

Reconstruction tomographique par méthode EST

F. MAINGOT DE LA GRASSIÈRE

Mars 2022

1. La restitution d'informations de relief pour les images obtenues au MET (Microscope Électronique à Transmission) s'effectue par procédés tomographiques. Ces procédés atteignent rapidement des limitations liées aux dispositifs d'acquisition : nature polaire des mesures, contraintes sur le champ d'observation (discrétisation de l'angle de vue, zone aveugle). Les traitements classiques d'interpolation et de rétroprojection sont alors insuffisants pour atteindre la résolution atomique.
2. Un moyen de dépasser la limite de ces traitements consiste à travailler non plus dans l'espace direct, mais dans l'espace de Fourier, en utilisant le théorème de la coupe centrale ; dès lors, si l'on choisit judicieusement les données tomographiques, il devient possible de restituer les informations de relief avec la précision désirée.
3. Cette alternative a été explorée avec succès au moyen de la méthode EST (Equally Sloped Tomography) [1]. Son principe repose sur un traitement itératif conditionné par les contraintes physiques de l'objet à reconstruire ; l'acquisition des données tomographiques s'effectue le long de lignes dont la variation de pente reste constante, les données s'inscrivant ainsi sur une grille pseudopolaire.
4. L'intérêt de la grille pseudopolaire réside dans la rigueur mathématique de sa définition et de ses propriétés, ainsi que des algorithmes qui lui sont associés. En effet, on peut montrer [2][3] :
 - qu'une telle grille permet la définition d'une transformée de Fourier 2D dite *transformée de Fourier pseudopolaire* (ppFT),
 - que cette ppFT est *compatible avec une version discrétisée du théorème de la coupe centrale*, et peut donc être utilisée avec les données d'acquisition présentes sur la grille pseudopolaire,
 - que cette ppFT est mathématiquement inversible et qu' *à la grille pseudopolaire dans l'espace de Fourier correspond une grille cartésienne dans l'espace direct* : on peut donc revenir à l'information de relief des données tomographiques sans faire intervenir d'interpolation génératrice d'artefacts,
 - que la ppFT et son inverse ppFT^{-1} sont susceptibles d'être *calculées par des algorithmes stables et rapides* ppFFT et ppFFT^{-1} , qui réduisent la complexité initiale $o(N^3)$ en $o(N^2 \log N)$, à l'instar de la FFT classique sur une grille cartésienne.
5. La mise en oeuvre de la méthode EST nécessite le calcul de ppFFT et ppFFT^{-1} . ppFFT ne pose pas de difficultés particulières : on peut la définir au moyen de la transformée de Fourier partielle (frFFT). frFFT s'écrit sous la forme d'un

produit de convolution que l'on rattache au calcul d'une FFT par le théorème de convolution [4], d'où l'algorithme rapide de la ppFFT.

ppFFT⁻¹ n'est pas trivial ; cet algorithme doit être décomposé en deux phases :

- phase 1 : rééchantillonnage des données de la grille pseudopolaire sur une grille cartésienne dans l'espace de Fourier,
- phase 2 : récupération de l'image cherchée à partir de la grille cartésienne de la phase 1.

6. La phase 1 de ppFFT⁻¹ consiste à traiter la grille pseudopolaire selon un parcours concentrique de ses éléments ("onion-peeling") pour rééchantillonnages successifs de ses lignes et colonnes [2]. Ces rééchantillonnages s'effectuent en utilisant le théorème de Dutt : on interprète les séries de Fourier comme des polynômes trigonométriques, les valeurs des polynômes sont reformulées exactement pour une distribution quelconque de points à partir des formes de Lagrange, mais *sans* effectuer d'interpolation [5].

7. Bien que le théorème précédent nécessite un calcul en $o(N^3)$, on peut réduire sa complexité à $o(N^2 \log N)$ en y intégrant un procédé de calcul inspiré de la méthode des multipôles rapides (FMM) [7]. Dans cette FMM spécialement adaptée aux configurations 1D et aux calculs de fonctions circulaires [6], les séries de Taylor sont remplacées par les séries de Chebyshev, et les calculs des coefficients d'interaction utilisent les résultats de la théorie des approximations de Chebyshev pour la fonction $1/\tan x$ [5].

La mise en œuvre de cette FMM spécifique (TFMM) représente un travail conséquent, mais indispensable pour garantir la précision, la stabilité et la rapidité des analyses tomographiques par la méthode EST.

8. La phase 2 de l'algorithme ppFFT⁻¹ est beaucoup moins complexe que la précédente. Son principe est de formuler le traitement sur la grille cartésienne sous forme d'une combinaison d'opérateurs calculables par complexité $o(N^2 \log N)$. Ces opérateurs sont des matrices de Toeplitz, dont la structure permet d'effectuer les calculs sur la grille cartésienne par applications de FFT classiques.

9. Le traitement itératif, actuellement à l'étude, utilise les algorithmes ppFFT et ppFFT⁻¹ pour passer alternativement de l'espace direct à l'espace de Fourier ; les corrections sont effectuées en tenant compte des données mesurées et des contraintes physiques sur l'image de l'objet à reconstruire.

Références

- [1] MIAO J., FÖRSTER F., LEVI O. "*Equally Slopped Tomography with Oversampling Reconstruction*" , Phys. Rev. B, 72, 052103 (2005).
- [2] AVERBUCH A., COIFMAN R.R., DONOHO D.L., ISRAELI M., SHKOLNISKY Y., "*A Framework for Discrete Integral Transformations I - The Pseudopolar Fourier Transform*", SIAM J. Sci. Comput., 30-2, pp. 764-784 (2008).
- [3] AVERBUCH A., COIFMAN R.R., DONOHO D.L., ISRAELI M., SHKOLNISKY Y., SEDELNIKOV I., "*A Framework for Discrete Integral Transformations II - The 2D Discrete Radon Transform*", SIAM J. Sci. Comput., 30-2, pp. 785-803 (2008).

- [4] BAILEY D.H., SWARTZRAUBER P.N., "*The Fractional Fourier Transform and Applications*", SIAM Rev., 33-3, pp. 389-404 (1991).
- [5] DUTT A., ROKHLIN V., "*Fast Fourier Transform for Nonequispaced Data II*", Appl. Comp. Harmon. Anal., 2, pp. 85-100 (1995).
- [6] GREENGARD L., ROKHLIN V., "*A Fast Algorithm for particle Simulations*", J. Comp. Phys., 73, pp. 325-348 (1987).
- [7] DUTT A., GU M., ROKHLIN V., "*Fast Algorithms for Polynomial Interpolation, Integration and Differentiation*", Research Report 977, Dept of Computer Science, Yale University (1993).