-97, pp. 163-168 (2004).