



HAL
open science

Déconvolution et séparation d'images hyperspectrales en microscopie

Simon Henrot

► **To cite this version:**

Simon Henrot. Déconvolution et séparation d'images hyperspectrales en microscopie. Traitement du signal et de l'image [eess.SP]. Université de Lorraine, 2013. Français. NNT: . tel-00931579

HAL Id: tel-00931579

<https://theses.hal.science/tel-00931579v1>

Submitted on 15 Jan 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Déconvolution et séparation d'images hyperspectrales en microscopie

THÈSE

soutenue le 27 Novembre 2013

pour l'obtention du

Doctorat de l'Université de Lorraine

(mention automatique, traitement du signal et des images et génie informatique)

par

Simon Henrot

Composition du jury

Rapporteurs : J.-F. Giovannelli Professeur à l'Université Bordeaux 1
C. Richard Professeur à l'Université de Nice Sophia-Antipolis

Examineurs : D. Brie (dir.) Professeur à l'Université de Lorraine
N. Dobigeon Maître de Conférences à l'INP Toulouse
C. Jutten Professeur à l'Université Joseph Fourier, Grenoble
C. Mustin Directeur de Recherche CNRS
C. Soussen (co-dir.) Maître de Conférences à l'Université de Lorraine

Invité : S. Moussaoui Maître de Conférences à l'École Centrale de Nantes

Mis en page avec la classe thesul.

Remerciements

Tout d'abord, mes remerciements vont à David Brie, Professeur à l'Université de Lorraine et Charles Soussen, Maître de Conférences à l'Université de Lorraine pour leur excellent encadrement tout au long de ma thèse, leurs encouragements et leur enthousiasme. Je me souviendrai avec plaisir aussi bien de nos échanges scientifiques que de nos discussions plus informelles ("Alors, ça converge ??"). Merci également à Christian Mustin, Directeur de Recherche CNRS, pour avoir co-encadré ma thèse et m'avoir fait découvrir le monde de la microscopie avec patience lors des longues acquisitions d'images confocales.

Je tiens à exprimer ma gratitude aux membres du jury qui m'ont fait l'honneur de participer à l'examen de ce travail.

Merci à Christian Jutten, Professeur à l'Université Joseph Fourier de Grenoble, pour avoir accepté de présider mon jury. A bientôt à Grenoble!

Je remercie Jean-François Giovannelli, Professeur à l'Université Bordeaux 1 et Cédric Richard, Professeur à l'Université de Nice Sophia-Antipolis pour avoir accepté de rapporter mon manuscrit.

Merci à Nicolas Dobigeon, Maître de Conférences à l'INP Toulouse pour ses remarques avisées sur le manuscrit.

Je tiens à remercier Saïd Moussaoui, Maître de Conférences à l'Ecole Centrale de Nantes pour sa relecture du manuscrit, ainsi que son accueil lors de mon séjour à Nantes et ses conseils éclairés en matière d'optimisation.

Merci à Manuel Dossot pour sa gentillesse, et les échanges fructueux que nous avons eu sur la spectroscopie Raman.

Merci à Praveen Pankajakshan qui m'a beaucoup appris sur l'optique et la microscopie.

Je remercie également les doctorants et membres permanents du laboratoire ainsi que l'équipe enseignante du département Réseaux et Télécommunications de l'IUT Nancy-Brabois pour avoir contribué au bon déroulement de ma thèse, tout particulièrement Sebastian et Brice.

Merci à Christelle, Corinne et Sabine pour avoir géré mon dossier administratif avec beaucoup de disponibilité.

Merci évidemment aux Bibi's qui m'ont accompagné au cours de mon séjour au CRAN : Audrey, Hadi, JB, Lila, Leila, Mag, Marie, Mel, Sam, Vinz ... pour toutes les pauses café, déjeuners, les billards, les chouki, les phi ("Splaaaash!!!"), les soirées et j'en passe!

Enfin, un grand merci à ma famille pour m'avoir soutenu pendant ces années de thèse et tout particulièrement à Marine.

Table des matières

Table des figures	vii
Abréviations	ix
Notations	xi
Liste des algorithmes	xiii
Introduction générale	1
1 Contexte de l'étude	1
2 Contributions de la thèse	3
3 Liste des publications	5
<hr/>	
Partie I Modèle direct en microscopie hyperspectrale	7
Chapitre 1 Modalités d'imagerie spectrale	9
1.1 Fluorescence	9
1.2 Diffusion Raman	10
1.3 Modalités de microscopie	10
Chapitre 2 Formation de l'image	13
2.1 Caractérisation de l'objectif du microscope	13
2.1.1 Quelques notions d'optique physique	13
2.1.2 Approximation de Debye	14
2.1.3 Approximation de Stokseth	15
2.2 Modèle d'observation	16
2.2.1 Réponse impulsionnelle optique	16
2.2.2 Modèle d'observation 3D	17
2.2.3 Modèle d'observation 2D	18

2.3	Approximations gaussiennes des réponses impulsionnelles	18
Chapitre 3 Acquisition de l'image		21
3.1	Détection de l'image	21
3.2	Représentation discrète des images	22
3.2.1	Acquisition spectrale et représentation tensorielle	22
3.2.2	Convolution discrète	23
3.2.3	Matrice d'observation spectrale	24
3.3	Modèle d'observation global	24
Conclusion		25
<hr/>		
Partie II Déconvolution d'images hyperspectrales		27
Chapitre 4 Introduction aux problèmes inverses		29
4.1	Moindres carrés	29
4.2	Régularisation	30
4.2.1	Troncature des valeurs singulières	30
4.2.2	Minimisation d'un critère composite	31
4.3	Régularisation de Tikhonov	32
Chapitre 5 Déconvolution hyperspectrale rapide		35
5.1	Formulation du problème	35
5.1.1	Régularisation spatiale	36
5.1.2	Régularisation spectrale	36
5.2	Résolution dans le domaine de Fourier	37
5.2.1	Réécriture du problème	37
5.2.2	Résolution explicite	38
5.3	Algorithme proposé	38
5.4	Résultats expérimentaux	39
5.4.1	Sélection des hyperparamètres	39
5.4.2	Performances de la méthode	39
Chapitre 6 Restauration sous contrainte de positivité		43
6.1	Introduction	43
6.2	Problème contraint	44
6.2.1	Pénalité quadratique	44

6.2.2	Lagrangien augmenté	45
6.3	Résultats expérimentaux	48
6.3.1	Données synthétiques $2D + \lambda$	48
6.3.2	Simulation d'images de microscopie en fluorescence $3D + \lambda$	51
Chapitre 7 Restauration avec préservation des contours		53
7.1	Introduction	53
7.1.1	Régularisation par la norme L_1	53
7.1.2	Régularisation de Huber	54
7.1.3	Formulation du problème	55
7.2	Optimisation	55
7.2.1	Positivité	55
7.2.2	Méthode semi-quadratique	56
7.2.3	Méthode proximale / ADMM	57
7.3	Résultats expérimentaux	59
7.3.1	Préservation des contours	59
7.3.2	Éléments de convergence empirique de l'algorithme	60
Conclusion		63

Partie III Déconvolution et séparation **65**

Chapitre 8 De l'intérêt de la déconvolution pour la séparation de sources		67
8.1	Introduction	67
8.2	Approche géométrique de la séparation de sources	69
8.2.1	Modèle linéaire de mélange	69
8.2.2	Réduction de dimension et projection affine	70
8.2.3	Simplexe de volume minimal	71
8.3	Effet du système d'observation	74
8.3.1	Modèle couplé d'observation et de mélange	74
8.3.2	Trajectoire des pixels	74
8.3.3	Résultats expérimentaux	75
8.4	Cas d'une RIO spectralement invariante	77
8.4.1	Modèle bilinéaire	78
8.4.2	Contraction du simplexe de volume minimal	79
8.4.3	Résultats expérimentaux	80

8.5	Résultats expérimentaux sur des données réelles	82
8.6	Conclusion	83
<hr/>		
Conclusion générale		91
1	Bilan	91
2	Perspectives	91
2.1	Déconvolution d'images hyperspectrales	91
2.2	Sélection d'hyperparamètres	92
2.3	Domaines applicatifs	92
2.4	Algorithme de déconvolution et séparation conjointe	93
<hr/>		
Annexes		95
Annexe A Convolution discrète		95
A.1	Cas monodimensionnel	95
A.2	Cas bidimensionnel	97
Annexe B Normes vectorielles et matricielles		99
B.1	Normes vectorielles	99
B.2	Normes matricielles	99
Annexe C Approches probabilistes de l'estimation		101
C.1	Approche fréquentiste	101
C.2	Inférence bayésienne	102
C.2.1	Lien entre régularisation et approche bayésienne	102
Bibliographie		103
Résumé		111
Abstract		111

Table des figures

1	Image spectrale acquise à quatre longueurs d'ondes.	1
2	Illustration d'un problème direct et d'un problème inverse.	2
3	Illustration du problème de séparation de sources.	2
4	Biocapteurs bactériens.	3
1.1	Illustration du phénomène de fluorescence.	9
1.2	Illustration du phénomène de diffusion Raman.	10
1.3	Schéma de principe d'un microscope optique.	11
2.1	Illustration du phénomène de diffraction.	14
2.2	Focalisation d'un faisceau de lumière par un objectif.	15
2.3	Exemples de RIOs calculées numériquement.	17
4.1	Illustration du domaine spatial de Fourier.	33
5.1	Images synthétiques de biocapteurs bactériens.	40
6.1	Performance des méthodes de pénalité quadratique et lagrangien augmenté.	49
6.2	Données spectrales synthétiques : images originales, dégradées et restaurées avec et sans contrainte de positivité.	50
6.3	Images hyperspectrales synthétiques représentant un jeu de données acquis en microscopie en fluorescence.	52
7.1	Illustration géométrique des régularisations par les normes L_1 et L_2	54
7.2	Approximation quadratique majorante de Geman et Yang	56
7.3	Images de biocapteurs bactériens	60
7.4	Performance des méthodes semi-quadratique et proximale.	61
8.1	Illustration de la taille de la RIO relative à un pixel.	68
8.2	Illustration en dimension $P = 3$ du cône convexe engendré par les sources.	71
8.3	Exemple en deux dimensions de triangles contenant les données pour $P = 3$ sources.	72
8.4	Deux triangles englobant les données pour $P = 3$ sources.	73
8.5	Exemples de trajectoires de pixels.	75
8.6	Sources sélectionnées.	76
8.7	Exemples de cartes d'abondance générées comme des mélanges de fonctions gaussiennes spatiales 2D de moyenne et variance aléatoires.	76
8.8	Simplexe contenant les données originales, obtenu par analyse par composantes principales et projection orthogonale.	77
8.9	Illustration de la contraction du nuage de points observé.	79

8.10	Illustration de l'imbrication des enveloppes convexes d'une bande spectrale à l'autre (cas d'une RIO spectralement variante).	81
8.11	Performance des méthodes de démixage en fonction de la largeur σ de la RIO.	84
8.12	Simplexes contenant les données observées et restaurées par SISAL pour trois valeurs de σ et un rapport signal-à-bruit de 25dB.	85
8.13	Simplexes and estimated abundances from an image blurred by a small PSF.	86
8.14	Simplexes and estimated abundances from an image blurred by a large PSF.	87
8.15	Résultats de démixage obtenus avec VCA et FCLS sur les données réelles de microscopie Raman.	88
8.16	Résultats de démixage obtenus avec NMF-VOL sur les données réelles de microscopie Raman.	89

Abréviations

1D	Unidimensionnel
2D	Bidimensionnel
3D	Tridimensionnel
4D	Quadridimensionnel
ADMM	Alternated Direction Method of Multipliers [Boyd et al., 2011]
CBC	Circulant-Bloc-Circulant
CCD	Charged Coupled Device
CLSM	Confocal Laser Scanning Microscopy
EQM	Erreur Quadratique Moyenne
FFT	Fast Fourier Transform
FCLS	Fully Constrained Least Squares [Heinz et Chang, 2001]
FTO	Fonction de Transfert Optique
GFP	Green Fluorescent Protein
MSE	Mean Square Error
MVS	Minimum-Volume Simplex
MVES	Minimum-Volume Enclosing Simplex [Chan et al., 2009]
NA	Ouverture Numérique
PM	Tube Photo-Multiplicateur
PSF	Point-Spread Function
RIO	Réponse Impulsionnelle Optique
SISAL	Simplex Identification via Variable Splitting and Augmented Lagrangian [Bioucas-Dias, 2009]
SNR	Rapport Signal à Bruit
SQ	Semi-Quadratique [Geman et Reynolds, 1992]
SVD	Décomposition en Valeurs Singulières
TFD	Transformée de Fourier Discrète
iTFD	Transformée de Fourier Discrète Inverse
USGS	United States Geological Survey
VCA	Vertex Component Analysis [Nascimento et Bioucas-Dias, 2005]
WFM	Widefield Microscopy

Notations

Notations générales

\mathbb{R}	corps des réels.
s	les scalaires sont notés par des minuscules.
$\lceil s \rceil$	partie entière par excès de s .
\mathbf{v}	les vecteurs sont notés par des minuscules en gras.
\mathbf{v}^T	transposé du vecteur \mathbf{v} .
$\hat{\mathbf{v}}$	TFD-1D du vecteur \mathbf{v} .
$\mathbf{v}_1 \underset{1D}{*} \mathbf{v}_2$	convolution 1D des vecteurs \mathbf{v}_1 et \mathbf{v}_2 .
\mathbf{M}	les matrices sont notées par des majuscules en gras.
\mathbf{m}^i	i -ème vecteur ligne de la matrice \mathbf{M} .
\mathbf{m}_j	j -ème vecteur colonne de la matrice \mathbf{M} .
\mathbf{M}^T	transposée de la matrice \mathbf{M} .
\mathbf{M}^{-1}	inverse de la matrice \mathbf{M} .
\mathbf{M}^\dagger	inverse généralisée de la matrice \mathbf{M} .
\mathbf{M}^*	conjuguée de la matrice \mathbf{M} .
$\hat{\mathbf{M}}$	TFD-2D de la matrice \mathbf{M} .
$\kappa(\mathbf{M})$	nombre de conditionnement de la matrice \mathbf{M} .
\mathbf{I}_n	matrice identité de dimension $(n \times n)$.
$\mathbf{M}_1 \underset{2D}{*} \mathbf{M}_2$	convolution 2D des matrices \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 .
$\mathbf{M}_1 \cdot \mathbf{M}_2$	produit terme-à-terme des matrices \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 .
$\mathbf{M}_1 / \mathbf{M}_2$	division terme-à-terme des matrices \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 .
$s \sim p$	s est distribué selon la loi de probabilité p .
$\mathcal{N}(m, \sigma^2)$	loi normale de moyenne m et de variance σ^2 .
$\mathcal{P}(\Lambda)$	loi de Poisson d'intensité Λ .
L_α	norme α .
$\ \mathbf{v}\ _1$	norme L_1 du vecteur \mathbf{v} .
$\ \mathbf{v}\ _2$	norme euclidienne du vecteur \mathbf{v} .
$\ \mathbf{M}\ _F$	norme de Frobenius de la matrice \mathbf{M} .
L	nombre de bandes spectrales de l'image.
N	nombre de pixels de l'image.

Microscopie

E	énergie d'un photon.
c	vitesse de la lumière dans le vide.
\hbar	constante de Planck.
λ	longueur d'onde.
k	nombre d'onde.
λ_x	longueur d'onde d'excitation.
k_x	nombre d'onde d'excitation.
λ_m	longueur d'onde d'émission.
k_m	nombre d'onde d'émission.
J_n	fonction de Bessel de n -ième espèce.
γ	inverse du facteur de conversion des photons.
M	grandissement du microscope.
r	rayon du sténopé.
α	demi-angle maximum de convergence par l'objectif.
h_A	réponse impulsionnelle en amplitude.
h	réponse impulsionnelle en intensité.
(x, y, z)	coordonnées dans l'espace image.
(x', y', z')	coordonnées dans l'espace objet.

Modèle d'observation et restauration

μ_s	paramètre de régularisation spatiale.
μ_λ	paramètre de régularisation spectrale.
\mathbf{x}	image hyperspectrale inconnue de taille $NL \times 1$.
\mathbf{x}_ℓ	ℓ -ième bande de l'image hyperspectrale inconnue de taille $N \times 1$.
\mathbf{y}	image hyperspectrale observée de taille $NL \times 1$.
\mathbf{y}_ℓ	ℓ -ième bande de l'image hyperspectrale observée de taille $N \times 1$.

Modèle conjoint de mélange et d'observation

\mathbf{X}	matrice de données de taille $L \times N$.
\mathbf{x}^ℓ	ℓ -ième ligne de \mathbf{X} ; ℓ -ième bande de l'image hyperspectrale.
\mathbf{x}_n	n -ième colonne de \mathbf{X} ; n -ième pixel de l'image hyperspectrale.
P	nombre de sources pures de l'image.
\mathbf{S}	matrice des sources pures de taille $L \times P$.
\mathbf{s}_p	p -ième colonne de \mathbf{S} ; p -ième source pure.
\mathbf{A}	matrice des coefficients d'abondance de taille $P \times N$.
\mathbf{a}_n	n -ième colonne de \mathbf{S} ; coefficients d'abondance du n -ième pixel.

Liste des algorithmes

1	Restauration d'images spectrales avec régularisation spatiale de Tikhonov.	32
2	Restauration d'images spectrales avec régularisations spatiale et spectrale de Tikhonov.	39
3	Restauration d'images spectrales avec régularisations spatiale et spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par pénalité quadratique.	46
4	Restauration d'images spectrales avec régularisations spatiale et spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par lagrangien augmenté.	47
5	Restauration d'images spectrales avec régularisation spatiale de Huber par méthode semi-quadratique, régularisation spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par pénalité quadratique.	58
6	Restauration d'images spectrales avec régularisation spatiale de Huber par méthode proximale, régularisation spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par pénalité quadratique.	62

Introduction générale

1 Contexte de l'étude

Cette thèse a été réalisée au Centre de Recherche en Automatique de Nancy (CRAN, UMR 7039) au sein du projet « Signaux Multidimensionnels » (SiMul) mené dans le département « Santé-Biologie-Signal » (SBS). Elle a pour objectif le développement d'outils originaux de traitement d'images hyperspectrales acquises en microscopie confocale. Dans ce cadre, elle fait suite à plusieurs thèses réalisées au CRAN apportant des développements méthodologiques à la résolution de problèmes inverses en spectroscopie [Moussaoui, 2005, Mazet, 2005, Sahnoun, 2012, Caland, 2013].

D'un point de vue applicatif, le travail présenté s'inscrit dans le projet ANR HÆSPRI (« *Hyperspectral Analysis and Enhanced Surface Probing of Representative bacteria-mineral Interaction* », 2009-2013), porté par Christian Mustin, directeur de recherche CNRS au Laboratoire des Interactions Micro-organismes-Minéraux-Matière Organique dans les Sols (LIMOS, UMR CNRS 7137, Nancy ; nouvellement LIEC, UMR 7360). L'objectif est d'étudier les interactions au sein de systèmes bactéries - minéraux par le biais d'images spectrales acquises avec différentes modalités optiques.

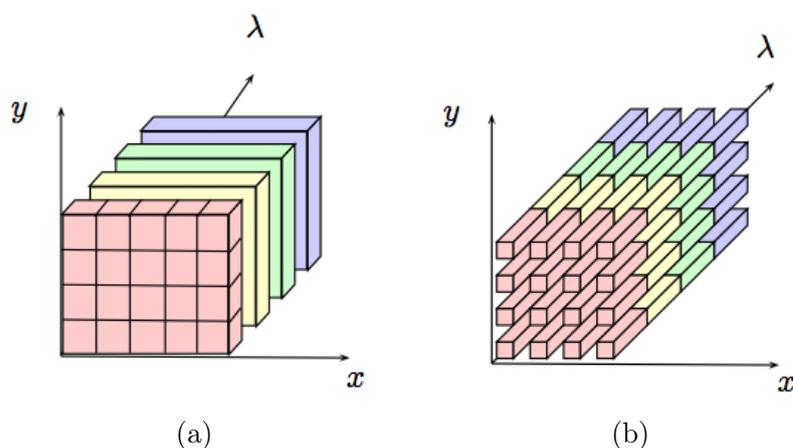


FIGURE 1 – Image spectrale acquise à quatre longueurs d'ondes (couleurs), produisant un cube de données variant selon les dimensions (x, y, λ) . (a) Acquisition plan par plan en microscopie. (b) Acquisition pixel par pixel en spectroscopie.

L'*imagerie spectrale* consiste à représenter sélectivement une scène spatiale à plusieurs longueurs d'onde, comme illustré en figure 1. Physiquement, une telle image peut être obtenue comme une pile d'images bidimensionnelles (2D) par un microscope équipé de filtres optiques (a) ou comme une collection de spectres unidimensionnels (1D) acquise par un spectromètre (b), les

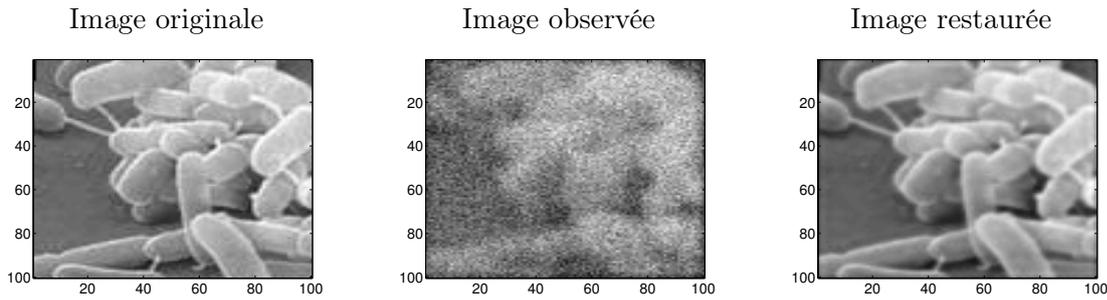


FIGURE 2 – Illustration d’un problème direct (calculer l’image observée à partir de l’image originale) et d’un problème inverse (calculer l’image restaurée à partir de l’image observée).

deux techniques aboutissant au même cube de données. En fonction de la résolution spectrale obtenue, on distingue images *multispectrales*, acquises à quelques longueurs d’onde (*e.g.* imagerie couleur), et images *hyperspectrales* collectant suffisamment de bandes spectrales finement résolues pour reconstituer le spectre des pixels : c’est le cas des données réelles traitées dans cette thèse. La diversité spatiale et spectrale des données offre la possibilité d’extraire de nouvelles informations de l’image, au prix de temps d’acquisition et de calculs plus élevés.

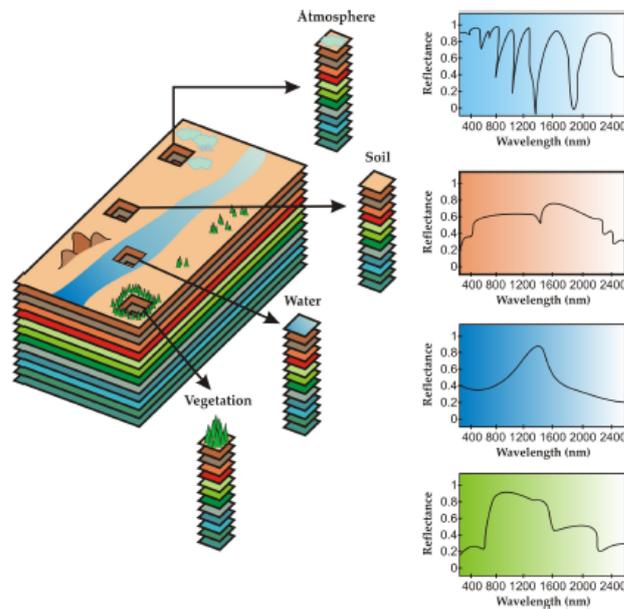


FIGURE 3 – Illustration du problème de séparation de sources : une image obtenue par télédétection est séparée en quatre constituants, correspondant à l’atmosphère, le sol, l’eau et la végétation. Source : [Shaw et Burke, 2003].

L’analyse de données hyperspectrales est bien souvent un problème difficile. Lorsqu’elles sont acquises avec un pas (x, y) suffisamment fin pour se placer dans un cas de « super-résolution » (*i.e.*, résolution supérieure à celle intrinsèque de l’instrument de mesure), les images présentent des dégradations (flou ou *convolution*). La *déconvolution* des images observées consiste à retirer le flou pour restaurer des images nettes à chacune des longueurs d’onde [Idier et Blanc-Féraud, 2001]. Ce processus de restauration est qualifié de *problème inverse*, par opposition au *problème*

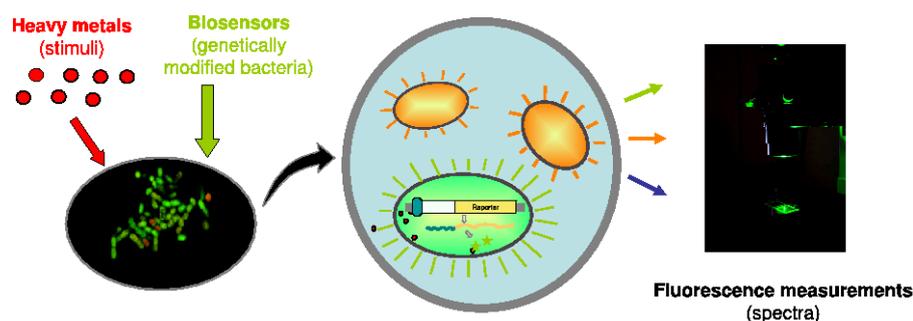


FIGURE 4 – Biocapteurs bactériens.

direct consistant à modéliser la dégradation déterministe et / ou aléatoire de l'image (voir figure 2).

La notion de problème inverse en traitement d'images ne se limite pas à la restauration. Une problématique importante dans de nombreux domaines d'application consiste à extraire les signatures spectrales des composants purs (*sources*) de l'image hyperspectrale (voir figure 3). Cette procédure est généralement couplée à l'estimation des coefficients de mélange ou *cartes d'abondance* représentant la contribution relative de chaque source à l'image. On parle alors de *séparation de sources* [Comon et Jutten, 2007a, Comon et Jutten, 2007b], souvent formulée mathématiquement comme un problème de factorisation de la matrice des données. Notons qu'à la différence de la déconvolution, seules des images spectrales donnent lieu au problème de séparation de sources.

Ces deux problèmes inverses sont au cœur de très nombreuses applications en imagerie, dans des domaines aussi divers que le biomédical, la géophysique ou l'astronomie. Dans cette thèse, l'acquisition et le traitement de données réelles porte sur les deux composantes étudiées dans le projet HÆSPRI :

1. l'imagerie de bio-capteurs bactériens en microscopie confocale de fluorescence. Ces bio-capteurs sont des bactéries génétiquement modifiées par insertion d'un gène rapporteur codant des émetteurs fluorescents, comme illustré en figure 4. Les signaux mesurés sont liés à l'interaction de la bactérie avec son environnement : ils diffèrent selon que la bactérie est en contact avec une source de pollution ou non. L'analyse de ces signaux a pour but de détecter et d'identifier les polluants présents dans les sols.
2. l'imagerie de minéraux et de composés chimiques en microscopie confocale Raman. Ce travail a été réalisé en collaboration avec Manuel Dossot, maître de conférences au Laboratoire de Chimie Physique et Microbiologie pour l'Environnement (LCPME, UMR 7564). L'analyse des images a pour but de mettre en évidence les groupements fonctionnels chimiques constituant le milieu imagé dans des situations expérimentales peu favorables.

La thèse a ainsi pour but de fournir des outils permettant de traiter à la fois des problèmes liés à l'imagerie de populations bactériennes et au milieu minéral dans lequel elles évoluent.

2 Contributions de la thèse

La première partie du manuscrit est axée sur l'étude des techniques d'imagerie utilisées dans la thèse. Le chapitre 1 présente les principes physiques des phénomènes de fluorescence et de diffusion Raman ainsi que les modalités de microscopie couramment utilisées avec ces techniques.

Le reste de cette partie est consacré à un état de l'art des modèles de formation (chapitre 2) et d'acquisition (chapitre 3) d'une image hyperspectrale en microscopie en partant de l'angle de l'optique physique jusqu'aux formulations fonctionnelles utilisées en traitement d'images. La compréhension détaillée de la partie la plus physique (section 2.1) n'est pas nécessaire à la bonne compréhension de la suite par le lecteur non « affûté » sur l'optique. Cet exposé est en revanche nécessaire pour justifier la pertinence des modèles physiques (convolutifs) qui seront utilisés dans la suite de ce mémoire.

La deuxième partie de la thèse détaille des contributions algorithmiques en restauration d'images. Dans le chapitre 5, le problème de déconvolution est formulé comme la minimisation d'un critère quadratique pénalisé quadratiquement incorporant des termes de régularisation spatiale et spectrale séparables. Cette approche de restauration spectrale est employée dans [Rodet et al., 2008, Zhang et al., 2009, Bongard et al., 2011] où la minimisation du critère est réalisée par des méthodes itératives, ce qui peut induire des temps de calcul élevés en grande dimension. Pour pallier cet inconvénient, nous proposons une approche originale de minimisation explicite dans le domaine de Fourier présentant une faible complexité algorithmique. Les performances de la méthode sont évaluées sur des données synthétiques similaires aux images de fluorescence et justifient la prise en compte d'une régularisation spectrale.

Cette structure de calcul est utilisée pour résoudre de manière rapide des problèmes de déconvolution contraints. Dans le chapitre 6, le problème est résolu sous contrainte de positivité en comparant les méthodes de pénalisation extérieure quadratique et du lagrangien augmenté. Les performances de l'algorithme résultant sont évaluées sur des données synthétiques. Elles surpassent celles des méthodes standard sous MATLAB en terme de temps de calcul. Un travail d'implémentation plus fine de méthodes itératives de type points intérieurs pour minimiser ce même critère a été réalisé en collaboration avec Saïd Moussaoui, maître de conférences à l'Institut de Recherche en Communications et Cybernétique de Nantes (IRCCyN, UMR 6597) et permet de retrouver des temps de calcul comparables.

Le chapitre 7 montre comment incorporer la structure de calcul aux techniques d'état de l'art d'optimisation pour résoudre un problème de déconvolution plus complexe, faisant intervenir des termes convexes non quadratiques voire non différentiables afin de préserver les contours dans l'image. Les méthodes sont évaluées pour un problème réel d'interaction entre biocapteurs bactériens et un milieu minéral en microscopie de fluorescence.

La troisième partie de la thèse aborde la séparation aveugle de sources en considérant l'influence d'une étape préliminaire de déconvolution sur les données. Il s'agit d'un problème ouvert qui a fait l'objet de très peu de travaux antérieurs [Moudden et al., 2008, Zhao et al., 2013]. Le chapitre 8 présente d'abord les modèles géométriques de type simplexe de volume minimal utilisés en séparation d'images hyperspectrales en raison de leur rapidité. Nous proposons une condition suffisante d'identifiabilité des sources pures contenues dans l'image, en relaxant certaines hypothèses admises dans la littérature. Nous proposons un modèle générique couplant la factorisation de la matrice de données avec le modèle d'observation développé dans la première partie. L'identifiabilité des sources pures à partir du modèle couplé est analysée de façon géométrique. Les résultats obtenus diffèrent en fonction de la variation du modèle d'observation aux différentes bandes spectrales. L'intérêt de la déconvolution comme étape préliminaire à la séparation de sources est démontré sur des données synthétiques explorant différentes configurations du modèle d'observation, et sur un problème de séparation aveugle difficile d'images réelles obtenues en microscopie confocale Raman. Ces travaux ouvrent la voie au développement de méthodes conjointes de déconvolution et de séparation de sources.

3 Liste des publications

Articles de revue internationale avec actes et comité de lecture

- [R1] S. Henrot, C. Soussen et D. Brie, "Fast Positive Deconvolution of Hyperspectral Images", *IEEE Transactions on Image Processing*, vol. 22, no. 2, pp. 828-833, Feb. 2013.
- [R2] S. Henrot, C. Soussen, M. Dossot et D. Brie, "Does Deblurring Improve Geometrical Spectral Unmixing?". *IEEE Transactions on Image Processing*, pp. 1-14, to be published.

Actes de congrès internationaux avec comité de lecture

- [C1] S. Henrot, C. Soussen et D. Brie, "Fast deconvolution of large fluorescence hyperspectral images", in *Proc. IEEE WHISPERS*, Lisbon, Portugal, June 2011.
- [C2] S. Henrot, S. Moussaoui, C. Soussen and D. Brie, "Edge-preserving nonnegative hyperspectral image restoration", in *Proc. IEEE ICASSP*, Vancouver, Canada, May 2013.

Actes de congrès nationaux avec comité de lecture

- [N1] S. Henrot, C. Soussen et D. Brie, "Déconvolution rapide d'images hyperspectrales de fluorescence", in *Proc. 23th GRETSI workshop*, Bordeaux, France, Sept. 2011.
- [N2] S. Henrot, C. Soussen, S. Moussaoui et D. Brie, "Restauration positive d'images hyperspectrales avec préservation des contours", in *Proc. 24th GRETSI workshop*, Brest, France, Sept. 2013.

Communications sans actes

- [P1] S. Henrot, C. Soussen et D. Brie, "Déconvolution rapide d'images hyperspectrales de grande dimension", Journée thématique *Problèmes inverses*, Fédération Charles Hermite, Nancy, Juin 2011.
- [P2] S. Henrot, C. Soussen et D. Brie, "Déconvolution d'images hyperspectrales de fluorescence en microscopie confocale sous contrainte de positivité", Journée *Traitement d'Images en Imagerie Biologique*, GdR ISIS, Rennes, Nov. 2011.
- [P3] S. Henrot, C. Soussen, S. Moussaoui et D. Brie, "Restauration positive d'images hyperspectrales avec préservation des contours", Journée *Optimisation convexe sous contrainte*, GdR ISIS, Paris, Oct. 2013.

Chapitres d'ouvrage (travail antérieur à la thèse)

- [L1] S. Henrot, E.-H. Djermoune, et D. Brie, "Surveillance des réacteurs SFR : Analyse des données acoustiques des GV de PFR", in *Supervision, surveillance et sûreté de fonctionnement des grands systèmes*, N. Matta, Y. Vandenboomgaerde, J. Arlat, Eds, chapter 12, pp. 273-288. *Traité Information, Commande, Communication*, IC2, Hermès Science Publications, Paris, 2012.
- [L2] S. Henrot, E.-H. Djermoune, D. Brie, "SVM Time-frequency classification for the detection of injection states", in *Supervision and Safety of Complex Systems*, N. Matta, Y. Vandenboomgaerde, J. Arlat, Eds, chapter 12, pp. 231-245. ISTE Ltd, Great Britain and John Wiley & Sons, United States, 2012.

Première partie

Modèle direct en microscopie
hyperspectrale

Modalités d'imagerie spectrale

1.1 Fluorescence

La microscopie en fluorescence est une technique populaire d'imagerie de spécimens biologiques. Le principe physique du phénomène de fluorescence est le suivant : lorsqu'une molécule appelée *fluorophore* absorbe un photon à une longueur d'onde spécifique λ_x , elle acquiert une énergie $E = \hbar c/\lambda_x$, où \hbar désigne la constante de Planck et c la vitesse de la lumière dans le vide. Une partie de l'énergie est alors relaxée sous forme de chaleur et la molécule atteint un état énergétique intermédiaire, avant de se désexciter en émettant un photon de longueur d'onde $\lambda_m > \lambda_x$. La différence $\lambda_m - \lambda_x$, appelée *déplacement de Stokes*, peut être exploitée de manière à séparer par filtrage la lumière d'excitation de la lumière d'émission. La formation d'une image repose alors sur la détection de la lumière émise. Cette méthode permet d'étudier des tissus vivants : par exemple, des bio-capteurs bactériens modifiés génétiquement par l'insertion d'un gène codant pour la protéine fluorescente verte (GFP, pour *Green Fluorescent Protein*).

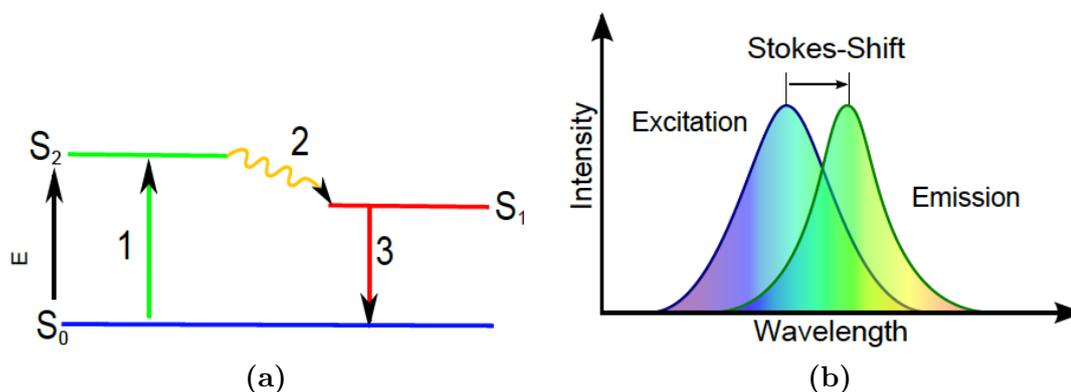


FIGURE 1.1 – Illustration du phénomène de fluorescence. (a) Diagramme de Jablonski : S_0 est l'état énergétique initial du fluorochrome. Celui-ci atteint le niveau S_2 par absorption d'une énergie $E = \hbar c/\lambda_x$. Une partie de l'énergie est relâchée sous forme de chaleur (état S_1). La molécule revient finalement à l'état initial en émettant l'énergie $E' = \hbar c/\lambda_m$. (b) Spectres d'excitation et d'émission correspondant, montrant le déplacement de Stokes vers le rouge. Source : [Pankajakshan et al., 2009b].

1.2 Diffusion Raman

La microscopie Raman est une technique exploitant un phénomène physique en apparence similaire à la fluorescence, l'*effet Raman*. Considérons une molécule illuminée à une certaine longueur d'onde : l'interaction du champ électrique incident et des charges de la matière provoque la rediffusion isotrope de cette lumière, appelée *diffusion Rayleigh*. Contrairement au phénomène de fluorescence, les photons ne sont pas absorbés et la diffusion se produit à une longueur d'onde identique. Cependant, une faible fraction de la lumière diffusée subit un décalage spectral vers le rouge (diffusion *Raman Stokes*). Physiquement, les photons incidents ont cédé une partie de leur énergie convertie par la molécule sous forme de vibrations, correspondant à des modifications d'angles et de distances inter-atomiques¹. Ce phénomène permet d'étudier la composition moléculaire de divers milieux minéraux ou matériaux de manière extrêmement précise, les vibrations caractéristiques de nombreux groupements fonctionnels chimiques étant répertoriées dans des tables.

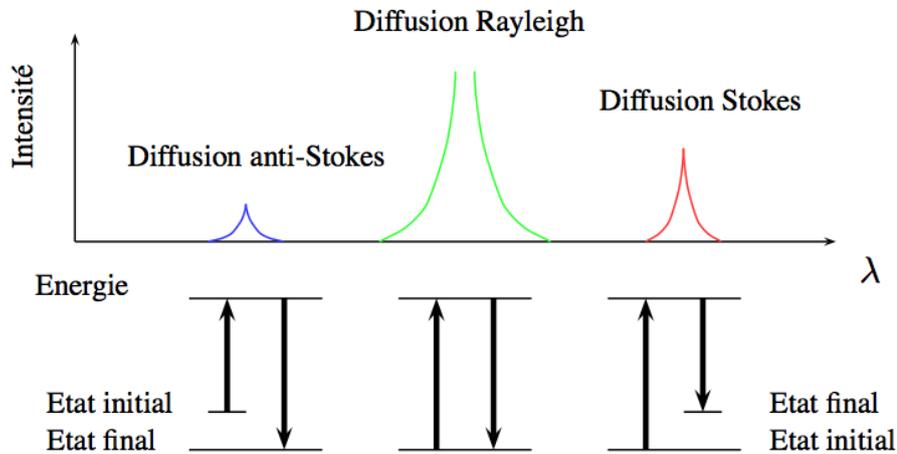


FIGURE 1.2 – Illustration du phénomène de diffusion Raman.

1.3 Modalités de microscopie

Plusieurs types de microscopes exploitent les techniques d'imagerie en fluorescence, le plus classique étant le microscope *plein champ* (WFM, pour *wide-field microscope*). Dans cette modalité, le spécimen est excité globalement et uniformément par un faisceau de lumière blanche dont une longueur d'onde λ_x est sélectionnée par un filtre d'excitation. La fluorescence émise est filtrée par un miroir semi-réfléchissant, constitué en général d'un prisme dichroïque réfléchissant sélectivement la lumière d'excitation, puis par un filtre d'émission. Elle est enfin captée par une caméra munie de capteurs CCD (dispositifs à transfert de charge) ou un tube *photo-multiplicateur* (PM), qui exploite l'effet photo-électrique pour compter les photons émis individuellement.

Pour imager l'objet en trois dimensions (3D), on collecte une séquence d'images bidimensionnelles (2D) balayant les différents plans focaux. Cependant, le plan image est constitué non seulement de la lumière issue du plan focal, mais également des contributions des plans hors

1. Une fraction négligeable de la lumière subit une diffusion Raman *anti-Stokes*, correspondant à un décalage spectral vers le violet. Physiquement, cette diffusion correspond au transfert d'énergie d'une molécule en vibration vers le photon. Cet effet n'est pas étudié dans ce manuscrit.

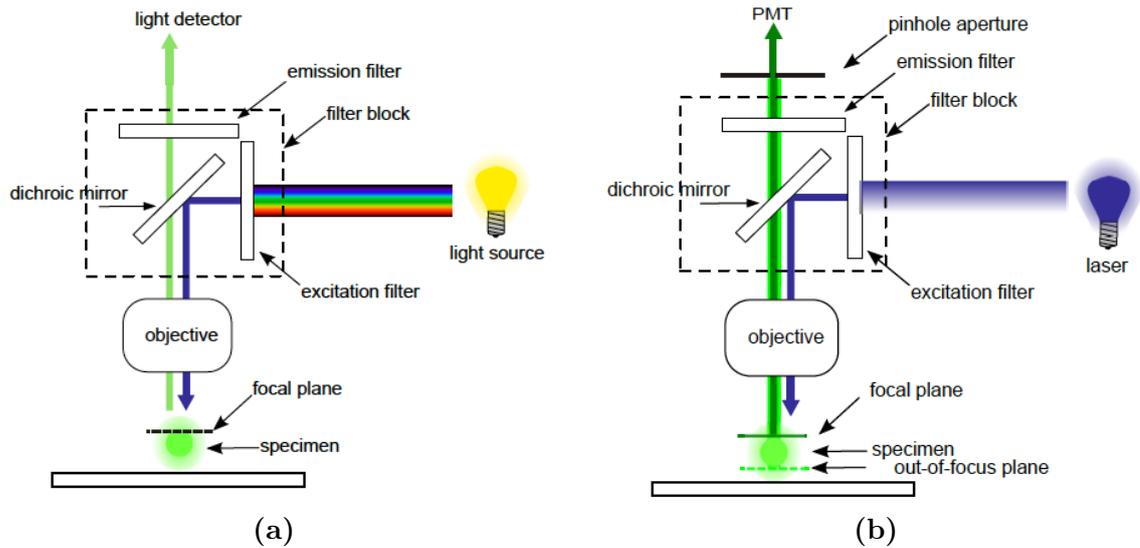


FIGURE 1.3 – Schéma de principe d'un microscope optique. (a) Microscope plein-champ. (b) Microscope confocal. Source : [Pankajakshan et al., 2009b].

focus. L'image d'un spécimen large ou incliné par rapport à l'objectif possède donc une faible profondeur de champ et une résolution limitée.

Le microscope confocal à balayage laser (CLSM, pour *confocal laser scanning microscopy*), également très utilisé en imagerie Raman, permet de pallier cet inconvénient. Il se distingue du plein champ par deux différences essentielles : l'excitation laser de longueur d'onde λ_x est ponctuelle, balayant un à un chaque point du plan focal, et une ouverture circulaire de faible diamètre appelée sténopé ou *pinhole* est placée devant le détecteur, dans le plan *conjugué* au plan focal. Ce dispositif supprime la majeure partie des contributions provenant des zones non focalisées. Malheureusement, la résolution de l'instrument est limitée pour deux raisons physiques de base :

1. la diffraction : l'image d'un point source passant par l'objectif n'est pas un point mais un *disque d'Airy* entouré d'anneaux concentriques d'intensité décroissante. La résolution de l'instrument est fondamentalement limitée par ce phénomène, l'image résultante est ainsi floutée ;
2. la quantité de lumière captée est fortement réduite par le sténopé : le faible taux de photons provoque un bruit sur l'image, suivant une distribution de Poisson. De plus, il est souvent nécessaire de prendre en compte le bruit associé au détecteur, classiquement caractérisé par une distribution gaussienne.

Dans les chapitres suivants, nous étudions les modèles de formation et d'acquisition de l'image permettant de prendre en compte ces dégradations. Les modèles développés pour le WFM et le CLSM sont valables aussi bien pour les techniques de fluorescence que de diffusion Raman Stokes, en raison de leur caractéristique commune fondamentale : le spécimen excité à la longueur d'onde λ_x émet le signal à $\lambda_m > \lambda_x$ et on est ainsi en mesure d'observer uniquement le signal d'émission.

2

Formation de l'image

Sommaire

2.1	Caractérisation de l'objectif du microscope	13
2.1.1	Quelques notions d'optique physique	13
2.1.2	Approximation de Debye	14
2.1.3	Aproximation de Stokseth	15
2.2	Modèle d'observation	16
2.2.1	Réponse impulsionnelle optique	16
2.2.2	Modèle d'observation 3D	17
2.2.3	Modèle d'observation 2D	18
2.3	Approximations gaussiennes des réponses impulsionnelles	18

2.1 Caractérisation de l'objectif du microscope

L'optique géométrique est basée sur la notion de rayons lumineux. Cette approche permet d'expliquer les phénomènes de *réfraction*, *i.e.* le changement de direction des rayons au passage d'une interface entre deux milieux d'indices de réfraction différents, et celui de *réflexion* des rayons à une interface métallique ou diélectrique. Cependant, cette branche de l'optique ne permet pas d'expliquer la *diffraction* se produisant lorsque la lumière traverse une ouverture. Ce phénomène est décrit par les lois de l'optique physique ou ondulatoire. L'onde lumineuse est alors caractérisée par une quantité complexe appelée *phaseur*, fonction de la variable spatiale, et de la variable temporelle lorsque l'onde n'est pas monochromatique.

2.1.1 Quelques notions d'optique physique

Lorsqu'une onde se propage, on peut considérer chaque point du front d'onde comme une onde sphérique secondaire. Le front d'onde ultérieur est obtenu comme l'enveloppe des fronts d'onde secondaires, comme illustré en figure 2.1 (a) : il s'agit de la construction de Huygens. Supposons qu'un écran percé d'une ouverture soit placé sur le trajet des ondes lumineuses (figure 2.1 (b)). Intuitivement, l'ouverture intercepte seulement une partie des ondes secondaires. Le motif diffracté résulte alors de l'*interférence* des ondes secondaires issues de l'ouverture. En microscopie, l'ouverture limitante est la monture de l'objectif.

Le calcul de la figure de diffraction consiste à résoudre l'équation des ondes ou *équation d'Helmholtz*, à l'aide d'une relation d'analyse vectorielle connue sous le nom de *théorème de*

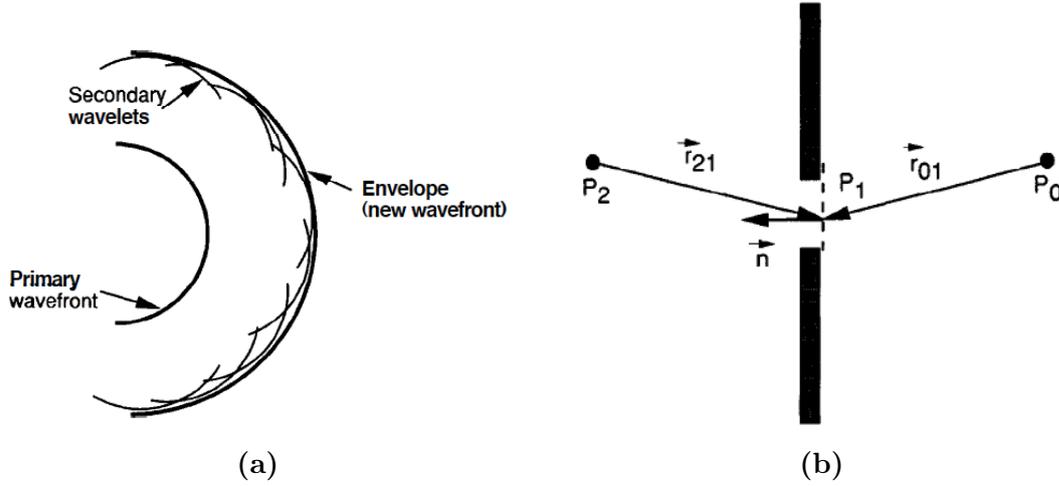


FIGURE 2.1 – (a) Illustration de la construction de Huygens : chaque point du front d'onde est une onde sphérique secondaire. Le front d'onde ultérieur est construit comme l'enveloppe des fronts d'onde secondaires. (b) Formulation du problème de diffraction par Kirchhoff. Source : [Goodman, 2005].

Green [Goodman, 2005]. Une solution du problème est donnée par l'intégrale de Fresnel-Kirchhoff, qui exprime le phaseur U en un point P_0 de l'espace image en fonction du champ dans l'ouverture produit par un point source P_2 dans l'espace objet :

$$U(P_0) = \int \int_{\Sigma} \frac{1}{j\lambda} \left[\frac{\exp(jkr_{21})}{r_{21}} \right] \left[\frac{\cos(\vec{n}, \vec{r}_{01}) - \cos(\vec{n}, \vec{r}_{21})}{2} \right] \frac{\exp(jkr_{01})}{r_{01}} ds. \quad (2.1)$$

où Σ représente l'ouverture, λ est la longueur d'onde, $k = 2\pi/\lambda$ est le nombre d'onde, $j = \sqrt{-1}$ et r_{21} et r_{01} sont respectivement les modules des vecteurs \vec{r}_{21} et \vec{r}_{01} . La forme de l'équation (2.1) permet de retrouver la construction de Huygens : le champ diffracté en P_0 est une superposition d'ondes sphériques divergentes $\exp(jkr_{01})/r_{01}$ émanant de chaque point de l'ouverture. Cette relation constitue l'un des principes de base de la théorie scalaire de la diffraction.

2.1.2 Approximation de Debye

Considérons l'objectif uniformément illuminé de la figure 2.2 (a), d'ouverture numérique $NA = n_i \sin \alpha$ où n_i est l'indice de réfraction du milieu d'immersion et α est le demi-angle maximum de la convergence par l'objectif. On cherche à calculer la distribution d'amplitude proche-focale $h_A(x, y, z; \lambda)$, où (x, y, z) sont les coordonnées dans l'espace image et λ est la longueur d'onde d'illumination dans le vide. A partir de l'intégrale de Fresnel-Kirchhoff (2.1) et en utilisant la symétrie circulaire de la lentille, l'intégrale de Debye s'écrit [Zhang, 2007] :

$$h_A(x, y, z; \lambda) = C \int_0^\alpha A(\theta) J_0(k_i \rho \sin \theta) e^{-ik_i z \cos \theta} \sin \theta d\theta \quad (2.2)$$

où C est une constante complexe, J_0 est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre zéro², λ/n_i et $k_i = 2\pi n_i/\lambda$ sont la longueur d'onde et le nombre d'onde dans le milieu d'immersion de

2. Les fonctions de Bessel de première espèce et d'ordre n sont définies par $J_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\tau - x \sin \tau) d\tau$ pour tout entier n .

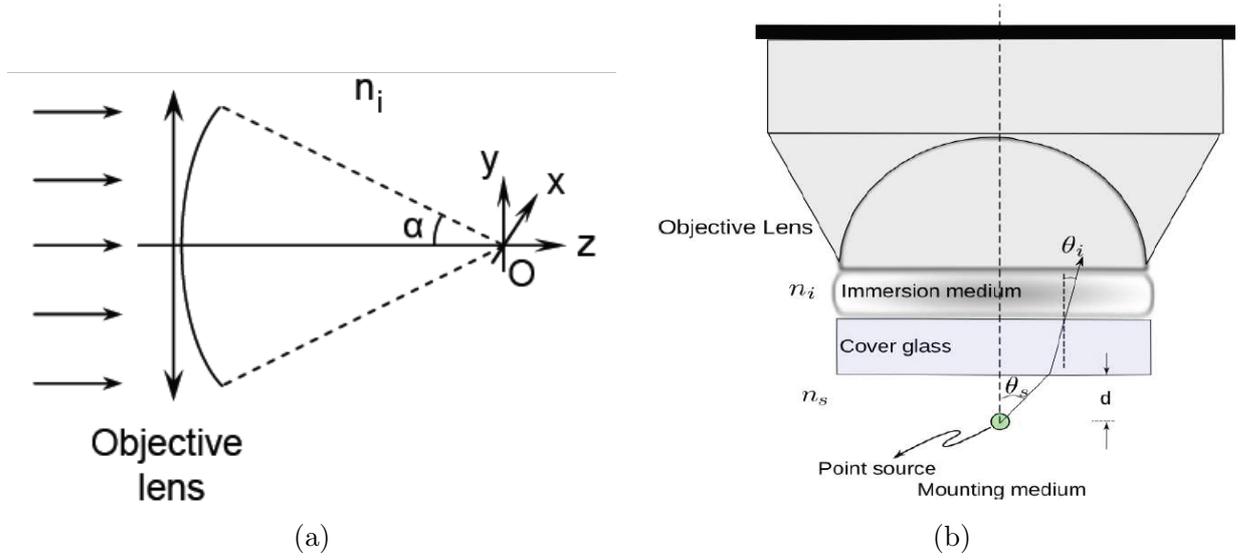


FIGURE 2.2 – (a) Focalisation d'un faisceau de lumière par un objectif d'ouverture numérique $NA = n_i \sin \alpha$ (l'axe optique est représenté horizontal). En présence d'aberrations, le front d'onde est déformé et perd sa forme parfaitement sphérique. Source : [Zhang, 2007]. (b) Principaux constituants optiques d'un objectif (l'axe optique est représenté vertical). La lumière issue du point source traverse successivement le milieu d'immersion du spécimen d'indice de réfraction n_s , la lamelle, et le milieu d'immersion de la lentille d'indice n_i . Source : [Pankajakshan et al., 2009b].

la lentille et $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$. $A(\theta)$ est la fonction d'*apodisation* donnée par $(\cos \theta)^{-1/2}$ pour une lentille asphérique en détection et $(\cos \theta)^{1/2}$ en illumination, dont le rôle est de satisfaire à la *condition des sinus d'Abbe* permettant de produire des images nettes de points situés aussi bien à proximité et à distance de l'axe optique. Ce modèle est adapté aux situations non paraxiales, *i.e.* quand l'ouverture numérique de l'objectif est importante ($NA > 0.7$). Dans le cas paraxial, l'équation (2.2) tend asymptotiquement vers

$$h_A(x, y, z; \lambda) = \alpha^2 C e^{-ik_i z} \int_0^1 J_0(k_i \rho t \sin \alpha) e^{k_i z t^2 \sin^2 \alpha / 2} t dt. \quad (2.3)$$

Le modèle (2.2) fait l'hypothèse d'une lentille idéale, transformant une onde plane incidente en une onde sphérique convergeant au point focal. Cependant, au passage des éléments optiques représentés sur la figure 2.2, le front d'onde perd sa forme parfaitement sphérique : on parle d'*aberrations sphériques*, prises en compte dans le modèle ci-dessous.

2.1.3 Aproximation de Stokseth

Lorsque l'on observe le champ à grande distance de l'ouverture diffractante, *i.e.* en *champ lointain*, l'équation (2.1) fait l'objet d'une approximation remarquable : le motif de diffraction est la transformée de Fourier bidimensionnelle (TF-2D) du champ dans l'ouverture. La distribution d'amplitude proche-focale h_A est ainsi donnée par

$$h_A(x, y, z; \lambda) = \int_{k_x} \int_{k_y} P(k_x, k_y, z; \lambda) e^{j(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y \quad (2.4)$$

où (k_x, k_y, k_z) désignent les fréquences spatiales et la *fonction de pupille* $P(., ., z)$ représente le champ complexe dans la pupille de la lentille de l'objectif produit par un point source [Pankajakshan et al., 2009a] :

$$P(k_x, k_y, z; \lambda, \text{NA}) = \begin{cases} A(\theta_i) \exp(jk_0 \phi(\theta_i, \theta_s, z)) & \text{si } \frac{(k_x^2 + k_y^2)^{1/2}}{k_i} < \frac{\text{NA}}{\lambda} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.5)$$

où l'angle $\theta_i = \arcsin((k_x^2 + k_y^2)^{1/2}/k_i)$ est représenté sur la figure 2.2 (b), n_s est l'indice de réfraction du milieu d'immersion du spécimen, l'angle θ_s est relié à θ_i par la loi de Descartes-Snell gouvernant la réfraction : $n_i \sin \theta_i = n_s \sin \theta_s$, et le terme de phase $\phi(\theta_i, \theta_s, z)$ modélise la *défocalisation* (liée à la variable axiale z) et les aberrations sphériques :

$$\phi(\theta_i, \theta_s, z) = \phi_d(\theta_i, z) + \phi_a(\theta_i, \theta_s). \quad (2.6)$$

Le terme de défocalisation peut être approché par

$$\phi_d(\theta_i, z) \approx k_i z (1 - \cos \theta_i) / k_0 \quad (2.7)$$

où $k_0 = 2\pi/\lambda$ est le nombre d'onde dans le vide. En supposant que l'erreur introduite par la différence d'indices de réfraction entre la lamelle et l'objectif a été compensée, le terme d'aberrations est donné par

$$\phi_a(\theta_i, \theta_s) \approx -d(n_i \cos \theta_i - n_s \cos \theta_s). \quad (2.8)$$

On note que les principaux paramètres déterminant les aberrations sont les indices de réfraction n_i et n_s et la profondeur du spécimen sous le lamelle d .

On peut montrer que le modèle de Stokseth (2.4) est équivalent au modèle de Debye (2.2) en l'absence d'aberrations [Pankajakshan, 2010]. Nous mentionnons enfin le modèle classique de [Gibson et Lanni, 1991], dont la forme est proche de (2.2) et qui prend en compte les aberrations sphériques, ainsi que les modèles vectoriels de formation de l'image [Török et al., 1997, Haerberlé et al., 2003].

2.2 Modèle d'observation

2.2.1 Réponse impulsionnelle optique

Le détecteur étant directement sensible à l'*intensité* de l'onde lumineuse incidente, définie comme le carré du phaseur de l'onde, on s'intéresse à la distribution d'intensité 3D dans l'espace image d'un microscope plein-champ ou confocal produite par un point source. Cette *réponse impulsionnelle optique* (RIO) est couramment abrégée PSF pour *point-spread function*. La RIO du microscope plein-champ h_{WFM} est donnée par le carré de la distribution d'amplitude :

$$h_{WFM}(x, y, z; \lambda_m) = |h_A(x, y, z; \lambda_m)|^2 \quad (2.9)$$

où λ_m est la longueur d'onde d'émission. En modélisant le sténopé par un disque de rayon r et à l'aide du *principe de réciprocité*, la RIO du microscope confocal h_{CLSM} est donnée par :

$$h_{CLSM}(x, y, z; \lambda_x, \lambda_m) = |h_A(x, y, z; \lambda_x)|^2 \int_{x_1^2 + y_1^2 \leq r^2} |h_A(x - x_1, y - y_1, z; \lambda_m)|^2 dx_1 dy_1 \quad (2.10)$$

où λ_x est la longueur d'onde d'excitation. Lorsque la taille du sténopé augmente ($r \rightarrow \infty$), l'expression (2.10) tend asymptotiquement vers l'équation (2.9) : un microscope plein-champ

peut ainsi être considéré comme un microscope confocal avec un sténopé complètement ouvert, lorsqu'ils sont munis de détecteurs identiques. La forme générale en 3D d'une RIO est celle d'un diabololo, comme illustré sur la figure 2.3 ; en présence d'aberrations sphériques, la RIO perd sa symétrie axiale.

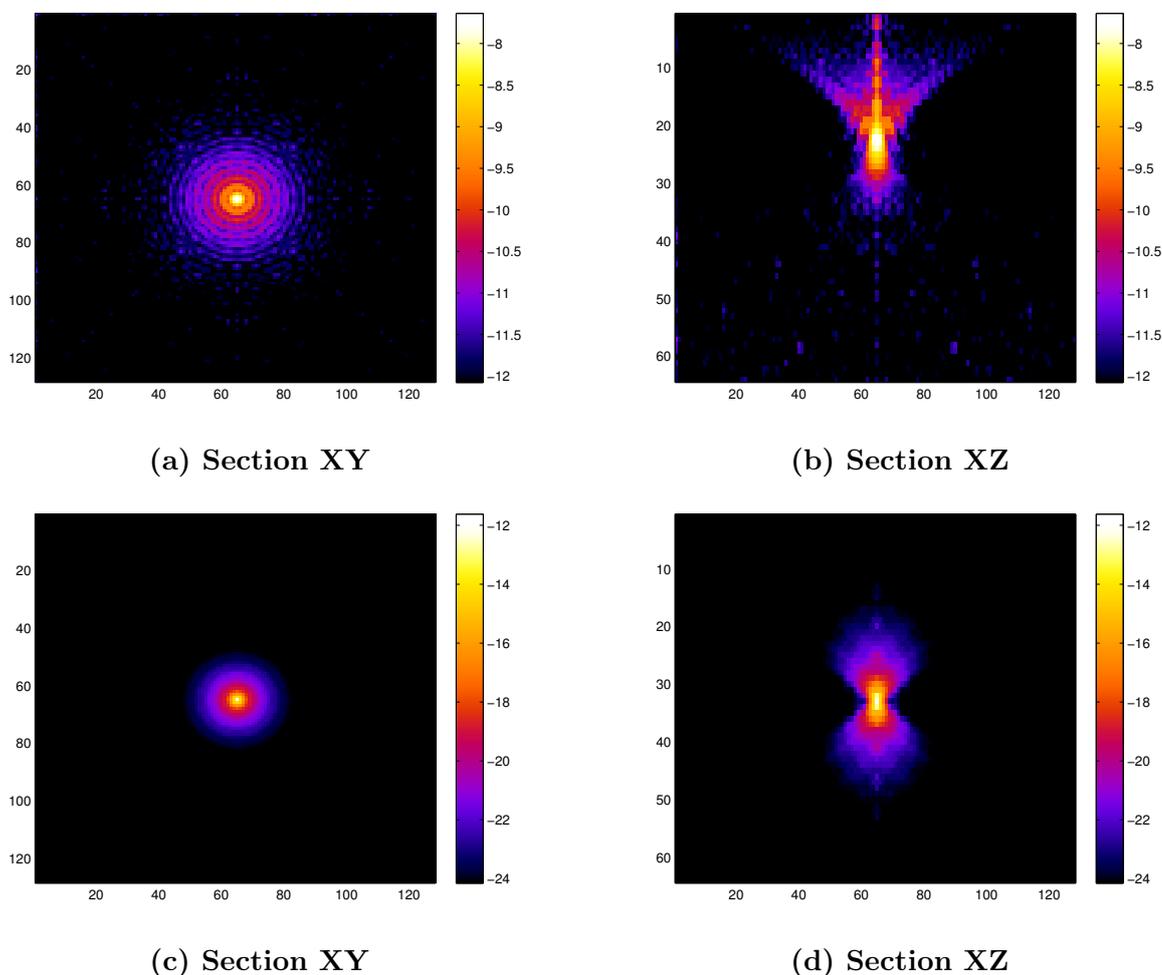


FIGURE 2.3 – Exemples de RIOs calculées numériquement pour un objectif 40x/1.4 huile, présentées en *projection par maximum d'intensité* en échelle logarithmique. Chaque pixel mesure $6.45 \mu\text{m}$. (a) Section XY d'un microscope plein-champ (tâche d'Airy). (b) Section XZ d'un microscope plein-champ en présence d'aberrations sphériques (le spécimen étant plongé dans l'eau dont l'indice de réfraction $n_s = 1.33$ diffère de celui de l'huile $n_i = 1.515$). (c) Section XY d'un microscope confocal. (d) Section XZ d'un microscope confocal, sans aberrations.

2.2.2 Modèle d'observation 3D

Une onde lumineuse est dite *cohérente* lorsque l'amplitude en deux points distincts est corrélée dans le temps ; dans le cas contraire, il s'agit d'une onde *incohérente*. Cette propriété est importante car un système d'imagerie cohérent est linéaire en amplitude, tandis qu'un système incohérent est linéaire en intensité lumineuse. Les émissions aléatoires en fluorescence et en diffusion Raman sont par nature incohérentes et l'image est donc obtenue en intégrant les distributions

d'intensité produites par chaque point source de l'objet, *i.e.* les RIO établies en (2.9) et (2.10). Le modèle d'observation s'écrit

$$i(x, y, z) = \int \int \int h(x - Mx', y - My', z - M^2z')o(x', y', z')dx'dy'dz' \quad (2.11)$$

où i et o sont les distributions d'intensité lumineuse dans l'espace image et objet, (x', y', z') les coordonnées dans l'espace objet, h est la RIO du microscope et M le *grandissement* du microscope : l'image d'un point source situé en (x', y', z') sera centrée au point $(x = Mx', y = My', z = M^2z')$ dans l'espace image. En normalisant les coordonnées objet, le modèle devient invariant par translation [Pankajakshan, 2010] et l'équation (2.11) se réécrit comme une convolution 3D :

$$i(x, y, z) = (h *_3D o_g)(x, y, z) \quad (2.12)$$

où $*_{3D}$ désigne la convolution 3D et $o_g(x, y, z) = 1/M^4 o(x/M, y/M, z/M^2)$ est l'image idéale de l'objet prédite par l'optique géométrique. Dans la suite du manuscrit, on confondra o et o_g par simplicité ; le terme *objet* désignant ainsi l'image idéale du spécimen. Dans l'espace de Fourier, l'équation d'observation (2.12) se réécrit sous forme d'un produit à l'aide du théorème de Plancherel :

$$I(k_x, k_y, k_z) = H(k_x, k_y, k_z)O(k_x, k_y, k_z) \quad (2.13)$$

où I, O, H sont les Transformées de Fourier tridimensionnelles (TF-3D) respectives des images i, o, h , cette dernière étant appelée *fonction de transfert optique* du système (FTO).

2.2.3 Modèle d'observation 2D

Lorsqu'un objet présente peu de variations selon l'axe optique, il est courant de l'imager à un seul plan focal. Le modèle d'observation (2.12) se réécrit alors comme une convolution 2D :

$$i(x, y, z) = (h^{2D} *_2D o)(x, y, z) \quad (2.14)$$

où $*_{2D}$ désigne la convolution 2D et la RIO 2D h^{2D} correspond au plan central de la RIO 3D, *i.e.* $h^{2D}(\cdot, \cdot) = h^{3D}(\cdot, \cdot, 0)$ [Gu, 1996]. A titre d'exemple, la RIO 2D d'un microscope plein-champ est connue sous le nom de *tâche d'Airy*, représentée en figure 2.3 (a) et donnée par l'expression

$$h_{WFM}^{2D}(\rho; \lambda_m) = \left[2 \frac{J_1(k_m NA \rho)}{k_m NA \rho} \right]^2 \quad (2.15)$$

où J_1 est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre un et $k_m = 2\pi/\lambda_m$ est le nombre d'onde d'émission. L'équation d'observation correspondante dans l'espace de Fourier est ainsi

$$I(k_x, k_y) = H(k_x, k_y)O(k_x, k_y). \quad (2.16)$$

2.3 Approximations gaussiennes des RIOs

L'examen de la figure 2.3 montre que la RIO d'un microscope en fluorescence présente un lobe principal très intense, entouré de lobes secondaires très faibles [Zhang et al., 2007, Sarder et Nehorai, 2006]. En l'absence d'aberrations sphériques, une technique de calcul efficace consiste à

approcher la RIO par une gaussienne séparable, dont les paramètres se déduisent des caractéristiques physiques du système. Cette approximation permet de réduire drastiquement le coût de calcul lié aux modèles physiques. Dans le cas 2D, la fonction gaussienne s'écrit

$$g_{\sigma_\rho} = A_1 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma_\rho^2}\right) \quad (2.17)$$

où le paramètre σ_ρ est l'écart-type latéral, et dans le cas 3D :

$$g_{\sigma_\rho, \sigma_z} = A_1 \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma_\rho^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (2.18)$$

où σ_z est l'écart-type axial. Les paramètres optimaux σ^* sont solutions du problème

$$\sigma^* = \underset{\sigma}{\operatorname{argmin}} \|h - g_\sigma\|_2^2. \quad (2.19)$$

Dans le cas 2D, les deux modalités d'imagerie disposent d'approximations gaussiennes satisfaisantes. En revanche, dans le cas 3D, l'approximation n'est adaptée qu'au microscope confocal. A titre d'exemple, le paramètre latéral pour un microscope confocal est donné dans le cas 3D paraxial par

$$\hat{\sigma}_\rho = \sqrt{2} \left[\frac{c_1^2}{r^2} + \frac{4c_2 J_0(c_2) J_1(c_2) - 8J_1^2(c_2)}{r^2 (J_0^2(c_2) + J_1^2(c_2) - 1)} \right]^{-1/2} \quad (2.20)$$

où $c_1 = k_x r \text{NA}$ et $c_2 = k_m r \text{NA}$, et le paramètre axial est

$$\hat{\sigma}_z = 2\sqrt{6} \left[\frac{c_1^2 \text{NA}^2}{r^2 n_i^2} - \frac{48c_2^2 [J_0^2(c_2) + J_1^2(c_2)] - 192J_1^2(c_2)}{n_i^2 k_m^2 r^4 (J_0^2(c_2) + J_1^2(c_2) - 1)} \right]^{-1/2} \quad (2.21)$$

où la dépendance en longueur d'onde s'exprime par l'intermédiaire des nombres d'onde k_x et k_m .

3

Acquisition de l'image

Sommaire

3.1	Détection de l'image	21
3.2	Représentation discrète des images	22
3.2.1	Acquisition spectrale et représentation tensorielle	22
3.2.2	Convolution discrète	23
3.2.3	Matrice d'observation spectrale	24
3.3	Modèle d'observation global	24

L'objectif de ce chapitre est d'établir le modèle direct reliant les images acquises expérimentalement aux images nettes idéales.

3.1 Détection de l'image

L'image est acquise en convertissant les photons émis par le spécimen en une quantité mesurable telle qu'un courant électrique, à l'aide de l'effet photoélectrique. Les capteurs les plus utilisés pour ce faire sont les capteurs CCD (*Charged Coupled Device*, ou dispositifs à transfert de charge) et les tubes photomultiplicateurs (PM). On s'intéresse au modèle statistique gouvernant la détection de l'intensité lumineuse, en prenant l'exemple d'une caméra CCD constituée de différentes cellules (n_1, n_2) sensibles à l'intensité incidente. Par la nature aléatoire de l'émission en fluorescence, le nombre de photons incidents sur la cellule C_{n_1, n_2} est distribué suivant une loi de Poisson d'intensité $\Lambda(n_1, n_2)$:

$$c(n_1, n_2) \sim \mathcal{P}(\Lambda(n_1, n_2)) \quad (3.1)$$

où l'intensité se calcule en intégrant l'intensité du champ lumineux sur la surface de la cellule C_{n_1, n_2} et la durée du temps de pose T :

$$\Lambda(n_1, n_2) = \int_0^T \int_{C_{n_1, n_2}} i(x, y, t) dx dy dt. \quad (3.2)$$

Le modèle (3.1) est adapté lorsque la cellule collecte un faible total de photons. Cependant, il ignore certaines sources de bruit telles que la radiation de fond de la cellule, le *courant d'obscurité* (*dark current*) généré par la chaleur en l'absence d'illumination, les erreurs de calibration de la

caméra ou encore le bruit thermique lié aux circuits électroniques (modélisé par une densité de probabilité gaussienne $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$). Un modèle complet s'écrirait [Moulin, 2008]

$$c(n_1, n_2) \sim \mathcal{P}([\gamma(n_1, n_2)\Lambda(n_1, n_2) + \Lambda_{\text{fond}}(n_1, n_2) + \Lambda_{\text{dark}}(n_1, n_2) + \Lambda_{\text{calibration}}(n_1, n_2)]) + \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (3.3)$$

où γ est l'inverse du facteur de conversion des photons [Pankajakshan et al., 2009b].

Lorsque le nombre de photons augmente (*i.e.* pour un *rapport signal-à-bruit* (SNR) élevé), il est courant d'utiliser un modèle gaussien, l'approximation étant justifiée par le Théorème Central Limite :

$$c(n_1, n_2) = \Lambda(n_1, n_2) + \sqrt{\Lambda(n_1, n_2)}b(n_1, n_2) \quad (3.4)$$

où le terme de bruit $b(n_1, n_2) \sim \mathcal{N}(0, 1)$ est distribué suivant une loi gaussienne centrée réduite. Lorsque le SNR est très élevé, le modèle se réduit à

$$c(n_1, n_2) = \Lambda(n_1, n_2) \quad (3.5)$$

ce qui revient à ignorer la nature quantique de l'émission.

3.2 Représentation discrète des images

Les signaux acquis étant échantillonnés, il est nécessaire de discrétiser le modèle de formation de l'image présenté dans le chapitre précédent. Le théorème d'échantillonnage de Shannon-Nyquist indique que pour chaque dimension du signal, la fréquence d'échantillonnage doit être supérieure au double de la fréquence maximale contenue dans le spectre du signal analogique pour une conversion sans perte. L'image observée résultant d'un produit de convolution, sa bande passante est la somme des bandes passantes de la FTO de l'instrument et de l'image originale. Le support de la FTO est déterminé par les fréquences de coupure latérale et axiale du microscope, données ci-dessous pour un microscope confocal :

$$f_c^{\text{radiale}} = \frac{4n \sin \alpha}{\lambda} = \frac{2\text{NA}}{\lambda} \quad \text{et} \quad f_c^{\text{axiale}} = \frac{n \sin^2 \alpha / 2}{\lambda} \quad (3.6)$$

Ces fréquences de coupure (3.6) sont le double de celles d'un microscope plein-champ.

3.2.1 Acquisition spectrale et représentation tensorielle

Dans de nombreuses applications, l'image est détectée non seulement en deux ou trois dimensions spatiales, mais également à un certain nombre L de bandes spectrales centrées sur les longueurs d'ondes d'émission λ_m à l'aide du filtre d'émission de l'instrument. La dimension spectrale révèle des informations supplémentaires sur le spécimen observé, par exemple lorsqu'il contient différents fluorochromes possédant chacun un spectre d'émission. On parle d'image *multispectrale* lorsque quelques bandes spectrales sont collectées, et d'image *hyperspectrale* lorsque l'on dispose d'un nombre suffisant de bandes spectrales contigües.

Considérons un objet imagé aux longueurs d'onde $\lambda_1, \dots, \lambda_L$. En anticipant sur la résolution du problème inverse, nous associons la lettre « x » à l'objet inconnu et la lettre « y » à l'image observée. Formellement, l'objet discret est une pile d'images ou tenseur $\{\mathbf{X}_\ell, \ell = 1 \dots L\}$. Dans le cas 2D, \mathbf{X}_ℓ est une matrice de taille $N_1 \times N_2$ tandis qu'en 3D, \mathbf{X}_ℓ est un tenseur de taille $N_1 \times N_2 \times N_3$. On note $N = N_1 N_2$ le nombre de pixels $N = N_1 N_2$ ou $N = N_1 N_2 N_3$ le nombre de voxels; le tenseur est donc de taille $N_1 \times N_2 \times L$ ou $N_1 \times N_2 \times N_3 \times L$.

A l'aide d'une réindiciation lexicographique, *i.e.* en concaténant les colonnes de chaque image \mathbf{X}_ℓ , le tenseur peut être réorganisé en un ensemble de L vecteurs de longueur N , $\{\mathbf{x}_\ell, \ell = 1 \dots L\}$, ou bien en un unique vecteur \mathbf{x} de longueur LN . Nous utilisons des notations similaires pour l'image observée, en substituant la lettre « y » à la lettre « x ».

3.2.2 Convolution discrète

Supposons que le spécimen est imagé en 2D. L'échantillonnage de la RIO à la ℓ -ième longueur d'onde donne un noyau de convolution discret \mathcal{H}_ℓ , supposé carré (le support spatial restreint étant obtenu par troncature) :

$$\mathcal{H}_\ell = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{11}^\ell & \dots & \mathcal{H}_{1N_2}^\ell \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{H}_{N_11}^\ell & \dots & \mathcal{H}_N^\ell \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

où $N = N_1 N_2$. Le produit de convolution discret peut s'écrire sous forme matricielle

$$\mathcal{H}_\ell \underset{2D}{*} \mathbf{X}_\ell = \mathbf{H}_\ell \mathbf{x}_\ell \quad (3.8)$$

où \mathbf{H}_ℓ est la *matrice de convolution* de taille $N \times N$. En supposant que les images sont prolongées par des zéros sur les bords (convolution *directe*), \mathbf{H} possède une structure bloc-Tœplitz où les blocs $N_1 \times N_2$ sont des matrices de Tœplitz, e.g. dans le cas $N_1 = N_2 = 3$:

$$\mathbf{H}_\ell = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_2^\ell & \mathbf{H}_1^\ell & \mathbf{0} \\ \mathbf{H}_3^\ell & \mathbf{H}_2^\ell & \mathbf{H}_1^\ell \\ \mathbf{0} & \mathbf{H}_3^\ell & \mathbf{H}_2^\ell \end{bmatrix} \text{ avec } \mathbf{H}_i^\ell = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{2i}^\ell & \mathcal{H}_{1i}^\ell & 0 \\ \mathcal{H}_{3i}^\ell & \mathcal{H}_{2i}^\ell & \mathcal{H}_{1i}^\ell \\ 0 & \mathcal{H}_{3i}^\ell & \mathcal{H}_{2i}^\ell \end{pmatrix}.$$

Nous dénoterons dans la suite cette structure par *Tœplitz-bloc-Tœplitz*. Lorsque la matrice \mathbf{H} est large, elle peut être approximée par une matrice d'observation bloc-circulante avec des blocs circulants [Galatsanos et al., 1991], ce qui revient à imposer des conditions aux bords circulaires :

$$\mathbf{H}_\ell = \begin{bmatrix} \mathbf{H}_2^\ell & \mathbf{H}_1^\ell & \mathbf{H}_3^\ell \\ \mathbf{H}_3^\ell & \mathbf{H}_2^\ell & \mathbf{H}_1^\ell \\ \mathbf{H}_1^\ell & \mathbf{H}_3^\ell & \mathbf{H}_2^\ell \end{bmatrix} \text{ avec } \mathbf{H}_i^\ell = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{2i}^\ell & \mathcal{H}_{1i}^\ell & \mathcal{H}_{3i}^\ell \\ \mathcal{H}_{3i}^\ell & \mathcal{H}_{2i}^\ell & \mathcal{H}_{1i}^\ell \\ \mathcal{H}_{1i}^\ell & \mathcal{H}_{3i}^\ell & \mathcal{H}_{2i}^\ell \end{pmatrix}.$$

\mathbf{H} est alors une *matrice circulante-bloc-circulante* (CBC), diagonalisable par la Transformée de Fourier Discrète 2D (TFD-2D) [Galatsanos et al., 1991]. Cette propriété permet de manipuler les produits de convolution discrets sans calculer ni stocker explicitement la matrice \mathbf{H} , dont la taille est souvent rédhibitoire. L'expression (3.8) peut ainsi être évaluée simplement dans le domaine de Fourier par

$$\hat{\mathcal{H}}_\ell \cdot \hat{\mathbf{X}}_\ell \quad (3.9)$$

où la TFD-2D est représentée par la notation usuelle $\hat{\cdot}$ et \cdot désigne le produit terme-à-terme. L'expression (3.8) est alors obtenue par TFD-2D inverse (iTFD-2D) de l'expression (3.9), similaire à son équivalent continu (2.13). Dans la pratique, les transformations de Fourier sont calculées rapidement par l'algorithme de FFT (*Fast Fourier Transform*).

Dans le cas 3D, le calcul rapide de la convolution s'effectue à l'aide de la relation (3.9) où la TFD-3D remplace la TFD-2D.

Remarque sur le calcul de la convolution directe par FFT

La convolution directe peut également être calculée par FFT sans utiliser l'approximation circulante, *i.e.* de manière *exacte* [Nowak, 2005]. Pour ce faire, les supports de l'objet et de la RIO sont étendus par bourrage de zéros sur $(2N_1 - 1) \times (2N_2 - 1)$ points avant calcul de la TFD-2D. L'image floue est alors obtenue par iTFD-2D de l'expression $\hat{\mathcal{H}}_\ell \cdot \hat{\mathbf{X}}_\ell$ puis troncature du support pour conserver $N_1 \times N_2$ points. Ceci équivaut à réécrire l'équation (3.9) avec des vecteurs de taille $(2N_1 - 1)(2N_2 - 1)$. Pour des raisons de simplicité, on conserve le modèle (3.9) de convolution circulaire tout au long de cette thèse, les adaptations algorithmiques pour traiter la convolution directe étant triviales.

3.2.3 Matrice d'observation spectrale

Chaque acquisition spectrale \mathbf{y}_ℓ étant indépendante l'une de l'autre (en négligeant le blanchiment chimique pouvant survenir au fil des observations), la matrice d'observation \mathbf{H} de l'image spectrale $\mathbf{y} = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_L\}$ est alors bloc-diagonale, où chaque bloc \mathbf{H}^ℓ est la matrice de convolution à la longueur d'onde d'émission λ_ℓ :

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{H}^1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{H}^L \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

3.3 Modèle d'observation global

Dans la pratique, deux modèles d'observation sont couramment retenus en microscopie de fluorescence [Sarder et Nehorai, 2006] :

1. Modèle poissonien :

$$\mathbf{y} \sim \mathcal{P}(\gamma[\mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{a}]) \quad (3.11)$$

où \mathbf{a} modélise l'auto-fluorescence.

2. Modèle gaussien :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{e} \quad (3.12)$$

où le terme \mathbf{e} combine toutes les sources de bruit cumulées.

En plus du rapport signal-à-bruit, le choix du modèle inclut des considérations d'ordre calculatoire afin de mener à bien les divers traitements numériques appliqués aux images. Le second modèle, bien que moins fidèle à la réalité physique du problème direct, est ainsi adopté dans de nombreuses applications. Mentionnons que certains travaux approximent le modèle (3.11) par un modèle gaussien à variance spatialement variable [Fessler, 1994, Bouman et Sauer, 1996, Bongard et al., 2011], ou bien utilisent la *Transformée d'Anscombe* pour obtenir un modèle de bruit gaussien à variance quasi-constante [Dupé et al., 2009]. Dans toute la suite, on adopte le modèle (3.12) favorisant le traitement de données de grande dimension.

Conclusion

Dans cette partie, nous avons établi un modèle direct pour la formation et l'acquisition d'images hyperspectrales en microscopie optique :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{e}$$

où \mathbf{y} désigne l'image hyperspectrale observée, \mathbf{x} l'image hyperspectrale originale et \mathbf{H} la matrice d'observation. L'objectif des parties suivantes est de traiter deux problèmes inverses à partir de ce modèle, en se plaçant dans des situations expérimentales de type « super-résolution » où le flou induit par l'appareil de mesure est non négligeable.

- Partie 2.** Nous traiterons le problème de déconvolution, consistant à estimer l'image originale \mathbf{x} à partir de la connaissance de \mathbf{y} et \mathbf{H} . Le problème est traité avec un *a priori* de douceur spatiale et spectrale de l'image à restaurer dans le chapitre 5, sous contrainte de positivité dans le chapitre 6 et en préservant les contours spatiaux de l'image dans le chapitre 7.
- Partie 3.** Une structure de mélange sera posée sur la matrice de données : $\mathbf{X} = \mathbf{S}\mathbf{A}$, où \mathbf{S} indexe les sources pures contenues dans l'image et \mathbf{A} les cartes d'abondance. La procédure de séparation de sources positives consiste à estimer \mathbf{S} et \mathbf{A} sous contrainte de positivité sur les éléments des matrices, à partir de \mathbf{Y} et \mathbf{H} . L'objectif est d'étudier l'influence de la matrice d'observation \mathbf{H} sur le modèle et de démontrer l'intérêt de la déconvolution au préalable d'une procédure de séparation.

Deuxième partie

Déconvolution d'images hyperspectrales

Introduction aux problèmes inverses

Sommaire

4.1	Moindres carrés	29
4.2	Régularisation	30
4.2.1	Troncature des valeurs singulières	30
4.2.2	Minimisation d'un critère composite	31
4.3	Régularisation de Tikhonov	32

Ce chapitre présente quelques rappels sur la résolution de problèmes inverses par minimisation d'un critère pénalisé. Pour des raisons de simplicité, la déconvolution est ici appliquée indépendamment à chaque bande spectrale. L'approche classique de régularisation de Tikhonov et le formalisme utilisé dans les chapitres suivants y sont introduit.

Remarque :

Le problème de restauration est traité dans cette partie sous l'hypothèse que l'on connaît la matrice d'observation \mathbf{H} , par mesure expérimentale ou modélisation physique de la RIO (voir partie 1). En présence de fortes aberrations, ou lorsque l'on ne connaît pas les paramètres physiques d'acquisition, il est nécessaire de traiter le problème de *déconvolution aveugle*, *i.e.* d'estimer conjointement \mathbf{H} et \mathbf{x} : voir à ce sujet [Kundur et Hatzinakos, 1996, Soulez et al., 2008a, Blanc-Féraud et al., 2010].

4.1 Moindres carrés

Considérons le modèle direct linéaire gaussien (3.12) établi dans le chapitre précédent, à une bande spectrale ℓ donnée :

$$\mathbf{y}_\ell = \mathbf{H}_\ell \mathbf{x}_\ell + \mathbf{e}_\ell. \quad (4.1)$$

où les vecteurs sont de longueur N . Le problème inverse de déconvolution consiste à estimer l'image originale \mathbf{x}_ℓ à partir de l'image observée \mathbf{y}_ℓ et de la réponse du système \mathbf{H}_ℓ , supposée connue. La technique de résolution la plus intuitive consiste à minimiser le critère des moindres carrés :

$$\mathcal{J}^{\text{MC}}(\mathbf{x}_\ell) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y}_\ell - \mathbf{H}_\ell \mathbf{x}_\ell\|_2^2 \quad (4.2)$$

où $\|\cdot\|_2$ désigne la norme vectorielle euclidienne ou L_2 (cf annexe B). \mathcal{J}^{MC} peut être interprété comme une mesure de l'adéquation du modèle d'observation aux données et le critère admet au

moins un minimum \mathbf{x}_ℓ dont l'on peut calculer une expression explicite en annulant son gradient. La solution de norme L_2 minimale s'écrit

$$\mathbf{x}_\ell = \mathbf{H}_\ell^\dagger \mathbf{y}_\ell \quad (4.3)$$

où \mathbf{H}^\dagger est la pseudo-inverse au sens de *Moore-Penrose* ou inverse généralisée de \mathbf{H}_ℓ . Si la matrice d'observation est régulière, le critère admet une solution unique correspondant simplement au *filtre inverse* (\mathbf{H}_ℓ étant carrée par construction) :

$$\mathbf{x}_\ell = \mathbf{H}_\ell^{-1} \mathbf{y}_\ell \quad (4.4)$$

où \cdot^T désigne la transposée.

On peut montrer que l'estimateur du maximum de vraisemblance correspond également au filtre inverse et que cet estimateur est sans biais à variance minimale [Richard, 2009]. Cette solution ne donne cependant pas satisfaction en raison de son instabilité numérique élevée : une faible perturbation sur les données $\delta \mathbf{y}_\ell$ entraîne une forte perturbation sur la solution $\delta \mathbf{x}_\ell = \mathbf{H}_\ell^\dagger \delta \mathbf{y}_\ell$. Ceci s'exprime quantitativement par le conditionnement de la matrice d'observation, défini par :

$$\kappa(\mathbf{H}_\ell) = \|\mathbf{H}_\ell\|_2 \|\mathbf{H}_\ell^\dagger\|_2 \geq 1 \quad (4.5)$$

où $\|\cdot\|_2$ est la norme 2 matricielle (voir annexe B). A l'aide de l'inégalité de Cauchy-Schwartz, on peut montrer que $\kappa(\mathbf{H}_\ell)$ donne une borne de l'erreur relative :

$$\frac{\|\delta \mathbf{x}_\ell\|_2 / \|\mathbf{x}_\ell\|_2}{\|\delta \mathbf{y}_\ell\|_2 / \|\mathbf{y}_\ell\|_2} \leq \kappa(\mathbf{H}_\ell) \quad (4.6)$$

Le problème est dit bien conditionné si le conditionnement de \mathbf{H}_ℓ est proche de l'unité et mal conditionné si ce dernier est grand devant l'unité. Si la matrice d'observation est régulière, son mauvais conditionnement s'explique par le support fréquentiel limité de la FTO : la restauration des composantes de hautes fréquences est extrêmement perturbée par le bruit. Dans le cas où la matrice est singulière, le nombre de conditionnement est infini. On parle alors de problème mal posé, un problème mathématique étant dit bien posé s'il vérifie les conditions de Hadamard :

1. existence d'une solution ;
2. unicité de la solution ;
3. stabilité de la solution , i.e. la solution est continue par rapport aux données : l'erreur induite sur la solution tend vers zéro quand l'erreur sur les données tend vers zéro.

Le caractère mal conditionné ou mal posé du problème de déconvolution est typique des problèmes inverses. Une solution consiste à *régulariser* le problème, c'est-à-dire à se restreindre à une certaine classe de solutions étant donné une connaissance *a priori*.

4.2 Régularisation

4.2.1 Troncature des valeurs singulières

Une première manière de régulariser le problème des moindres carrés consiste à modifier directement le conditionnement de la matrice d'observation à l'aide de sa *Décomposition en Valeurs Singulières* (SVD). En effet, le nombre de conditionnement de la matrice d'observation peut s'écrire à partir de (4.5) :

$$\kappa(\mathbf{H}_\ell) = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}} \quad (4.7)$$

où σ_{\max} et σ_{\min} sont respectivement la valeur singulière maximale et minimale de \mathbf{H}_ℓ . Ce résultat illustre la discussion précédente sur la nature mal conditionnée ou mal posée du problème : soit la matrice est de rang plein mais mal conditionnée en raison des plus petites valeurs singulières, soit la matrice est de rang déficient et le problème est mal posé en raison des valeurs singulières nulles. Dans les deux cas, la technique de régularisation consiste à tronquer la SVD à partir d'un certain ordre afin d'éliminer les valeurs singulières problématiques.

4.2.2 Minimisation d'un critère composite

Une seconde manière de régulariser le problème est d'ajouter un terme de pénalité au critère des moindres carrés, ce qui revient à imposer une contrainte sur \mathbf{x}_ℓ ; c'est l'approche retenue dans cette thèse. On peut typiquement supposer que les images de bio-capteurs bactériens sont homogènes par morceaux, c'est-à-dire constituées de régions présentant une certaine régularité, séparées par des frontières ou discontinuités franches. L'idée est ainsi de pénaliser d'une certaine manière les hautes fréquences spatiales. En toute généralité, le critère pénalisé s'écrit :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}_\ell) = \mathcal{J}^{\text{MC}}(\mathbf{x}_\ell) + \frac{\mu_s}{2} \phi(\mathbf{x}_\ell) \quad (4.8)$$

où \mathcal{J}^{MC} est le critère des moindres carrés, $\mu_s \geq 0$ est le *paramètre de régularisation* et ϕ est la *fonctionnelle de régularisation*. Pour $\mu_s \rightarrow 0$, la solution est celle du filtre inverse ; pour $\mu_s \rightarrow \infty$, le critère conduit essentiellement à minimiser $\phi(\mathbf{x}_\ell)$. La méthode peut s'interpréter comme un estimateur bayésien (cf annexe C), ou comme le lagrangien du problème d'optimisation contraint

$$\min_{\mathbf{x}_\ell} \mathcal{J}^{\text{MC}}(\mathbf{x}_\ell) \text{ s.c. } \phi(\mathbf{x}_\ell) \leq \epsilon \quad (4.9)$$

pour une certaine valeur $\epsilon > 0$ [Afonso et al., 2010, Zibulevsky et Elad, 2010].

La fonctionnelle de régularisation est classiquement construite à partir d'approximations des dérivées spatiales de l'image. Cette approche peut être mise en œuvre en combinant des opérateurs de différence verticaux et horizontaux [Idier et Blanc-Féraud, 2001], ou encore à l'aide d'un filtre laplacien :

$$\mathcal{D}_\ell = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

analogue à une dérivée seconde de l'image. La convolution 2D par l'opérateur laplacien \mathcal{D}_ℓ peut s'exprimer sous forme matricielle $\mathbf{D}_\ell \mathbf{x}_\ell$, où \mathbf{D}_ℓ est la matrice de convolution 2D de taille $N \times N$, de structure circulante-bloc-circulante (CBC). La fonctionnelle de régularisation s'écrit alors

$$\phi(\mathbf{x}_\ell) = \sum_{n=1}^N \varphi(\{\mathbf{D}_\ell \mathbf{x}_\ell\}_n) \quad (4.11)$$

où $\{\mathbf{D}_\ell \mathbf{x}_\ell\}_n$ est le n -ième élément du produit $\mathbf{D}_\ell \mathbf{x}_\ell$. La fonction φ est appelée *potentiel* et son choix conditionne fortement la qualité de la restauration. En pratique, cette fonction vérifie les propriétés suivantes pour tout u réel [Labat, 2006] :

1. positivité : $\varphi(u) \geq 0$;
2. $\varphi(u) = 0$ ssi $u = 0$;
3. parité : $\varphi(u) = \varphi(-u)$;
4. croissance sur \mathbb{R}^+ .

Dans cette thèse, les potentiels considérés possèdent également la propriété de convexité. En revanche, ils peuvent être différentiables ou non.

4.3 Régularisation de Tikhonov

L'approche de Tikhonov consiste à utiliser un potentiel quadratique $\varphi(u) = u^2$, correspondant à la norme L_2 ; le critère \mathcal{J} associé est dit $L_2 - L_2$ car les termes d'adéquation aux données et de régularisation sont tous deux quadratiques. Si \mathbf{H}_ℓ est de rang plein ou si l'intersection des noyaux de \mathbf{H}_ℓ et \mathbf{D}_ℓ est nulle, \mathcal{J} est strictement convexe et possède de ce fait un minimum global unique. Le calcul de l'estimée se résume alors à l'inversion du système linéaire obtenu en annulant le gradient du critère :

$$\mathbf{x}_\ell = (\mathbf{H}_\ell^T \mathbf{H}_\ell + \mu_s \mathbf{D}_\ell^T \mathbf{D}_\ell)^{-1} \mathbf{H}_\ell^T \mathbf{y}_\ell \quad (4.12)$$

Comme indiqué dans la section 3.2.2, la solution se calcule aisément dans le domaine spectral [Galatsanos et Chin, 1989] :

$$\hat{\mathbf{X}}_\ell = (\hat{\mathcal{H}}_\ell^* \cdot \hat{\mathbf{Y}}_\ell) / (\hat{\mathcal{H}}_\ell^* \cdot \hat{\mathcal{H}}_\ell + \mu_s \hat{\mathcal{D}}_\ell^* \cdot \hat{\mathcal{D}}_\ell) \quad (4.13)$$

où \cdot^* désigne le conjugué et \cdot et $/$ représentent respectivement le produit et la division terme-à-terme. (4.13) s'interprète comme le filtrage des données dégradées par la fonction de transfert $\hat{\mathcal{H}}_\ell^* / (\hat{\mathcal{H}}_\ell^* \cdot \hat{\mathcal{H}}_\ell + \mu_s \hat{\mathcal{D}}_\ell^* \cdot \hat{\mathcal{D}}_\ell)$. Cette solution s'apparente ainsi au *filtrage de Wiener*, dont la fonction de transfert est donnée par $\hat{\mathcal{H}}_\ell^* / (\hat{\mathcal{H}}_\ell^* \cdot \hat{\mathcal{H}}_\ell + S_e / S_x)$ où S_e et S_x désignent respectivement les densités spectrales de puissance moyennes du bruit et de l'image originale.

Le filtrage de Tikhonov permet de restaurer la pile d'images hyperspectrales en appliquant l'équation (4.13) dans chaque bande spectrale : la méthode constitue l'**Algorithme 1**, présenté en table 4.1. Le principal inconvénient de cette technique est de négliger l'information présente entre les bandes spectrales : l'intensité de l'image en un pixel donné est censée varier continûment en fonction de la longueur d'onde. Cette information *a priori* de continuité spectrale est utile pour régulariser le problème de déconvolution d'image hyperspectrale, et devrait intuitivement permettre de diminuer la régularisation spatiale. Dans le chapitre suivant, nous proposons d'étendre l'approche de calcul présentée à la prise en compte d'une régularisation spectrale, en conservant son caractère rapide dans le domaine de Fourier illustré en figure 4.1.

<p>Données: images \mathbf{y}_ℓ, \mathcal{H}_ℓ et \mathcal{D}_ℓ, pour $\ell = 1, \dots, L$; fixer $\mu_s > 0$; Initialiser $\mathbf{x} = \mathbf{0}$; pour $\ell = 1, \dots, L$ faire calculer $\hat{\mathbf{Y}}_\ell$, $\hat{\mathcal{H}}_\ell$ et $\hat{\mathcal{D}}_\ell$ par FFT-2D ; calculer $\hat{\mathbf{X}}_\ell$ à l'aide de (4.13) ; calculer \mathbf{X}_ℓ par iFFT-2D ; fin Résultat: image restaurée $\mathbf{X} = \{\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_L\}$ Algorithme 1: Restauration d'images spectrales avec régularisation spatiale de Tikhonov.</p>
--

TABLE 4.1

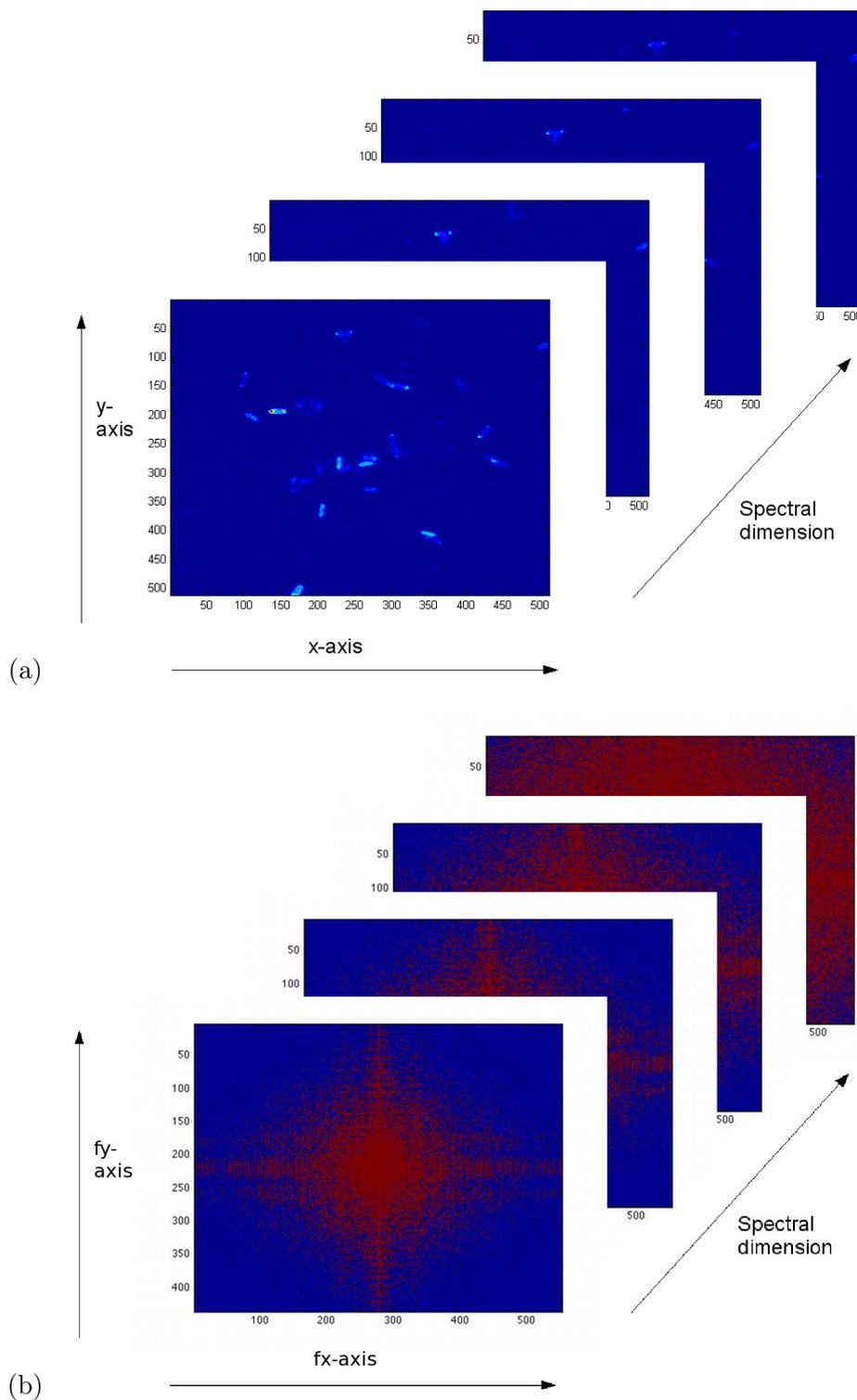


FIGURE 4.1 – (a) Image hyperspectrale acquise à quatre longueurs d'ondes. (b) Illustration de l'image dans le domaine spatial de Fourier : les TF sont effectuées par rapport aux variables spatiales, mais pas par rapport à λ .

Déconvolution hyperspectrale rapide

Ce chapitre est une adaptation des articles [C1,N1].

Sommaire

5.1	Formulation du problème	35
5.1.1	Régularisation spatiale	36
5.1.2	Régularisation spectrale	36
5.2	Résolution dans le domaine de Fourier	37
5.2.1	Réécriture du problème	37
5.2.2	Résolution explicite	38
5.3	Algorithme proposé	38
5.4	Résultats expérimentaux	39
5.4.1	Sélection des hyperparamètres	39
5.4.2	Performances de la méthode	39

Le problème de restauration d'images fait l'objet d'une littérature extrêmement riche depuis plusieurs décennies : citons [Richardson, 1972, Hunt et Kubler, 1984, Blake et Zisserman, 1987, Geman et Yang, 1995, Fessler, 1994, Giovannelli et Coulais, 2005, Demoment et Idier, 2001, Beck et Teboulle, 2009, Bertero et al., 2009, Combettes et Pesquet, 2011], avec applications à l'imagerie de fluorescence [Dey et al., 2004, Sarder et Nehorai, 2006, Vonesch et al., 2006, Figueiredo et Bioucas-Dias, 2010, Bongard et al., 2011] et l'imagerie multispectrale et hyperspectrale [Galatsanos et al., 1991, Soulez et al., 2008b, Zhang et al., 2009, Plaza et al., 2011]. Cependant, à notre connaissance peu de travaux permettent de prendre en compte l'information présente entre les bandes spectrales de l'image de manière rapide. La motivation de notre approche est ainsi de proposer une structure de calcul efficace permettant de résoudre ce problème. Cette méthode sera étendue dans les chapitres suivants en considérant des informations sur la positivité et la régularité spatiale de l'image.

5.1 Formulation du problème

Dans le chapitre précédent, nous avons vu que la minimisation d'un critère composite incorporant des informations *a priori* de régularité spatiale permet de régulariser le problème de restauration. Dans ce chapitre, nous imposons une régularisation *spectrale* : les intensités d'un pixel à deux bandes spectrales adjacentes devraient être similaires [Rodet et al., 2008, Zhang et al., 2009, Bongard et al., 2011, Henrot et al., 2011]. Le critère pénalisé à minimiser s'écrit

ainsi comme la somme de l'adéquation aux données et des termes de régularisation spatiale et spectrale :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\mu_s}{2} \|\mathbf{D}_s \mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\mu_\lambda}{2} \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{x}\|_2^2 \quad (5.1)$$

où μ_s et μ_λ sont respectivement les paramètres de régularisation spatiale et spectrale (communément appelés *hyperparamètres*), et \mathbf{D}_s et \mathbf{D}_λ sont les opérateurs matriciels de régularisation correspondants, de taille $NL \times NL$. Le choix d'imposer des régularisations spatiales et spectrales séparables [Soulez et al., 2008b] permettra d'imposer des *a priori* de continuité différents dans les deux domaines, comme développé dans le chapitre 7. Le problème peut ainsi s'exprimer comme un problème d'optimisation sans contrainte :

$$\min_{\mathbf{x}} \mathcal{J}(\mathbf{x}). \quad (5.2)$$

En toute généralité, la méthode que nous allons exposer est applicable à tout opérateur de régularisation basé sur un noyau de convolution. Pour fixer les idées, on construit \mathbf{D}_s et \mathbf{D}_λ de la manière suivante.

5.1.1 Régularisation spatiale

A chaque bande spectrale ℓ , la régularisation spectrale est appliquée à l'aide d'un noyau de convolution \mathcal{D}_ℓ représentant un opérateur de différence. On choisit le filtre laplacien :

$$\mathcal{D}_\ell = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Chaque noyau \mathcal{D}_ℓ est associé à une matrice de convolution 2D notée \mathbf{D}_ℓ , de structure circulante-bloc-circulante (CBC) de taille $N \times N^3$. La construction de \mathbf{D}_ℓ à partir de \mathcal{D}_ℓ est exposée dans l'annexe A et similaire à celle de la matrice d'observation \mathbf{H}_ℓ dans chaque bande (voir section 3.2.2). La matrice \mathbf{D}_s de régularisation spatiale est alors bloc-diagonale, de taille $NL \times NL$:

$$\mathbf{D}_s = \begin{bmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{D}_L \end{bmatrix}. \quad (5.4)$$

5.1.2 Régularisation spectrale

La régularisation spectrale s'effectue entre les différentes bandes spectrales, et la matrice \mathbf{D}_λ n'est donc pas bloc-diagonale. Pour pénaliser de larges différences d'intensité d'une bande à l'autre, on peut utiliser un filtre dérivateur du premier ordre appliqué dans la direction spectrale :

$$\delta_\lambda = (1, -1).$$

3. Dans le cas de la convolution directe, cette matrice est en réalité de taille $2N - 1 \times 2N - 1$, correspondant à un bourrage de zéros dans le domaine spatial : voir section 3.2.2. Pour simplifier, on considérera des matrices de convolution de taille $N \times N$ en imposant implicitement une convolution circulaire, les calculs étant valables dans les deux cas.

Ce noyau de convolution est associé à la matrice de convolution 1D notée $\mathbf{\Delta}_\lambda$, de taille $(L-1) \times L$ (voir annexe A) :

$$\mathbf{\Delta}_\lambda = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

La matrice de régularisation spectrale \mathbf{D}_λ de taille $N(L-1) \times NL$ s'écrit finalement

$$\mathbf{D}_\lambda = \mathbf{\Delta}_\lambda \otimes \mathbf{I}_N \quad (5.6)$$

où \mathbf{I}_N est la matrice identité de taille $N \times N$ et la notation \otimes désigne le *produit de Kronecker*, qui consiste à remplacer les scalaires 0 et 1 de l'équation (5.5) par les matrices $\mathbf{0}$ et \mathbf{I}_N , respectivement.

5.2 Résolution dans le domaine de Fourier

Le problème (5.2) admet une solution explicite, donnée par

$$\mathbf{x} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \mu_s \mathbf{D}_s^T \mathbf{D}_s + \mu_\lambda \mathbf{D}_\lambda^T \mathbf{D}_\lambda)^{-1} \mathbf{H}^T \mathbf{y}. \quad (5.7)$$

Le calcul pratique de (5.7) se heurte à la taille importante des matrices mises en jeu : ainsi pour une image de taille 100×100 acquise à 100 bandes spectrales, la matrice $\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \mu_s \mathbf{D}_s^T \mathbf{D}_s + \mu_\lambda \mathbf{D}_\lambda^T \mathbf{D}_\lambda$ de taille $10^6 \times 10^6$ ne peut pas être inversée facilement en toute généralité. Pour contourner cette difficulté, on propose de calculer (5.7) dans le domaine de Fourier. Notons que des critères similaires sont minimisés dans [Rodet et al., 2008, Bongard et al., 2011] par des algorithmes à directions de descente [Nocedal et Wright, 2006].

5.2.1 Réécriture du problème

Le critère (5.1) peut être réécrit en fonction à l'aide des produits de convolution :

$$\mathcal{J}(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^L \left(\|\mathbf{Y}_\ell - \mathcal{H}_\ell *_{2D} \mathbf{X}_\ell\|_F^2 + \mu_s \|\mathcal{D}_\ell *_{2D} \mathbf{X}_\ell\|_F^2 + \mu_\lambda \|\{\delta_\lambda *_{1D} \mathbf{X}\}_\ell\|_F^2 \right) \quad (5.8)$$

où $\|\cdot\|_F$ est la norme de Frobenius (voir annexe B), $*_{2D}$ désigne comme précédemment le produit de convolution 2D, effectué dans chaque plan spatial et $*_{1D}$ représente le produit de convolution 1D, effectué dans la dimension spectrale. On remarque que pour une longueur d'onde λ_ℓ fixée, ce dernier terme est simplement donné par :

$$\{\delta_\lambda *_{1D} \mathbf{X}\}_\ell = \mathbf{X}_{\ell+1} - \mathbf{X}_\ell \quad (5.9)$$

ce qui permet de réécrire le terme de régularisation spectral :

$$\|\{\delta_\lambda *_{1D} \mathbf{X}\}_\ell\|_F^2 = \sum_{\ell=1}^{L-1} \|\mathbf{X}_{\ell+1} - \mathbf{X}_\ell\|_F^2. \quad (5.10)$$

Le critère (5.8) est ainsi fonction de ses composantes sur les différentes bandes spectrales $\{\mathbf{X}_\ell, \ell = 1 \dots L\}$. A l'aide du Théorème de Parseval, il s'exprime dans le domaine (spatial) de Fourier :

$$\mathcal{J}'(\hat{\mathbf{X}}) = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^L \left(\|\hat{\mathbf{Y}}_\ell - \hat{\mathcal{H}}_\ell \cdot \hat{\mathbf{X}}_\ell\|_F^2 + \mu_s \|\hat{\mathcal{D}}_\ell \cdot \hat{\mathbf{X}}_\ell\|_F^2 \right) + \frac{\mu_\lambda}{2} \sum_{\ell=1}^{L-1} \|\hat{\mathbf{X}}_{\ell+1} - \hat{\mathbf{X}}_\ell\|_F^2 \quad (5.11)$$

avec $\mathcal{J}(\mathbf{X}) = \mathcal{J}'(\hat{\mathbf{X}})$. Le problème

$$\min_{\hat{\mathbf{X}}} \mathcal{J}'(\hat{\mathbf{X}}) \quad (5.12)$$

doit alors être résolu en imposant la symétrie hermitienne de la solution, afin de s'assurer que les images \mathbf{X}_ℓ sont réelles.

5.2.2 Résolution explicite

L'expression (5.11) de la fonction objectif suscite plusieurs commentaires :

- Chaque norme au carré de l'équation (5.11) est une somme sur les fréquences spatiales de l'image $\mathbf{f} = (f_1, f_2)$. Le critère (5.11) est *séparable* vis-à-vis des N fréquences.
- La solution étant à symétrie hermitienne, il suffit de minimiser le critère $\mathcal{J}'(\hat{\mathbf{X}})$ sur la moitié du plan des fréquences spatiales, par exemple le demi-plan droit ($f_1 \geq 0$).

Par conséquent, le problème (5.12) se réécrit comme $\lceil N/2 \rceil$ problèmes indépendants (la notation $\lceil \cdot \rceil$ désignant la partie entière par excès), chacun étant associé à une fréquence spatiale \mathbf{f} particulière du demi-plan droit :

$$\min_{\mathbf{x}_f} \{ \|\mathbf{y}_f - \Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})\mathbf{x}_f\|_2^2 + \mu_s \|\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f})\mathbf{x}_f\|_2^2 + \mu_\lambda \|\Delta_\lambda \mathbf{x}_f\|_2^2 \} \quad (5.13)$$

où les vecteurs à valeurs complexes \mathbf{x}_f , \mathbf{y}_f possèdent L éléments et les matrices diagonales complexes $\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})$ et $\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f})$ de taille $L \times L$ sont définis par les relations suivantes :

$$\mathbf{x}_f \triangleq \{\hat{\mathbf{X}}_\ell(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\} \quad (5.14)$$

$$\mathbf{y}_f \triangleq \{\hat{\mathbf{Y}}_\ell(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\} \quad (5.15)$$

$$\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f}) \triangleq \text{diag}\{\hat{\mathcal{H}}_\ell(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\} \quad (5.16)$$

$$\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f}) \triangleq \text{diag}\{\hat{\mathcal{D}}_\ell(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\} \quad (5.17)$$

et on rappelle que Δ_λ est la matrice de convolution 1D construite à partir du noyau δ_λ (équation (5.5)). En d'autres termes, on a remplacé l'inversion d'une matrice $NL \times NL$ par $\lceil N/2 \rceil$ inversions de matrices $L \times L$. Pour chaque fréquence \mathbf{f} du demi-plan droit, la solution du problème (5.13) associé se calcule par

$$\mathbf{x}_f = [\Delta_{\mathcal{H}}^*(\mathbf{f})\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f}) + \mu_s \Delta_{\mathcal{D}}^*(\mathbf{f})\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f}) + \mu_\lambda \Delta_\lambda^T \Delta_\lambda]^{-1} \Delta_{\mathcal{H}}^*(\mathbf{f})\mathbf{y}_f \quad (5.18)$$

où la matrice à inverser est réelle, de taille $L \times L$; le choix du noyau $\delta_\lambda = (1, -1)$ lui confère en outre une structure tridiagonale pouvant être exploitée pour une résolution plus rapide [Press et al., 2007].

5.3 Algorithme proposé

L'algorithme proposé, désigné par **Algorithme 2**, est présenté en table 5.1. La complexité d'une TFD-2D implémentée par FFT est $\mathcal{O}(N \log_2 N)$ et celle d'une inversion de taille $L \times L$ est de $\mathcal{O}(L^3)$ en utilisant la méthode du pivot de Gauss. Dans le cas d'un système tridiagonal, cette dernière se réduit à $\mathcal{O}(L)$ en utilisant l'algorithme de Crout [Press et al., 2007]. La complexité de l'algorithme global est dominée par l'un ou l'autre des termes selon les dimensions de l'image : généralement, $L \ll N$ sauf pour certaines images hyperspectrales où l'on n'acquiert que peu de pixels.

```

Données: images  $\mathbf{y}_\ell$ ,  $\mathcal{H}_\ell$  et  $\mathcal{D}_\ell$ , pour  $\ell = 1, \dots, L$ ; matrice  $\Delta_\lambda$ ;
fixer  $\mu_s > 0$  et  $\mu_\lambda > 0$ ;
Initialiser  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ ;
pour  $\ell = 1, \dots, L$  faire
|   calculer  $\hat{\mathbf{Y}}_\ell$ ,  $\hat{\mathcal{H}}_\ell$  et  $\hat{\mathcal{D}}_\ell$  par FFT-2D;
fin
pour  $\mathbf{f} = (f_1 \geq 0, f_2)$  faire
|   indexer  $\mathbf{y}_\mathbf{f}$  (5.15),  $\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})$  (5.16) et  $\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f})$  (5.17);
|   calculer  $\mathbf{x}_\mathbf{f}$  par (5.18);
fin
pour  $\mathbf{f} = (f_1 < 0, f_2)$  faire
|    $\mathbf{x}_\mathbf{f} = \mathbf{x}_{-\mathbf{f}}^*$ ;
fin
pour  $\ell = 1, \dots, L$  faire
|   calculer  $\mathbf{X}_\ell$  par iFFT-2D;
fin
Résultat: image restaurée  $\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L\}$ 

```

Algorithme 2: Restauration d'images spectrales avec régularisations spatiale et spectrale de Tikhonov.

TABLE 5.1

5.4 Résultats expérimentaux

5.4.1 Sélection des hyperparamètres

Lorsque le problème ne comprend qu'un seul terme de régularisation, plusieurs méthodes permettent de sélectionner automatiquement l'hyperparamètre associé : mentionnons la *courbe en L* et la *validation croisée* [Idier, 2001]. Ces techniques n'ont pas d'équivalent immédiat ou rapide pour régler plusieurs hyperparamètres. L'approche classique consiste alors à retenir un ensemble discret de valeurs pour μ_s et μ_λ : dans tout le manuscrit, on adopte une grille 2D logarithmique de valeurs variant dans l'intervalle $[10^{-4}, 10^4]$. La qualité de la restauration est évaluée pour chaque couple d'hyperparamètres possible, de manière empirique. On note que cette évaluation peut être effectuée à l'aide d'une *fonction de qualité sans référence* [Zhu et Milanfar, 2010]. Cette approche est notamment utilisée dans les travaux de l'équipe de Laure Blanc-Féraud [Ben Hadj et al., 2013]; voir aussi [Almeida et Figueiredo, 2013b] où les auteurs évaluent la blancheur spectrale des résidus et [Vonesch et al., 2008, Eldar, 2009, Giryes et al., 2011] proposant une méthode basée sur les *estimateurs de risque*.

5.4.2 Performances de la méthode

Dans cette section, on cherche à évaluer le gain apporté par le terme de régularisation spectrale à la restauration. La métrique choisie est l'*Erreur Quadratique Moyenne* (EQM) entre l'image originale et l'image restaurée :

$$\text{EQM} = \frac{1}{N} \|\mathbf{x}^{\text{originale}} - \mathbf{x}^{\text{restaurée}}\|_2^2. \quad (5.19)$$

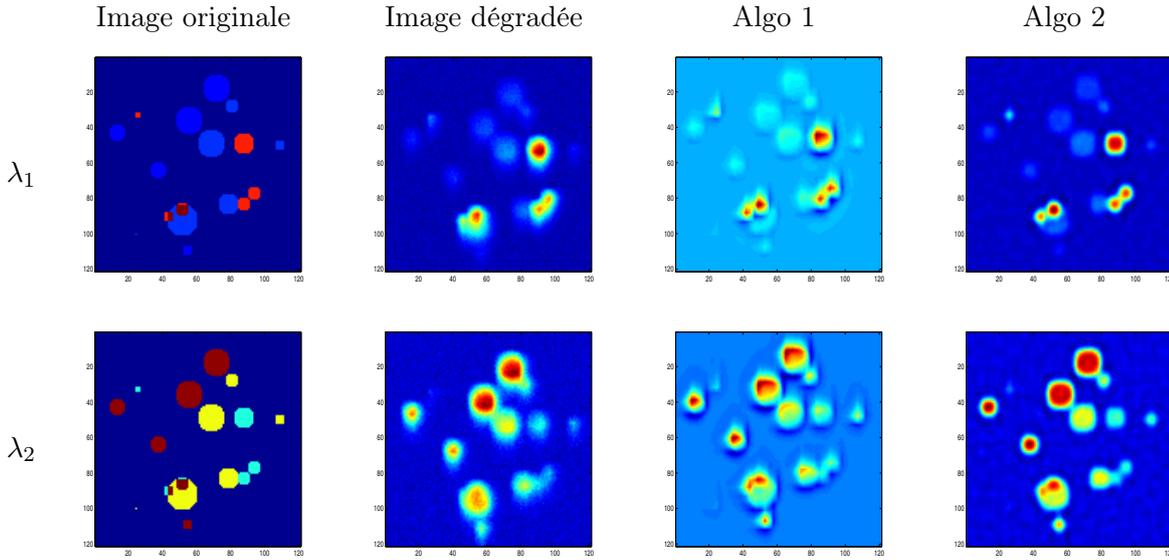


FIGURE 5.1 – Images synthétiques de biocapteurs bactériens. L'échelle de couleurs du bleu au rouge correspond à l'intensité des pixels. Les deux lignes représentent la même scène hyperspectrale observée à deux bandes distinctes λ_1 et λ_2 proches. Les images restaurées correspondent aux hyperparamètres conduisant à la valeur minimale de l'EQM parmi tous les hyperparamètres testés.

Pour mener à bien ce calcul, il est nécessaire de travailler avec des images hyperspectrales synthétiques. Dans un premier temps, l'image originale est générée par un modèle de mélange

$$\mathbf{X}_\ell(i, j) = \mathbf{a}_1(i, j)\mathbf{s}_1(\ell) + \mathbf{a}_2(i, j)\mathbf{s}_2(\ell) + \mathbf{a}_3(i, j)\mathbf{s}_3(\ell) \quad (5.20)$$

associant 3 spectres de fluorescence $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \mathbf{s}_3$ échantillonnés sur $L = 16$ bandes spectrales à un ensemble de cartes d'abondance $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ représentant schématiquement des bactéries modélisées par des disques de centre et rayon aléatoires, sur 10^6 pixels. Les images obtenues sont proches d'images réelles de biocapteurs bactériens dispersés dans une matrice minérale de type sol [Sous-sen et al., 2009]. Les données observées sont alors simulées à l'aide du modèle convolutif gaussien du chapitre 3 de manière à reproduire le processus d'acquisition d'un microscope confocal dont la RIO est calculée par approximation gaussienne pour un SNR de 15 dB. Des exemples d'images résultantes sont données sur les deux premières colonnes de la figure 5.1.

Les données sont restaurées par les algorithmes 1 et 2 et l'on conserve les résultats correspondant au meilleur couple d'hyperparamètres dans chaque cas. Les images sont représentées sur les deux dernières colonnes de la figure 5.1 et les valeurs d'EQM données dans le tableau 5.2.

	EQM	Temps
Image originale, image observée	5205	-
Image originale, image estimée par l'algo 1	1414	90 sec.
Image originale, image estimée par l'algo 2	1097	160 sec.

TABLE 5.2 – Erreur quadratique moyenne avant et après restauration.

On observe que la prise en compte de la régularisation spectrale permet de diminuer l'EQM

de 79% par rapport à l'image dégradée et de 22.5% par rapport à la solution de l'algorithme 1. Cette augmentation de performance doit être mise en perspective avec l'augmentation du coût de calcul introduit par la méthode, les temps de calculs respectifs étant obtenus sur un processeur Intel Core 2 Duo 2.4 Ghz avec une RAM de 4 Go. Le temps de calcul de l'Algorithme 2 est dominé par la résolution du système (5.18) : une implémentation parallèle plus rapide pourrait tirer profit de la séparabilité du critère et éviter les calculs redondants lors de l'inversion, par exemple à l'aide de processeurs graphiques [Plaza et al., 2011, Legendre et al., 2013].

Les performances de l'algorithme peuvent également être évaluées de manière visuelle : voir figure 5.1. Il apparaît que la régularisation spectrale permet d'éliminer certains artéfacts associés à l'estimée de l'Algorithme 1, notamment autour des contours des bactéries. L'intérêt véritable de la méthode semble cependant intervenir dans le cas d'un recouvrement spatial de plusieurs bactéries. La prise en compte de l'information présente dans les bandes adjacentes permet de différencier des structures spatiales proches ou se chevauchant et ainsi d'obtenir une meilleure résolution spatiale.

6

Restauration sous contrainte de positivité

Ce chapitre est une adaptation de l'article [R1].

Sommaire

6.1	Introduction	43
6.2	Problème contraint	44
6.2.1	Pénalité quadratique	44
6.2.2	Lagrangien augmenté	45
6.3	Résultats expérimentaux	48
6.3.1	Données synthétiques $2D + \lambda$	48
6.3.2	Simulation d'images de microscopie en fluorescence $3D + \lambda$	51

6.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons proposé une méthode rapide de restauration d'images hyperspectrales basée sur la minimisation efficace dans le domaine de Fourier d'une fonction objectif composite. Le critère étant composé de termes quadratiques d'adéquation aux données et de régularisation, il appartient à la famille des estimateurs linéaires tels que le filtre de Wiener ou le filtre inverse avec une régularisation de Tikhonov [Galatsanos et Chin, 1989, Galatsanos et al., 1991]. Un inconvénient de cette classe de méthodes réside dans leur incapacité à restaurer les composantes haute-fréquences de l'image originale au delà de la bande passante de la RIO (problème du *cône manquant* [Pankajakshan, 2010]). Typiquement, ce problème induit des artefacts autour des contours dans l'image, provoquant l'apparition de pixels à valeur négative [Shah, 2006]. Physiquement, une telle solution est inacceptable car l'image est acquise par comptage de photons et la valeur de chaque pixel est donc positive. Une procédure de restauration rigoureuse doit donc imposer une contrainte de positivité sur la solution.

Dans [Giovannelli et Coulais, 2005], les auteurs utilisent la méthode du lagrangien augmenté pour résoudre le problème de restauration contraint sur des images 2D; une autre méthode rapide en 2D emploie la méthode des directions alternées des multiplicateurs [Afonso et al., 2010]. D'autres méthodes populaires sont l'algorithme ISRA (*Image Space Reconstruction Algorithm*) [Daube-Witherspoon et Muehllehner, 1986] dans le cas d'un bruit gaussien et l'algorithme de Richardson-Lucy [Richardson, 1972] pour un bruit poissonien. Ces techniques peuvent être

appliquées « telles quelles » sur des images hyperspectrales, mais ne conduisent pas à des calculs rapides [Benvenuto et al., 2010]. Dans ce chapitre, nous proposons de résoudre le problème de restauration avec contrainte de positivité en utilisant la structure de calcul rapide proposée précédemment.

6.2 Problème contraint

On cherche à résoudre le problème

$$\min_{\mathbf{x}} \mathcal{J}(\mathbf{x}) \text{ s.c. } \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (6.1)$$

A la différence du problème non contraint du chapitre précédent, le problème (6.1) ne possède pas de solution explicite et doit être résolu par les techniques itératives d'optimisation sous contraintes. Celles-ci sont généralement classifiées comme appartenant à trois familles : les méthodes de point intérieur, de contraintes actives et de pénalité extérieure [Nocedal et Wright, 2006]. Cette dernière classe comprend notamment la *pénalité quadratique* qui est fréquemment employée en raison de sa simplicité [Nocedal et Wright, 2006, chapter 17], et la technique du lagrangien augmenté qui en est une amélioration. Ces méthodes se prêtent à une adaptation de notre structure de calcul rapide. Pour ce faire, on remplace dans un premier temps les contraintes d'inégalité $\{x_i \geq 0, i = 1 \dots NL\}$ par des contraintes d'égalité

$$\{x_i - p_i = 0, p_i \geq 0, i = 1 \dots NL\}$$

où \mathbf{p} est une variable auxiliaire vectorielle de même longueur que \mathbf{x} .

6.2.1 Pénalité quadratique

Le principe de la méthode est de remplacer les contraintes par des termes de pénalité quadratique dans la fonction objectif. Le problème original (6.1) est remplacé par le problème

$$\min_{\mathbf{x}, \mathbf{p}} \mathcal{K}(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \xi) \text{ s.c. } \mathbf{p} \geq \mathbf{0} \quad (6.2)$$

où la nouvelle fonction objectif s'écrit

$$\mathcal{K}(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \xi) = \mathcal{J}(\mathbf{x}) + \frac{\xi}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{p}\|_2^2. \quad (6.3)$$

Quand ξ tend vers l'infini, les entrées du vecteur \mathbf{x} tendent vers celles du vecteur \mathbf{p} et la contrainte $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ est satisfaite asymptotiquement. Le problème auxiliaire est non contraint par rapport à \mathbf{x} , transférant la contrainte sur la variable auxiliaire : $\mathbf{p} \geq \mathbf{0}$. L'objectif \mathcal{K} étant séparable vis-à-vis des variables $\{p_i, i = 1 \dots NL\}$, la contrainte est ainsi bien plus facile à gérer car s'appliquant explicitement. La minimisation de \mathcal{K} par rapport à (\mathbf{x}, \mathbf{p}) s'effectue en alternant minimisation non contrainte par rapport à \mathbf{x} , minimisation contrainte par rapport à \mathbf{p} et augmentation du poids ξ . Ces trois étapes sont alternées jusqu'à ce qu'un critère d'arrêt soit satisfait.

Dans ce qui suit, l'exposant k se réfère à la dernière itération effectuée et la notation $\mathcal{K}(\mathbf{x}|\mathbf{p}^k; \xi^k)$ signifie que l'on considère \mathcal{K} comme une fonction de \mathbf{x} à \mathbf{p}^k et ξ^k fixés.

Minimisation non contrainte de $\mathcal{K}(\mathbf{x}|\mathbf{p}^k, \xi^k)$

La solution explicite du sous-problème est donnée par

$$\mathbf{x}^{k+1} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \mu_s \mathbf{D}_s^T \mathbf{D}_s + \mu_\lambda \mathbf{D}_\lambda^T \mathbf{D}_\lambda + \xi^k \mathbf{I}_{NL})^{-1} (\mathbf{H}^T \mathbf{y} + \xi^k \mathbf{p}^k) \quad (6.4)$$

où \mathbf{I}_{NL} est la matrice identité de taille $NL \times NL$. En adaptant la méthode exposée au chapitre précédent, on calcule pour chaque fréquence \mathbf{f} du demi-plan droit :

$$\mathbf{x}_f^{k+1} = [\Delta_{\mathcal{H}}^*(\mathbf{f}) \Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f}) + \mu_s \Delta_{\mathcal{D}}^*(\mathbf{f}) \Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f}) + \mu_\lambda \Delta_\lambda^T \Delta_\lambda + \xi^k \mathbf{I}_L]^{-1} (\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})^* \mathbf{y}_f + \xi^k \mathbf{p}_f^k) \quad (6.5)$$

où \mathbf{p}_f^k collecte les valeurs de la TFD $\hat{\mathbf{P}}^k$ à la fréquence spatiale \mathbf{f} :

$$\mathbf{p}_f^k \triangleq \{\hat{\mathbf{P}}_\ell^k(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\} \quad (6.6)$$

et \mathbf{y}_f , $\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})$, $\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f})$ et Δ_λ sont définis respectivement par (5.15), (5.16), (5.17) et (5.5). Les valeurs manquantes de $\hat{\mathbf{X}}$ sont ensuite complétées par symétrie hermitienne dans chaque bande spectrale.

Minimisation contrainte de $\mathcal{K}(\mathbf{p}|\mathbf{x}^{k+1}, \xi^k)$

L'objectif ne contient qu'un seul terme impliquant la variable \mathbf{p} . Le caractère séparable du critère vis-à-vis des variables $\{p_i, i = 1 \dots NL\}$ conduit à la forme explicite

$$\mathbf{p}^{k+1} = \max(\mathbf{0}, \mathbf{x}^{k+1}) \quad (6.7)$$

où l'opération de seuillage est appliquée terme-à-terme.

Mise à jour de ξ

Augmenter le poids ξ à chaque itération permet de s'assurer que l'algorithme converge vers le minimum contraint du critère \mathcal{J} . De nombreux schémas de mise-à-jour permettent de garantir la convergence, le plus simple étant une règle linéaire $\xi^{(k+1)} = \beta \xi^{(k)}$ pour toute valeur $\beta > 1$. Le paramètre β influence la vitesse de convergence et son choix est lié au coût de la minimisation de \mathcal{K} par rapport à \mathbf{x} : ici, le calcul de (6.4) est explicite et l'on peut choisir une valeur plus élevée telle que $\beta = 10$ [Nocedal et Wright, 2006, p. 493].

Algorithme proposé

L'algorithme proposé, désigné par **Algorithme 3**, est donné en table 6.1.

6.2.2 Lagrangien augmenté

La méthode de pénalité quadratique ne permet en théorie de satisfaire les contraintes qu'asymptotiquement (pour $\xi \rightarrow \infty$). La méthode du *lagrangien augmenté* permet de régler ce problème en introduisant explicitement des estimées des multiplicateurs de Lagrange dans la fonction objectif [Nocedal et Wright, 2006] :

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{u}; \xi) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 + \frac{\mu_s}{2} \|\mathbf{D}_s \mathbf{x}\|^2 + \frac{\mu_\lambda}{2} \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{x}\|^2 + \frac{\xi}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{p} + \mathbf{u}\|^2 - \frac{\xi}{2} \|\mathbf{u}\|^2 \quad (6.8)$$

où ξ est le paramètre de barrière et \mathbf{u} sont les *multiplicateurs de Lagrange réduits* (divisés par ξ). Intuitivement, le multiplicateur u_i est lié à la « sensibilité » de l'optimum \mathbf{x} à la présence de la contrainte $x_i = p_i$ [Nocedal et Wright, 2006, p. 349].

A nouveau, on a recours à une stratégie de minimisation alternée de \mathcal{L} par rapport à \mathbf{x} et \mathbf{p} , la mise à jour de \mathbf{u} correspondant à une maximisation du problème dual [Boyd et al., 2011].

<p>Données: images \mathbf{y}_ℓ, \mathcal{H}_ℓ et \mathcal{D}_ℓ, pour $\ell = 1, \dots, L$; matrice $\mathbf{\Delta}_\lambda$; fixer $\mu_s > 0$, $\mu_\lambda > 0$, $\beta > 1$, $\tau < 0$, $\epsilon > 0$; Initialiser $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\mathbf{p} = \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$, $\xi = 1$; pour $\ell = 1, \dots, L$ faire calculer $\hat{\mathbf{Y}}_\ell$, $\hat{\mathcal{H}}_\ell$ et $\hat{\mathcal{D}}_\ell$ par FFT-2D ; fin tant que $(\min(\mathbf{x}) < \tau) \cup (\ \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\ _2 > \epsilon)$ faire pour $\mathbf{f} = (f_1 \geq 0, f_2)$ faire indiquer $\mathbf{y}_\mathbf{f}$ (5.15), $\mathbf{\Delta}_\mathcal{H}(\mathbf{f})$ (5.16), $\mathbf{\Delta}_\mathcal{D}(\mathbf{f})$ (5.17) et $\mathbf{p}_\mathbf{f}$ (6.6); calculer $\mathbf{x}_\mathbf{f}$ par (6.5); fin pour $\mathbf{f} = (f_1 < 0, f_2)$ faire $\mathbf{x}_\mathbf{f} = \mathbf{x}_{-\mathbf{f}}^*$; fin pour $\ell = 1, \dots, L$ faire calculer \mathbf{X}_ℓ par iFFT-2D ; calculer \mathbf{P}_ℓ par (6.7) ; calculer $\hat{\mathbf{P}}_\ell$ par FFT-2D ; fin Mettre à jour $\xi := \beta\xi$; fin Résultat: image restaurée \mathbf{x}</p> <p>Algorithme 3: Restauration d'images spectrales avec régularisations spatiale et spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par pénalité quadratique.</p>

TABLE 6.1

Minimisation non contrainte de $\mathcal{L}(\mathbf{x}|\mathbf{p}^k, \mathbf{u}^k, \xi^k)$

La solution explicite du sous-problème est donnée par

$$\mathbf{x}^{k+1} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \mu_s \mathbf{D}_s^T \mathbf{D}_s + \mu_\lambda \mathbf{D}_\lambda^T \mathbf{D}_\lambda + \xi^k \mathbf{I}_{NL})^{-1} (\mathbf{H}^T \mathbf{y} + \xi^k (\mathbf{p}^k - \mathbf{u}^k)) \quad (6.9)$$

et se calcule dans le domaine de Fourier, pour chaque fréquence \mathbf{f} du demi-plan droit :

$$\mathbf{x}_\mathbf{f}^{k+1} = (\mathbf{\Delta}_\mathcal{H}^*(\mathbf{f}) \mathbf{\Delta}_\mathcal{H}(\mathbf{f}) + \mu_s \mathbf{\Delta}_\mathcal{D}^*(\mathbf{f}) \mathbf{\Delta}_\mathcal{D}(\mathbf{f}) + \mu_\lambda \mathbf{\Delta}_\lambda^T \mathbf{\Delta}_\lambda + \xi^k \mathbf{I}_L)^{-1} (\mathbf{\Delta}_\mathcal{H}(\mathbf{f})^* \mathbf{y}_\mathbf{f} + \xi^k (\mathbf{p}_\mathbf{f}^k - \mathbf{u}_\mathbf{f}^k)) \quad (6.10)$$

où $\mathbf{u}_\mathbf{f}^k$ collecte les valeurs de $\hat{\mathbf{U}}^k$ à la fréquence spatiale \mathbf{f} :

$$\mathbf{u}_\mathbf{f}^k \triangleq \{\hat{\mathbf{U}}_\ell^k(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\}. \quad (6.11)$$

Minimisation contrainte de $\mathcal{L}(\mathbf{p}|\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{u}^k, \xi)$

L'objectif ne contient qu'un seul terme impliquant la variable \mathbf{p} et le caractère séparable du critère vis-à-vis des variables $\{p_i, i = 1 \dots NL\}$ conduit à la forme explicite

$$\mathbf{p}^{k+1} = \max(\mathbf{0}, \mathbf{x}^{k+1} + \mathbf{u}^k). \quad (6.12)$$

Mise à jour des multiplicateurs de Lagrange \mathbf{u}

La mise à jour est donnée par [Boyd et al., 2011]

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{p}^{k+1}. \quad (6.13)$$

Mise à jour du paramètre ξ

Contrairement au paramètre de la pénalité quadratique, l'algorithme peut converger en fixant la valeur de ξ ; cependant une règle de mise à jour linéaire $\xi^{(k+1)} = \beta \xi^{(k)}$ où $\beta \geq 1$ peut augmenter la vitesse de convergence [Nocedal et Wright, 2006, Boyd et al., 2011].

Algorithme proposé

L'algorithme proposé, désigné par **Algorithme 4**, est présenté en table 6.2.

<p>Données: images \mathbf{y}_ℓ, \mathcal{H}_ℓ et \mathcal{D}_ℓ, pour $\ell = 1, \dots, L$; matrice Δ_λ ; fixer $\mu_s > 0$, $\mu_\lambda > 0$, $\beta \geq 1$, $\tau < 0$, $\epsilon > 0$; Initialiser $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\mathbf{p} = \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$, $\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$, $\xi = 1$; pour $\ell = 1, \dots, L$ faire calculer $\hat{\mathbf{Y}}_\ell$, $\hat{\mathcal{H}}_\ell$, $\hat{\mathcal{D}}_\ell$ par FFT-2D ; fin tant que $(\min(\mathbf{x}) < \tau) \cup (\ \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\ _2 > \epsilon)$ faire pour $\mathbf{f} = (f_1 \geq 0, f_2)$ faire indiquer $\mathbf{y}_\mathbf{f}$ (5.15), $\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})$ (5.16), $\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f})$ (5.17), $\mathbf{p}_\mathbf{f}$ (6.6) et $\mathbf{u}_\mathbf{f}$ (6.11) ; calculer $\mathbf{x}_\mathbf{f}$ par (6.5) ; fin pour $\mathbf{f} = (f_1 < 0, f_2)$ faire $\mathbf{x}_\mathbf{f} = \mathbf{x}_{-\mathbf{f}}^*$; fin pour $\ell = 1, \dots, L$ faire calculer \mathbf{X}_ℓ par iFFT-2D ; calculer \mathbf{P}_ℓ par (6.12) ; calculer $\hat{\mathbf{P}}_\ell$ par FFT-2D ; calculer \mathbf{U}_ℓ par (6.13) ; calculer $\hat{\mathbf{U}}_\ell$ par FFT-2D ; fin Mettre à jour $\xi := \beta \xi$; fin Résultat: image restaurée \mathbf{x}</p> <p>Algorithme 4: Restauration d'images spectrales avec régularisations spatiale et spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par lagrangien augmenté.</p>
--

TABLE 6.2

6.3 Résultats expérimentaux

6.3.1 Données synthétiques $2D + \lambda$

Les performances de l'algorithme sont évaluées sur des données synthétiques. Afin de simuler des images multispectrales présentant une régularité spectrale, on utilise un modèle de mélange linéaire pour générer des objets sur un fond uniforme. Dans ce modèle, le spectre d'un pixel (i, j) est donné par

$$\mathbf{X}_\ell(i, j) = a_1(i, j)\mathbf{s}_1(\ell) + a_2(i, j)\mathbf{s}_2(\ell) \quad (6.14)$$

où \mathbf{s}_1 est une source spectrale obtenue en échantillonnant le segment $[0, 1]$ sur L points et \mathbf{s}_2 est obtenu en retournant \mathbf{s}_1 dans la direction horizontale. Les cartes d'abondance des sources a_1 et a_2 sont des motifs arbitraires de taille $N_1 \times N_1$ (avec $N_1 = \sqrt{N}$) et les objets générés apparaissent ainsi en fondu lorsque l'on visualise les bandes spectrales de $\ell = 1$ à L . Le flou est simulé en convoluant l'image à chaque bande par un disque d'Airy de taille $N_1 \times N_1$, généré en calculant la TFD-2D d'un disque dont le rayon dépend arbitrairement de la bande ℓ . Les images sont ensuite dégradées par un bruit additif gaussien blanc de manière à obtenir un SNR de 15dB. La pile d'images résultante de taille $N_1 \times N_1 \times L$ ne représente pas une scène réaliste, mais fournit un jeu de données multispectrales permettant d'évaluer les performances des algorithmes en temps de calcul et qualité de restauration.

Comparaison des algorithmes 3 et 4

En toute généralité, le lagrangien augmenté permet d'améliorer le conditionnement des sous-problèmes de minimisation. Dans la pratique, les deux méthodes présentent des performances similaires sur notre problème, en particulier en adoptant une règle identique de mise à jour linéaire du paramètre ξ . Ceci peut s'expliquer par deux raisons : d'une part, on impose un critère d'arrêt afin d'effectuer un nombre fini d'itérations. La possibilité de mauvais conditionnement associée aux valeurs de ξ extrêmement élevées est ainsi réduite. D'autre part, on dispose de formes explicites des solutions des sous-problèmes. Ce raisonnement empirique est confirmé par toutes nos expériences numériques pour des valeurs arbitraires des hyperparamètres μ_s, μ_λ et du paramètre β . La figure 6.1 (a) illustre ce point en comparant l'évolution du critère \mathcal{J} au fil des itérations pour les deux techniques, où μ_s, μ_λ sont choisis aléatoirement et $\beta = 2$: on obtient deux courbes quasiment identiques. Le respect des contraintes est évalué en figure 6.1 (b) par l'évolution du terme $\min(\mathbf{x}, \mathbf{0})^2$ au fil des itérations. Bien que la méthode du lagrangien augmenté présente un taux de décroissance de ce terme supérieur à celui de la pénalité quadratique, les valeurs négatives sont très faibles dans les deux cas après quelques itérations. Visuellement, les images obtenues pratiquement identiques à chaque itération.

Les algorithmes 3 et 4 offrant des performances similaires, on utilise dans la suite la pénalité quadratique par simplicité d'écriture.

Performance de la méthode proposée

L'objectif est de comparer les performances de l'algorithme 3 avec l'algorithme 2 d'une part, afin d'évaluer le gain de la contrainte de positivité, et avec les méthodes classiques d'optimisation sous contraintes d'autre part. La positivité de la solution est communément imposée à l'aide de méthodes de points intérieurs par fonctions barrières [Nocedal et Wright, 2006, Chouzenoux, 2010]. Nous utilisons deux implémentations MATLAB de cette technique, utilisant respectivement une formulation matricielle, plus lente (fonction *quadprog*) et une fonction non spécifique destinée à la programmation quadratique mais permettant la résolution dans le domaine de

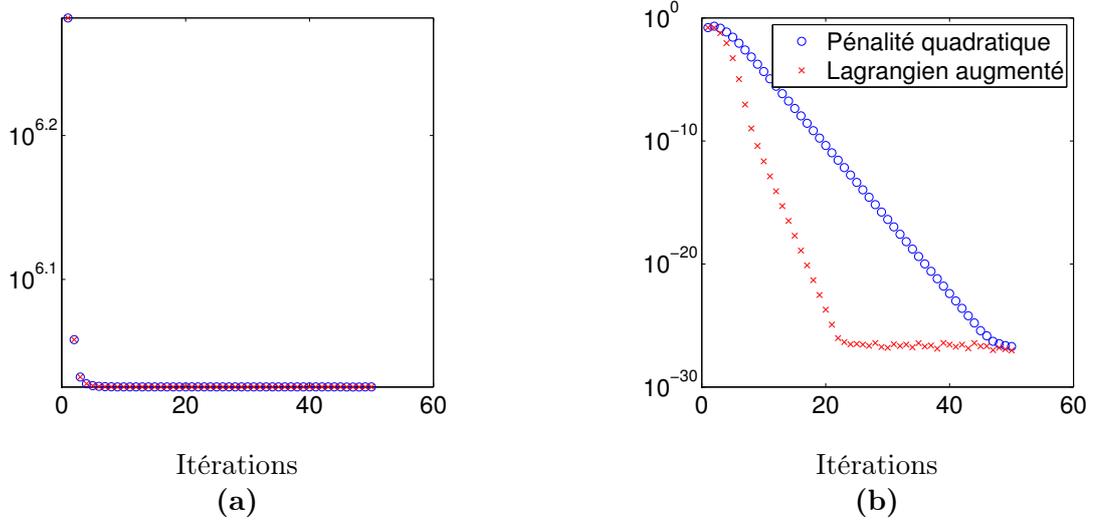


FIGURE 6.1 – Performance des méthodes de pénalité quadratique et lagrangien augmenté. (a) Evolution en échelle logarithmique du critère \mathcal{J} en fonction des itérations. (b) Evolution en échelle logarithmique du terme $\min(\mathbf{x}, \mathbf{0})^2$ en fonction des itérations.

N_1	L	Variables	Algo 3	<i>fmincon</i>	<i>quadprog</i>	Algo 2
25	3	1 875	0.6 s	510.9 s	1.6 s	0.1 s
50	5	12 500	1.9 s	3863.6 s	11.6 s	0.2 s
100	10	100 000	9.2 s	/	/	1.0 s

TABLE 6.3 – Comparaison des temps de calculs entre l’algorithme 3, méthode *fmincon*, méthode *quadprog*, estimée non contrainte

Fourier (*fmincon*). Les temps de calcul sont également comparés à ceux obtenus par estimation non contrainte, à l’aide de l’algorithme proposé dans le chapitre précédent dans le tableau 5.1. Nous sélectionnons empiriquement la paire d’hyperparamètres (μ_s, μ_λ) et donnons les résultats obtenus sur un processeur 2.4 Ghz Intel Core 2 Duo avec une RAM de 4Go.

L’estimée non contrainte présente une moins bonne performance en terme d’EQM, ce qui justifie la prise en compte de la contrainte de positivité dans la restauration de l’image. Cette différence de performance est illustrée en figure 6.2. Comme attendu, nous observons que les trois méthodes d’optimisation contrainte convergent vers la même estimée, pour des valeurs similaires de la fonction objectif et de l’erreur de reconstruction. En revanche, les résultats du tableau 6.3 indiquent que l’algorithme proposé est nettement plus performant que les méthodes standard en terme de temps de calcul et de stockage. La raison principale expliquant cette différence est le caractère non quadratique de la fonction objectif incorporant une barrière logarithmique. Le gradient obtenu est donc non linéaire et la minimisation du critère par rapport à \mathbf{x} est alors nécessairement itérative, e.g. accomplie par une méthode de type quasi-Newton. Lorsque la taille des données augmente, la forme explicite de la solution à chaque itération permet de réduire considérablement les temps de calcul. Ainsi, dans la troisième expérience impliquant 10^5 variables, *fmincon* a été manuellement stoppée après 2 heures tandis que *quadprog* n’a pu fonctionner, les matrices mises en jeu étant trop larges pour être stockées.

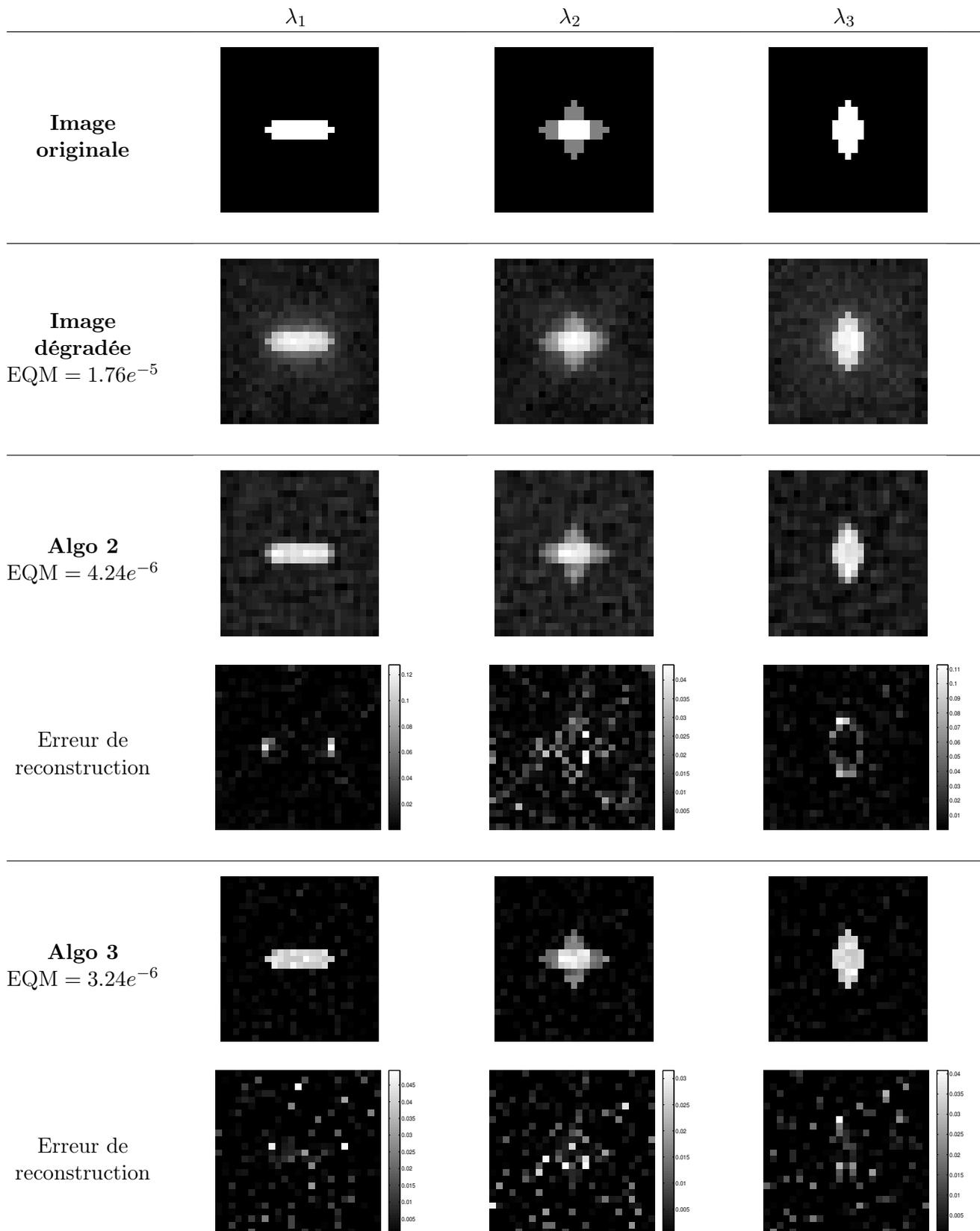


FIGURE 6.2 – Données spectrales synthétiques de taille $25 \times 25 \times 3$: images originales, dégradées et restaurées sans (au milieu) et avec (en bas) contrainte de positivité. Chaque colonne correspond à une bande spectrale différente. La valeur maximale de l'image est normalisée à l'unité.

Comparaison avec une méthode optimisée de points intérieurs

Dans le cadre d'un travail en collaboration avec Saïd Moussaoui, maître de conférences à l'Institut de Recherche en Communications et Cybernétique de Nantes (IRCCyN, UMR 6597), nous avons également comparé notre méthode avec un algorithme primal-dual de points intérieurs [Chouzenoux et al., 2011]. Proposée à l'origine pour l'estimation pénalisée de cartes d'abondances en imagerie hyperspectrale, cette méthode intègre une contrainte de positivité et d'additivité. Seule la contrainte de positivité, assurée par une barrière logarithmique à la frontière du domaine admissible, est retenue pour notre problème. L'approche primale-duale consiste à estimer conjointement la solution et les multiplicateurs de Lagrange associés à la contrainte. A chaque itération de l'algorithme, il est nécessaire de résoudre un système linéaire dont la taille est fonction de la taille des images, obtenu à partir des conditions d'optimalité de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) [Nocedal et Wright, 2006]. Ce système est résolu de manière approchée par un algorithme de gradient conjugué linéaire [Van der Vorst, 1992]. Les temps de calculs obtenus par les deux méthodes sur notre problème sont comparables⁴.

Sensibilité au choix des hyperparamètres

Le problème ouvert de sélection de la paire d'hyperparamètres est ici rendu plus difficile par leur interaction avec la contrainte de positivité : on a à présent trois paramètres à régler. Dans cette section, on dispose de l'image originale et on sélectionne l'EQM comme critère de choix. On attribue à chaque paramètre l'intervalle de valeurs $[10^{-4}, 10^4]$ discrétisé sur une grille 2D logarithmique. On restaure l'image à l'aide de l'algorithme proposé pour chaque point de la grille (μ_s, μ_λ) et calcule l'EQM correspondant. Les meilleurs résultats obtenus sont présentés en figure 6.2 pour une pile d'images de taille $25 \times 25 \times 3$.

Nous observons que la meilleure image restaurée (au sens de l'EQM) sous contraintes est obtenue pour des valeurs plus faibles des hyperparamètres (μ_s, μ_λ) en comparaison avec la meilleure image restaurée sans contraintes. En d'autres termes, imposer la contrainte de positivité permet de diminuer le lissage requis pour régulariser la solution [Bardsley et al., 2008]. Visuellement, l'estimée contrainte présente moins d'artefacts (voir figure 6.2), et possède une plus faible erreur de reconstruction. Ceci est confirmé par l'absence de structure dans les images d'erreur pour l'estimée contrainte, à la différence de l'image restaurée sans contrainte présentant de fortes oscillations autour des contours de l'image.

6.3.2 Simulation d'images de microscopie en fluorescence $3D + \lambda$

Dans cette section, on teste les performances de l'algorithme sur des données synthétiques générées de manière à ressembler à des images acquises en microscopie en fluorescence. L'idée est de donner un ordre de grandeur des temps de calcul sur des données 4D pour une implémentation MATLAB. Pour ce faire, on simule des cartes d'abondance 3D de taille $25\mu m \times 25\mu m \times 5\mu m$ modélisant la répartition spatiale aléatoire de biocapteurs bactériens à l'aide de sphères de rayon $1\mu m$, produisant des cubes de données de taille $255 \times 255 \times 5$. La RIO du microscope est générée d'après le modèle de Stokseth d'un microscope plein-champ présenté dans le chapitre 2, pour un objectif 63X/1.4 à huile et un pixel de taille $0.1\mu_s m$ dans le plan de la caméra CCD. L'image est floutée par convolution avec la RIO dans chaque bande spectrale et corrompue par un bruit additif gaussien blanc de manière à obtenir un SNR de 15dB, le SNR étant ainsi suffisamment

4. Les performances de l'algorithme primal-dual pourraient être encore améliorées en incorporant une stratégie de préconditionnement adaptée.

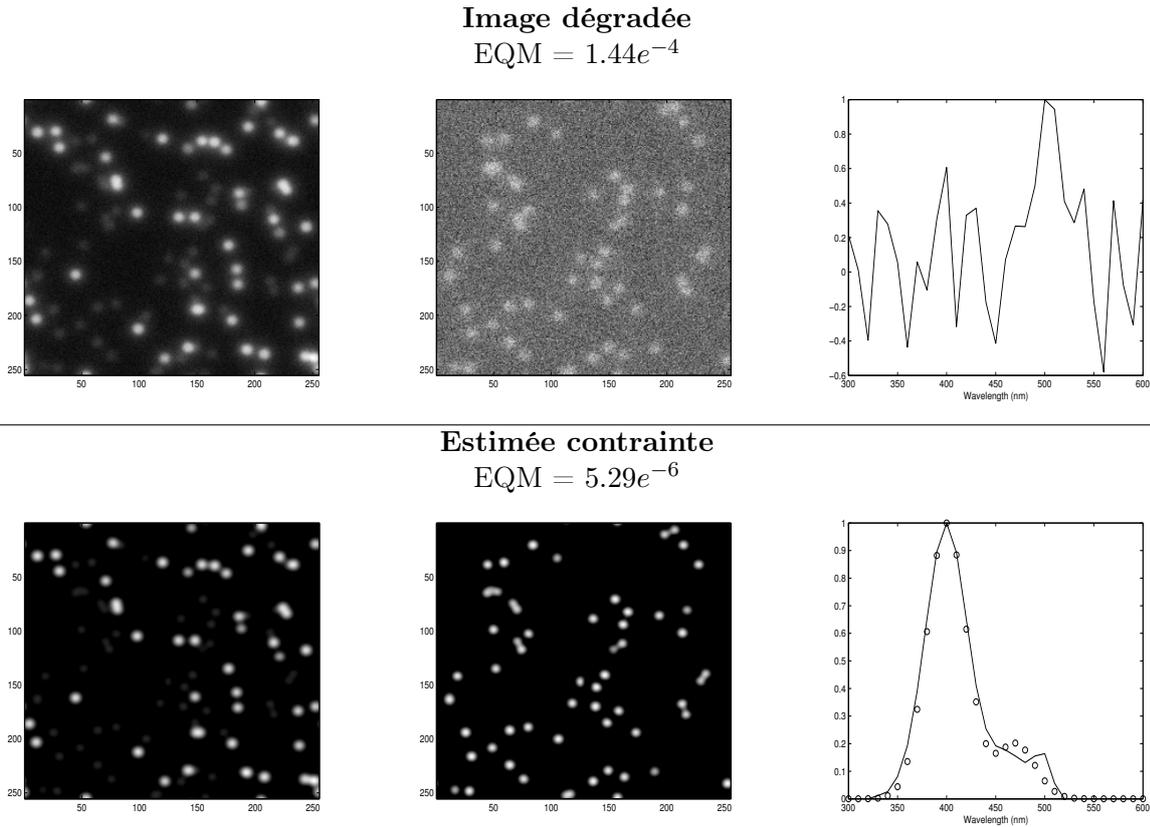


FIGURE 6.3 – Images spectrales synthétiques de taille $255 \times 255 \times 5 \times 30$ représentant un jeu de données acquis en microscopie en fluorescence. Les deux premières colonnes correspondent chacune à une bande spectrale. La troisième colonne présente le spectre d'un même pixel pur généré par la source \mathbf{u}_1 : sur l'image dégradée (première ligne) ; sur l'image restaurée par l'algorithme (deuxième ligne), en comparaison avec le profil spectral de \mathbf{u}_1 (ronds).

élevé pour modéliser le processus de comptage de photons par une distribution gaussienne (voir chapitre 2). Les résultats sont présentés en figure 6.3.

Les temps de calcul sur les tenseurs $3D + \lambda$ sont de l'ordre de 15 min pour 10 itérations de l'algorithme. La procédure de déconvolution permet de diminuer l'EQM de 77%, améliorant considérablement la résolution de l'image. La figure 6.3 démontre clairement l'intérêt de la régularisation spectrale : les plans images souffrant d'une sévère dégradation due à la RIO du microscope plein-champ pouvant ainsi être restaurés en utilisant l'information des bandes spectrales adjacentes.

Restauration avec préservation des contours

Ce chapitre est une adaptation des articles [C2,N2].

Sommaire

7.1	Introduction	53
7.1.1	Régularisation par la norme L_1	53
7.1.2	Régularisation de Huber	54
7.1.3	Formulation du problème	55
7.2	Optimisation	55
7.2.1	Positivité	55
7.2.2	Méthode semi-quadratique	56
7.2.3	Méthode proximale / ADMM	57
7.3	Résultats expérimentaux	59
7.3.1	Préservation des contours	59
7.3.2	Éléments de convergence empirique de l'algorithme	60

7.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons montré comment combiner notre méthode rapide de déconvolution d'images hyperspectrales avec une contrainte de positivité sur la solution. L'approche consistait à rechercher le minimiseur contraint d'un critère pénalisé, comprenant un terme quadratique d'adéquation aux données et des termes quadratiques de régularisation. La régularisation spatiale de Tikhonov considérée favorisait la restauration d'images spatialement lisses. Nous proposons ici d'adapter cette méthode à des régularisations convexes non quadratiques telles que la norme L_1 ou la fonction de *Huber*, de manière à préserver les contours dans l'image.

7.1.1 Régularisation par la norme L_1

Le problème de minimisation d'un coût non différentiable a fait l'objet d'une abondante littérature au cours de cette dernière décennie [Combettes et Pesquet, 2007, Beck et Teboulle, 2009, Zibulevsky et Elad, 2010], notamment pour résoudre le problème du LASSO présent dans

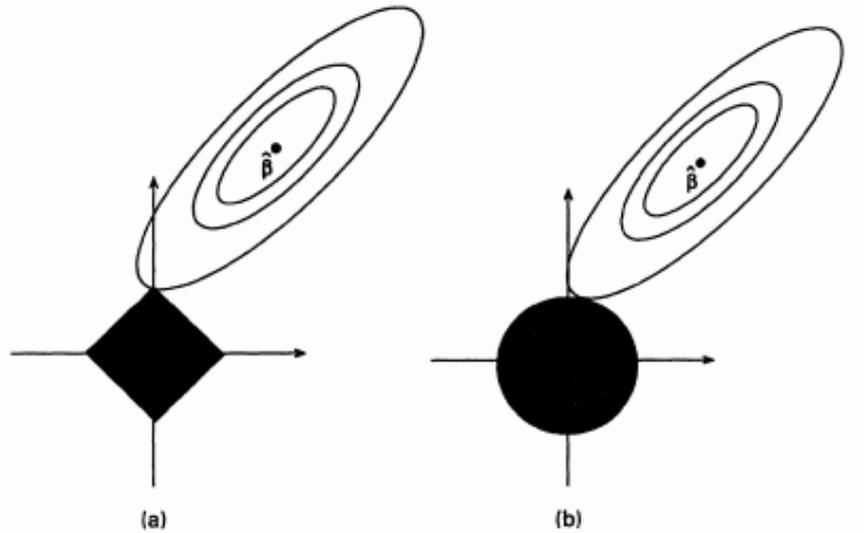


FIGURE 7.1 – Illustration géométrique des régularisations par les normes L_1 et L_2 pour la minimisation d'un critère quadratique. Source : [Tibshirani, 1996].

de nombreuses applications (e.g. régression linéaire, débruitage, restauration) [Boyd et al., 2011]. Sous sa forme générique, le problème s'écrit :

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 + \mu \|\mathbf{x}\|_1 \quad (7.1)$$

et diffère de l'approche de Tikhonov par le choix de la norme L_1 , *i.e.* le potentiel est la valeur absolue. Cette norme favorise la parcimonie de la solution [Bach et al., 2012] : intuitivement, la norme L_1 est la norme convexe la plus proche de la pseudo-norme L_0 égale au nombre d'éléments non nuls de \mathbf{x} . Cette propriété est illustrée de manière géométrique sur la figure 7.1 (a). Le problème est vu comme la minimisation du terme $\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2$ sous la contrainte $\|\mathbf{x}\|_1 \leq \epsilon$ pour une certaine valeur $\epsilon > 0$. Le domaine admissible est représenté en noir et les ellipses correspondent aux lignes de niveau du terme d'adéquation aux données. La solution contrainte est obtenue pour la première ellipse intersectant le domaine admissible, *i.e.* sur un sommet du carré situé sur un axe, annulant une coordonnée. *A contrario*, la solution obtenue pour une régularisation L_2 (figure 7.1 (b)) n'est pas parcimonieuse car le point obtenu se situe en dehors des axes.

Dans notre cas, la norme choisie pour le terme de régularisation spatial ne porte pas directement sur l'image mais sur son laplacien. Le choix de la norme L_1 favorise donc la parcimonie de la dérivée seconde de l'image, soit des images « affines par morceaux ».

7.1.2 Régularisation de Huber

Certains auteurs considèrent qu'un *a priori* plus adapté aux images naturelles permet des variations douces au sein des différentes régions qui les composent. Le terme de régularisation fait alors appel à la *fonction de Huber* :

$$\phi_\eta(t) = \begin{cases} \frac{t^2}{2\eta} + \frac{\eta}{2} & \text{pour } |t| < \eta \\ |t| & \text{sinon ;} \end{cases} \quad (7.2)$$

dont la forme est contrôlée par le paramètre η strictement positif : lorsque celui-ci tend vers zéro, elle se rapproche de la valeur absolue (coût L_1 favorisant une image constante par morceaux) tandis qu'à l'infini, elle est quadratique (coût L_2 favorisant une image lisse).

7.1.3 Formulation du problème

Comme dans le chapitre précédent, on formule le problème dans le cadre de l'optimisation sous contrainte :

$$\min_{\mathbf{x}} \mathcal{J}(\mathbf{x}) \text{ s.c. } \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \quad (7.3)$$

et le critère \mathcal{J} modifié pour préserver les contours de l'image s'écrit de manière générique :

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\mu_s}{2} \sum_i \phi_\eta(\{\mathbf{D}_s \mathbf{x}\}_i) + \frac{\mu_\lambda}{2} \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{x}\|_2^2 \quad (7.4)$$

où $\{\mathbf{D}_s \mathbf{x}\}_i$ désigne le i -ème élément du vecteur $\mathbf{D}_s \mathbf{x}$, et le potentiel ϕ_η choisi est la fonction de Huber, dite L_2L_1 . On discutera dans la suite de l'application des méthodes à la valeur absolue.

7.2 Optimisation

On cherche ici à adapter la structure de calcul présentée dans les chapitres précédents à la minimisation d'un coût convexe non quadratique. Parmi les techniques applicables, nous retenons

- les méthodes d'*approximation quadratique majorante*, également appelées *semi-quadratiques* (SQ) dans le domaine de la restauration d'images [Idier, 2001, Allain et al., 2006];
- les méthodes *proximales* [Chaux et al., 2007], couplées à l'utilisation d'un algorithme *Alternating Direction Method of Multipliers* (ADMM) [Boyd et al., 2011],

qui ont été appliquées à la restauration d'images avec succès [Geman et Reynolds, 1992] [Geman et Yang, 1995, Figueiredo et Bioucas-Dias, 2010, Pustelnik, 2010, Combettes et Pesquet, 2011].

7.2.1 Positivité

On choisit comme précédemment d'imposer la positivité de la solution à l'aide de la méthode de pénalité extérieure quadratique (voir chapitre 5), en minimisant le critère augmenté

$$\mathcal{K}(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \xi) = \mathcal{J}(\mathbf{x}) + \frac{\xi}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{p}\|_2^2 \quad (7.5)$$

où la contrainte de positivité est transférée à la variable auxiliaire \mathbf{p} . La procédure d'optimisation alterne une itération de minimisation de \mathcal{K} par rapport à \mathbf{x} puis à \mathbf{p} :

$$\mathbf{x}^{k+1} \approx \arg \min_{\mathbf{x}} \mathcal{K}(\mathbf{x} | \mathbf{p}^k; \xi^k) \quad (7.6)$$

$$\mathbf{p}^{k+1} = \max(\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{0}) \quad (7.7)$$

jusqu'à convergence et l'augmentation graduelle du poids ξ pour pénaliser de plus en plus sévèrement le non-respect des contraintes [Nocedal et Wright, 2006]⁵.

5. Contrairement au chapitre précédent, la résolution de (7.6) est itérative. De manière à conserver le sens physique de la variable \mathbf{p} (seuillage de \mathbf{x}), nous faisons le choix d'appliquer (7.7) après chaque itération de la résolution de (7.6), ce qui revient à tronquer la résolution de (7.6) après une itération (voir tables 7.1 et 7.2).

7.2.2 Méthode semi-quadratique

Les méthodes SQ ont d'abord été adaptées à la restauration d'images par Geman et Reynolds (GR) [Geman et Reynolds, 1992] et Geman et Yang (GY) [Geman et Yang, 1995], dont les approches peuvent être respectivement mises en œuvre par les algorithmes ARTUR et LEGEND [Charbonnier et al., 1994, Charbonnier et al., 1997]. Dans la suite, nous adoptons l'approche GY car GR ne se prête pas à l'utilisation de notre structure de calcul ; nous reviendrons plus amplement sur ce choix ci-dessous. L'idée principale consiste à introduire un ensemble de variables auxiliaires \mathbf{b} et à remplacer $\mathcal{K}(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \xi)$ par un critère augmenté $\mathcal{Q}(\mathbf{x}, \mathbf{b}, \mathbf{p}; \xi)$, où l'on substitue au terme de régularisation spatiale un majorant quadratique :

$$\mathcal{Q}(\mathbf{x}, \mathbf{b}, \mathbf{p}; \xi) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\mu_\lambda}{2} \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\mu_s}{2} \left(\frac{1}{2} \|\mathbf{D}_s \mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 + \sum_i \psi_\eta(b_i) \right) + \frac{\xi}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{p}\|_2^2 \quad (7.8)$$

où ψ_η est la fonction convexe conjuguée de ϕ_η [Idier, 2001]; son calcul explicite n'est pas nécessaire par la suite. Le critère $\mathcal{Q}(\mathbf{x}, \mathbf{b}; \mathbf{p}; \xi)$ est dit semi-quadratique car il est quadratique par rapport à \mathbf{x} à \mathbf{b} fixé, mais non quadratique par rapport à \mathbf{b} à \mathbf{x} fixé. La minimisation de $\mathcal{K}(\mathbf{x}; \mathbf{p}, \xi)$ est alors équivalente à la minimisation alternée de $\mathcal{Q}(\mathbf{x}, \mathbf{b}; \mathbf{p}, \xi)$.

Minimisation de $\mathcal{Q}(\mathbf{x}|\mathbf{b}^k, \mathbf{p}^k; \xi^k)$

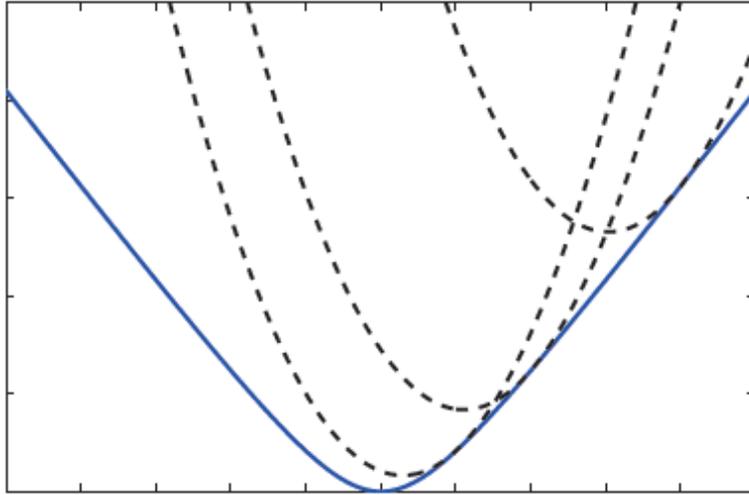


FIGURE 7.2 – Approximation quadratique majorante de Geman et Yang (pointillés) du critère (trait continu bleu) : la courbure est fixe au cours des itérations. Source : [Chouzenoux, 2010].

La solution de ce problème quadratique est donnée par

$$\mathbf{x}^{k+1} = \left(\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \frac{\mu_s}{2} \mathbf{D}_s^T \mathbf{D}_s + \mu_\lambda \mathbf{D}_\lambda^T \mathbf{D}_\lambda + \xi^k \mathbf{I}_{NL} \right)^{-1} \left(\mathbf{H}^T \mathbf{y} + \frac{\mu_s}{2} \mathbf{D}_s^T \mathbf{b}^k + \xi^k \mathbf{p}^k \right) \quad (7.9)$$

et se calcule dans le domaine de Fourier, pour chaque fréquence \mathbf{f} du demi-plan droit :

$$\mathbf{x}_f^{k+1} = \left[\Delta_{\mathcal{H}}^*(\mathbf{f}) \Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f}) + \frac{\mu_s}{2} \Delta_{\mathcal{D}}^*(\mathbf{f}) \Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f}) + \mu_\lambda \Delta_{\lambda}^T \Delta_{\lambda} + \xi^k \mathbf{I}_L \right]^{-1} \left(\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})^* \mathbf{y}_f + \frac{\mu_s}{2} \Delta_{\mathcal{D}}^* \mathbf{b}_f^k + \xi^k \mathbf{p}_f^k \right) \quad (7.10)$$

où \mathbf{b}_f^k collecte les valeurs de $\hat{\mathbf{B}}^k$ à la fréquence spatiale \mathbf{f} :

$$\mathbf{b}_f^k \triangleq \{\hat{\mathbf{B}}_\ell^k(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\}. \quad (7.11)$$

Notons que contrairement à l'approche GR, la matrice à inverser ne dépend pas de \mathbf{b} *i.e.* la courbure de l'approximation quadratique majorante est fixe au cours des itérations internes : voir figure 7.2. La courbure variable de GR permet une approximation majorante plus fine s'adaptant au point courant, mais ne se prête pas au calcul par TFD car on ne peut plus utiliser le théorème de Plancherel. Dans l'approche GY, le coût de calcul au cours des itérations est réduit en mémorisant le terme à inverser dans le domaine de Fourier.

Minimisation de $\mathcal{Q}(\mathbf{b}|\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{p}^k; \xi^k)$

Le problème est séparable par rapport à chaque b_i et sa solution s'écrit [Idier, 2001]

$$b_i^{k+1} = \{\mathbf{D}_s \mathbf{x}^{k+1}\}_i - \phi'_\eta(\{\mathbf{D}_s \mathbf{x}^{k+1}\}_i) \quad (7.12)$$

où ϕ'_η est la dérivée de la fonction de Huber (le produit $\mathbf{D}_s \mathbf{x}$ est également calculé dans le domaine de Fourier).

Algorithme proposé

L'algorithme proposé, désigné par **Algorithme 5**, est présenté en table 7.1.

7.2.3 Méthode proximale / ADMM

La méthode semi-quadratique ne permet de retrouver le cas de la pénalisation L_1 qu'asymptotiquement (pour $\eta \rightarrow 0$). Nous proposons dans cette section une méthode s'appliquant à la régularisation L_1 et de Huber, la fonction ϕ désignant indifféremment dans la suite la valeur absolue ou la fonction de Huber.

Les algorithmes basés sur les opérateurs proximaux ont fait l'objet de nombreux travaux au cours de la dernière décennie [Chaux et al., 2007, Combettes et Pesquet, 2007, Beck et Teboulle, 2009, Pustelnik, 2010], notamment pour résoudre des problèmes non différentiables. Dans cet article, nous choisissons d'utiliser le cadre de l'algorithme ADMM [Matakos et al., 2013, Almeida et Figueiredo, 2013a], combinant une décomposition de la fonction objectif et la méthode des multiplicateurs de Lagrange [Boyd et al., 2011], qui conduit à une structure d'algorithme proche de celle obtenue dans la section 7.2.2. L'idée générale consiste à décomposer les variables (*variable splitting*) afin de rendre le terme de régularisation spatiale séparable. Le problème (7.3) est réécrit sous la forme

$$\min_{\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{z}} f(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \xi) + g(\mathbf{z}) \text{ s.c. } \mathbf{D}_s \mathbf{x} - \mathbf{z} = \mathbf{0} \quad (7.13)$$

où les objectifs décomposés f et g sont donnés par

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \xi) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\mu\lambda}{2} \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{x}\|_2^2 + \frac{\xi}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{p}\|_2^2 \quad (7.14)$$

$$g(\mathbf{z}) = \frac{\mu_s}{2} \sum_i \phi(z_i). \quad (7.15)$$

La procédure consiste alors à minimiser le Lagrangien augmenté du problème (voir section 6.2.2), donné par

$$\mathcal{L}_\rho(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{z}, \mathbf{u}; \xi, \rho) = f(\mathbf{x}, \mathbf{p}; \xi) + g(\mathbf{z}) + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{D}_s \mathbf{x} - \mathbf{z} + \mathbf{u}\|_2^2 - \frac{\rho}{2} \|\mathbf{u}\|_2^2 \quad (7.16)$$

par rapport à $\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{z}$ alternativement et à mettre à jour les multiplicateurs de Lagrange réduits \mathbf{u} et le paramètre ρ .

Données: images \mathbf{y}_ℓ , \mathcal{H}_ℓ et \mathcal{D}_ℓ , pour $\ell = 1, \dots, L$; matrice Δ_λ ;
 fixer $\mu_s > 0$, $\mu_\lambda > 0$, $\beta > 1$, $\eta > 0$, $\tau < 0$, M entier positif ;
 Initialiser $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\mathbf{p} = \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$, $\mathbf{b} = \hat{\mathbf{b}} = \mathbf{0}$, $\xi = 1$;
pour $\ell = 1, \dots, L$ **faire**
 calculer $\hat{\mathbf{Y}}_\ell$, $\hat{\mathcal{H}}_\ell$ et $\hat{\mathcal{D}}_\ell$ par FFT-2D ;
fin
tant que $(\min(\mathbf{x}) < \tau) \cup (\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|_2 > \epsilon)$ **faire**
 pour M itérations **faire**
 pour $\mathbf{f} = (f_1 \geq 0, f_2)$ **faire**
 indicer $\mathbf{y}_\mathbf{f}$ (5.15), $\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})$ (5.16), $\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f})$ (5.17), $\mathbf{p}_\mathbf{f}$ (6.6) et $\mathbf{b}_\mathbf{f}$ (7.11);
 calculer $\mathbf{x}_\mathbf{f}$ par (7.10);
 fin
 pour $\mathbf{f} = (f_1 < 0, f_2)$ **faire**
 $\mathbf{x}_\mathbf{f} = \mathbf{x}_{-\mathbf{f}}^*$;
 fin
 pour $\ell = 1, \dots, L$ **faire**
 calculer \mathbf{X}_ℓ par iFFT-2D ;
 calculer \mathbf{B}_ℓ par (7.12) ;
 calculer $\hat{\mathbf{B}}_\ell$ par FFT-2D ;
 calculer \mathbf{P}_ℓ par (7.7) ;
 calculer $\hat{\mathbf{P}}_\ell$ par FFT-2D ;
 fin
 fin
 Mettre à jour $\xi := \beta\xi$;
fin

Résultat: image restaurée \mathbf{x}

Algorithme 5: Restauration d'images spectrales avec régularisation spatiale de Huber par méthode semi-quadratique, régularisation spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par pénalité quadratique.

TABLE 7.1

Minimisation de $\mathcal{L}_\rho(\mathbf{x}|\mathbf{p}^k, \mathbf{z}^k, \mathbf{u}^k; \xi^k, \rho^k)$

La solution de ce problème quadratique est donnée par

$$\mathbf{x}^{k+1} = (\mathbf{H}^T \mathbf{H} + \rho^k \mathbf{D}_s^T \mathbf{D}_s + \mu_\lambda \mathbf{D}_\lambda^T \mathbf{D}_\lambda + \xi^k \mathbf{I}_{NL})^{-1} (\mathbf{H}^T \mathbf{y} + \rho \mathbf{D}_s^T (\mathbf{z}^k - \mathbf{u}^k) + \xi^k \mathbf{p}^k). \quad (7.17)$$

et se calcule dans le domaine de Fourier, pour chaque fréquence \mathbf{f} du demi-plan droit :

$$\mathbf{x}_\mathbf{f}^{k+1} = (\Delta_{\mathcal{H}}^*(\mathbf{f}) \Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f}) + \rho^k \Delta_{\mathcal{D}}^*(\mathbf{f}) \Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f}) + \mu_\lambda \Delta_\lambda^T \Delta_\lambda + \xi^k \mathbf{I}_L)^{-1} (\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})^* \mathbf{y}_\mathbf{f} + \rho \Delta_{\mathcal{D}}^*(\mathbf{z}_\mathbf{f}^k - \mathbf{u}_\mathbf{f}^k) + \xi^k \mathbf{p}_\mathbf{f}^k) \quad (7.18)$$

où $\mathbf{z}_\mathbf{f}^k$ collecte les valeurs de $\hat{\mathbf{Z}}^k$ à la fréquence spatiale \mathbf{f} :

$$\mathbf{z}_\mathbf{f}^k \triangleq \{\hat{\mathbf{Z}}_\ell^k(\mathbf{f}), \ell = 1 \dots L\}. \quad (7.19)$$

Minimisation de $\mathcal{L}_\rho(\mathbf{z}|\mathbf{x}^{k+1}, \mathbf{p}^k, \mathbf{u}^k; \xi^k, \rho^k)$

Le problème est séparable par rapport à chaque z_i :

$$z_i^{k+1} = \arg \min_{z_i} \left\{ \mu_s 2\phi(z_i) + \rho 2(z_i - \{\mathbf{D}_s \mathbf{x}^{k+1}\}_i - u_i^k)^2 \right\}. \quad (7.20)$$

Par définition, on appelle *opérateur proximal* d'une fonction h avec pénalité ρ la fonction de la variable t

$$\text{prox}_{h,\rho}(t) \triangleq \arg \min_z \{h(z) + (\rho/2)(z - t)^2\}.$$

L'opérateur proximal de la fonction de Huber admet une expression analytique [Chaux et al., 2007] :

$$\text{prox}_{\phi_\eta,\rho}(t) = \begin{cases} \frac{t}{1/(\eta\rho)+1} & \text{pour } |t| < \frac{1}{\rho} + \eta \\ t - \eta \text{sgn}(t) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (7.21)$$

L'opérateur proximal de la valeur absolue est retrouvé en faisant tendre le paramètre η vers zéro, donnant la fonction de *seuillage doux* [Boyd et al., 2011]. La solution est donc donnée par

$$z_i^{k+1} = \text{prox}_{\phi_\eta, 2\rho/\mu_s}(\{\mathbf{D}_s \mathbf{x}^{k+1}\}_i + u_i^k). \quad (7.22)$$

Mise à jour des variables de Lagrange \mathbf{u}

La mise à jour est donnée par

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^k + \mathbf{D}_s \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{z}^{k+1}. \quad (7.23)$$

Mise à jour du paramètre ρ

Le paramètre peut être fixé ou augmenter avec les itérations : voir section 6.2.2.

Algorithme proposé

L'algorithme proposé, désigné par **Algorithme 6**, est présenté en table 7.2.

7.3 Résultats expérimentaux

7.3.1 Préservation des contours

Nous évaluons les performances de l'algorithme sur des images multispectrales réelles acquises en microscopie confocale de fluorescence⁶. La scène imagée comprend des bactéries *Pseudomonas* modifiées génétiquement par insertion de gènes rapporteurs. Ces gènes codent des émetteurs fluorescents, les protéines *GFP* et *E2-Orange*, de manière à réagir respectivement à la présence et la carence en fer du milieu. Les images sont acquises sur 512×512 pixels de taille 49 nm et 16 longueurs d'onde balayant la gamme 455 – 605 nm.

La RIO est estimée à l'aide de la méthode présentée dans [Zhang et al., 2007] : à chaque bande spectrale, le noyau est approché par une gaussienne de taille 8×8 dont l'écart-type est calculé à partir des paramètres d'acquisition (rayon du pinhole, indice de réfraction du milieu et longueurs

6. Nous remercions Christian Mustin, DR CNRS au LIEC (UMR 7360) pour son travail d'acquisition en imagerie confocale ainsi que ses éclairages sur les résultats expérimentaux.

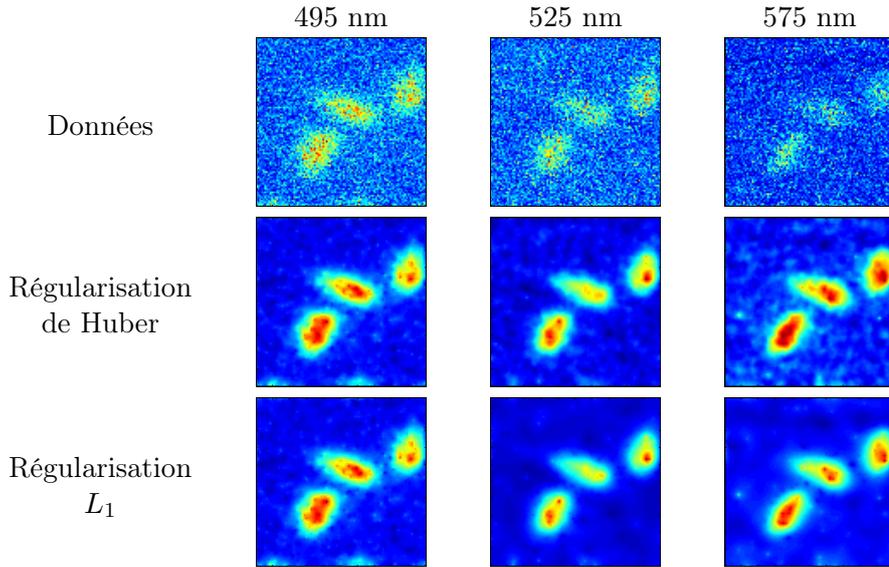


FIGURE 7.3 – Images réelles de biocapteurs bactériens. Lignes : 1) données observées ; 2) déconvolution $L_2 - Huber$; 3) déconvolution $L_2 - L_1$. Colonnes : 1) mode spectral de l’autofluorescence ; 2) mode spectral de la GFP (réagissant à la présence de fer) ; 2) mode de E2-Orange (réagissant à la carence en fer).

d’onde d’excitation et d’émission). Les paramètres de régularisation sont fixés empiriquement à $\mu_s = 15$ et $\mu_\lambda = 1$. Les autres paramètres sont fixés à $\eta = 10$, $\alpha = 10$, $\rho = 1$, $\tau = -1e^{-6}$, $\beta = 1$ et $M = 10$.

La figure 7.3 présente les résultats obtenus sur une partie de l’image à trois longueurs d’onde : $\{495, 525, 575\}$ nm, correspondant respectivement aux modes de l’autofluorescence, de la GFP et de E2-Orange. La figure présente les données observées (première ligne), les résultats obtenus pour $\eta = 10$ par application des méthodes ADMM / SQ (deuxième ligne), et pour $\eta = 0$ par ADMM en utilisant l’opérateur proximal associé à la pénalisation L_1 (troisième ligne). Les temps de calculs respectifs sont de 142 et 155 secondes pour une implémentation MATLAB sur un processeur 2,4 Ghz Intel Core 2 Duo avec une RAM de 4 giga-octets.

Pour les deux résultats de déconvolution, le bruit est très nettement atténué et la structure des bactéries est restaurée. La pénalité de Huber préserve bords francs et petites variations (donc les détails), tandis que la pénalité L_1 favorise une image constante par morceaux (ce qui explique la meilleure atténuation du bruit) : on retrouve donc les comportements attendus pour ces types de régularisation. Le mode spectral de E2-Orange apparaissant plus fluorescent que le mode de la GFP, on peut ainsi conclure que la région étudiée est pauvre en fer.

7.3.2 Eléments de convergence empirique de l’algorithme

L’approche proximale proposée se démarque des chapitres précédents par le caractère itératif de la minimisation par rapport à la variable \mathbf{x} . La structure globale de la méthode étant composée de deux boucles imbriquées (minimisation du lagrangien à ξ fixé et boucle externe sur ξ), il est nécessaire d’analyser l’influence du nombre d’itérations des deux boucles.

Nos résultats expérimentaux indiquent que le nombre d’itérations M de la boucle interne permettant convergence de la minimisation par rapport à \mathbf{x} décroît avec le paramètre de Huber η . Intuitivement, le problème (7.6) se rapproche d’une minimisation L_2L_1 pour une faible valeur de

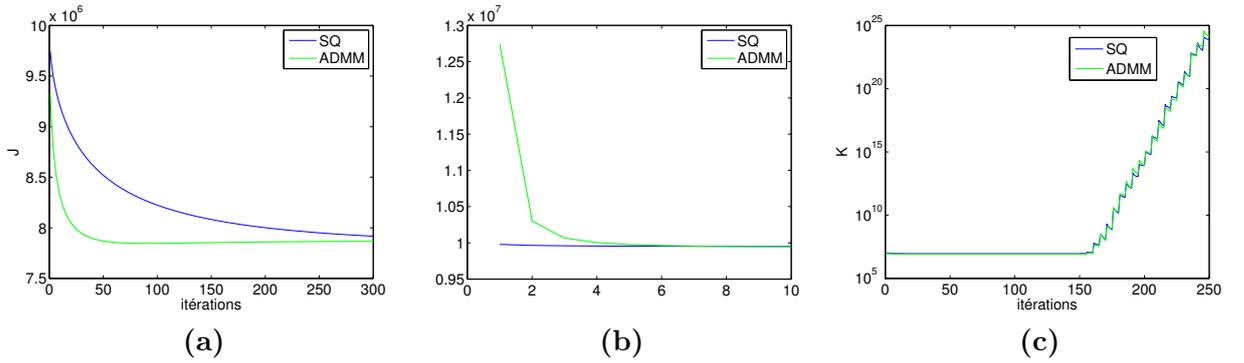


FIGURE 7.4 – Performance des méthodes semi-quadratique et proximale. (a) Evolution du critère \mathcal{J} en fonction des itérations en l’absence de contrainte de positivité, pour une valeur du paramètre de Huber $\eta = 1e^{-1}$. (b) Evolution du même critère pour $\eta = 10$. (c) Evolution du critère \mathcal{K} en échelle logarithmique en fonction des itérations, pour $M = 5$.

η et d’une simple minimisation L_2 pour une forte valeur de η . Ces différences de comportement sont illustrées sur les figures 7.4 (a) et (b) pour $\eta = 1e^{-1}$ et $\eta = 10$. Des deux approches proposées, la méthode proximale se révèle plus performante que la technique semi-quadratique pour une faible valeur de η et elles sont équivalentes pour une forte valeur (voir figure 7.4 où les méthodes convergent respectivement en 50 et 300 itérations).

Le nombre d’itérations de la boucle externe est fonction du paramètre β mettant à jour le poids $\xi^{k+1} = \beta\xi^k$. Le choix de ce paramètre est lié au coût de résolution du sous-problème de minimisation (7.6) : lorsque ce problème est peu coûteux, l’on peut choisir une valeur ambitieuse (e.g. $\beta = 10$) tandis que dans le cas contraire, une valeur moins importante (e.g. $\beta = 1.5$) permet de mieux initialiser \mathbf{x} [Nocedal et Wright, 2006, p. 493]. Ce fait est à prendre en considération si l’on choisit de tronquer la résolution de (7.6) à chaque itération externe.

Bien que les contraintes ne soient en théorie satisfaites qu’asymptotiquement, il n’est pas nécessaire de les satisfaire de manière exacte. Le choix du critère d’arrêt externe se fonde sur cette observation en fixant une valeur négative minimale liée à la dynamique des pixels. Ce point est illustré sur la figure 7.4 (c) représentant l’évolution du critère $\mathcal{K}(\mathbf{x}, \mathbf{s}; \xi)$ pour $M = 5$, i.e. un faible nombre d’itérations dans la boucle interne. Après environ 150 itérations, le poids ξ a augmenté considérablement et le terme $\xi\|\mathbf{x} - \mathbf{s}\|_2^2$ domine à présent le critère, dont le profil présente une succession d’augmentations brusques correspondant à une augmentation de ξ , suivies de relaxation traduisant la minimisation par méthode semi-quadratique ou proximale à valeur de ξ fixée. Le critère d’arrêt choisi permet d’éviter ce régime de l’algorithme en n’effectuant que quelques itérations externes.

Remarque : une version améliorée de la méthode proposée consiste à substituer au paramètre M un nombre variable d’itérations internes à l’aide d’un critère d’arrêt, cette stratégie permettant de réduire le nombre de choix imposés à l’utilisateur.

Données: images \mathbf{y}_ℓ , \mathcal{H}_ℓ et \mathcal{D}_ℓ , pour $\ell = 1, \dots, L$; matrice Δ_λ ;
fixer $\mu_s > 0$, $\mu_\lambda > 0$, $\beta_1 \geq 1$, $\beta_2 > 1$, $\eta > 0$, $\tau < 0$, M entier positif ;
Initialiser $\mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\mathbf{p} = \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{0}$, $\mathbf{z} = \hat{\mathbf{z}} = \mathbf{0}$, $\mathbf{u} = \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$, $\xi = 1$;
pour $\ell = 1, \dots, L$ **faire**
| calculer $\hat{\mathbf{Y}}_\ell$, $\hat{\mathcal{H}}_\ell$ et $\hat{\mathcal{D}}_\ell$ par FFT-2D ;
fin
tant que $(\min(\mathbf{x}) < \tau) \cup (\|\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k\|_2 > \epsilon)$ **faire**
| **pour** M itérations **faire**
| | Initialiser $\rho = 1$;
| | **pour** $\mathbf{f} = (f_1 \geq 0, f_2)$ **faire**
| | | indicer $\mathbf{y}_\mathbf{f}$ (5.15), $\Delta_{\mathcal{H}}(\mathbf{f})$ (5.16), $\Delta_{\mathcal{D}}(\mathbf{f})$ (5.17), $\mathbf{p}_\mathbf{f}$ (6.6), $\mathbf{z}_\mathbf{f}$ (7.19) et
| | | $\mathbf{u}_\mathbf{f}$ (6.11);
| | | calculer $\mathbf{x}_\mathbf{f}$ par (7.18);
| | **fin**
| | **pour** $\mathbf{f} = (f_1 < 0, f_2)$ **faire**
| | | $\mathbf{x}_\mathbf{f} = \mathbf{x}_{-\mathbf{f}}^*$;
| | **fin**
| | **pour** $\ell = 1, \dots, L$ **faire**
| | | calculer \mathbf{X}_ℓ par iFFT-2D ;
| | | calculer \mathbf{Z}_ℓ par (7.20) ;
| | | calculer $\hat{\mathbf{Z}}_\ell$ par FFT-2D ;
| | | calculer \mathbf{U}_ℓ par (7.23) ;
| | | calculer $\hat{\mathbf{U}}_\ell$ par FFT-2D ;
| | | calculer \mathbf{P}_ℓ par (7.7) ;
| | | calculer $\hat{\mathbf{P}}_\ell$ par FFT-2D ;
| | | Mettre à jour $\rho := \beta_1 \rho$
| | **fin**
| **fin**
| Mettre à jour $\xi := \beta_2 \xi$;
fin
Résultat: image restaurée \mathbf{x}

Algorithme 6: Restauration d'images spectrales avec régularisation spatiale de Huber par méthode proximale, régularisation spectrale de Tikhonov et contrainte de positivité par pénalité quadratique.

TABLE 7.2

Conclusion

Dans cette partie, nous avons formulé le problème de déconvolution d'images hyperspectrales comme la minimisation d'un critère pénalisé incorporant des informations sur la régularité spatiale et spectrale de l'image. Nous avons proposé une structure de calcul générique permettant de résoudre le problème lorsque des *a priori* de douceur spatiale et spectrale sont imposés sur la solution. Cette structure de calcul est réutilisée pour résoudre le problème sous contrainte de positivité, produisant un algorithme présentant des performances supérieures à celles des méthodes standard MATLAB et similaires à un algorithme de référence proposant une approche itérative primale-duale. Nous montrons également comment incorporer la structure de calcul à des approches populaires d'optimisation permettant de préserver les contours de l'image. Les performances de ces méthodes sont évaluées sur des images réelles de biocapteurs bactériens acquises en microscopie confocale de fluorescence.

Dans la troisième partie du manuscrit, la matrice de donnée est supposée satisfaire à un modèle de mélange. L'enjeu est alors d'estimer les sources pures contenues dans l'image et les cartes d'abondance correspondantes, en présence des dégradations induites par l'instrument de mesure. Nous allons chercher à démontrer l'intérêt d'appliquer un algorithme de déconvolution avant d'effectuer la séparation de sources sur des données synthétiques et des images hyperspectrales réelles acquises en microscopie Raman.

Troisième partie

Déconvolution et séparation

Does deblurring improve geometrical spectral unmixing ?

Ce chapitre est une adaptation de l'article [R2].

Sommaire

8.1	Introduction	67
8.2	Approche géométrique de la séparation de sources	69
8.2.1	Modèle linéaire de mélange	69
8.2.2	Réduction de dimension et projection affine	70
8.2.3	Simplexe de volume minimal	71
8.3	Effet du système d'observation	74
8.3.1	Modèle couplé d'observation et de mélange	74
8.3.2	Trajectoire des pixels	74
8.3.3	Résultats expérimentaux	75
8.4	Cas d'une RIO spectralement invariante	77
8.4.1	Modèle bilinéaire	78
8.4.2	Contraction du simplexe de volume minimal	79
8.4.3	Résultats expérimentaux	80
8.5	Résultats expérimentaux sur des données réelles	82
8.6	Conclusion	83

8.1 Introduction

Multispectral imaging refers to the acquisition of two-dimensional (2D) spatial images at different wavelengths, yielding one spectral vector per pixel of the image. Hyperspectral imaging takes this idea one step further by improving the spectral resolution to hundreds or thousands of overlapping spectral bands. Hyperspectral data may then be viewed as a collection of highly resolved spectra. In many applications, the image contains a small number of pure materials - termed *endmembers* - whose spectral signatures are mixed in each pixel because of limited spatial resolution. Spectral unmixing usually refers to the estimation of endmembers and their fractional contribution to each pixel, named *abundances*.

Many unmixing methods in the literature can be categorized as belonging to either a geometrical [Ouedraogo et al., 2012], a statistical (Bayesian) [Moussaoui et al., 2006, Moussaoui et al.,

2008] or a sparse regression framework [Bioucas-Dias et al., 2012]. In the former approach, each spectral vector belongs to a simplex whose vertices are the endmembers we seek [Craig, 1994]. Some algorithms assume that there exists at least one *pure pixel* (PP) per endmember and exploit this property by identifying the endmembers to the "purest" pixels in the hyperspectral scene. When the *pure pixel hypothesis* does not hold, the geometrical approach to unmixing then consists in fitting the *Minimum Volume Simplex* (MVS) to the data using one of many MV algorithms. However, highly mixed data are beyond the reach of geometrical algorithms because spectral signatures are located near the center of the true endmember simplex. One could then resort to statistical or sparse methods to unmix the data set. In this chapter, we focus instead on analyzing and alleviating the effects of hyperspectral image blurring, which will be shown to possibly cause highly mixed data.

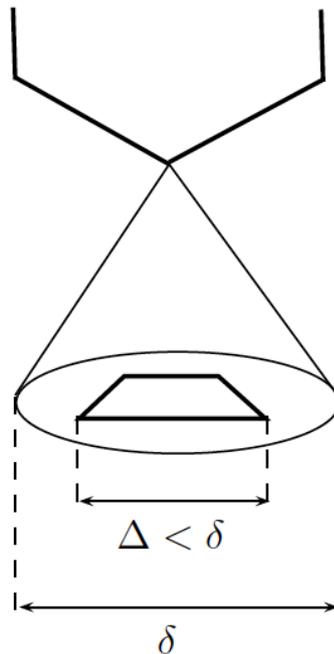


FIGURE 8.1 – Illustration of the PSF size relative to a pixel : the PSF support is represented by the spot of diameter δ and the pixel by has side length Δ . The maximum instrumental resolution is obtained for $\Delta = \delta$; if $\Delta < \delta$, then the resulting image is blurry.

Hyperspectral images are usually degraded by the observation process, typically including blurring and corruption by noise. Data acquired by spectro-imagers dedicated to geoscience, remote sensing or planetology, result from a physics-based inversion pipeline ensuring that these images are free of blur. However, in other domains, the acquisition process does not include a deblurring step, resulting in blurry hyperspectral images. For instance, microscopy [Zhang et al., 2007], Raman spectroscopy [De Grauw et al., 1997] or ground-based astrophysical [Bourguignon et al., 2012, Villeneuve et al., 2011] images are blurred by diffraction through the objective aperture. We consider such hyperspectral images in this paper. Mathematically, each observed image plane is obtained as the two-dimensional convolution of the original image and the channel linear shift-invariant blur or *Point-Spread Function* (PSF). If the size of the PSF is less than that of an image pixel, the blur does not alter the spatial resolution of the data. However, if the PSF support extends beyond a pixel, neighboring pixels are combined in the observed data, resulting in additional mixing : see figure 8.1.

The latter case arises whenever one aims at obtaining a fine spatial resolution, e.g. in super-resolution reconstruction [Akgun et al., 2005]. In this framework, some scenes that could *a priori* be geometrically unmixed may lose this property because of the blur. The operation of *deconvolution* which inverts the observation process may then restore the stack so that low computational complexity geometrical methods qualify to unmix it. In addition, deconvolution algorithms also provide the additional benefit of restoring images with higher signal-to-noise ratios (SNRs).

The ideal approach to account for these two physical phenomena would be to jointly deconvolve and unmix the data. Let us mention [Zhao et al., 2013] where the authors perform joint deconvolution and abundance estimation. They assume that endmembers belong to a large dictionary and the abundance estimation is formulated as a sparse regression problem. However, to the best of our knowledge, no algorithms have been designed to perform joint deconvolution and *blind* unmixing⁷ of the data. Nevertheless, many off-the-shelf algorithms are available to perform deconvolution and unmixing separately. We propose to show in this paper that the sequential procedure of (deconvolution/unmixing) yield better results than a (unmixing/deconvolution) strategy.

Our goal is to study how blurring may affect the results of geometrical unmixing methods and assess whether deblurring hyperspectral images before unmixing them yields quantitative improvements. The remainder of the chapter is organized as follows. Section 8.2 presents the linear mixing model and recalls its associated geometrical framework; we also discuss identifiability issues by the geometrical unmixing approach. In section 8.3, we factor in the general observation model and present experimental results on synthetic data to evaluate the gain of a deconvolution step before applying a spectral unmixing algorithm. Section 8.4 focuses on the specific case where the PSF is invariant across the spectral channels. Finally, we present experimental results on real data in section 8.5 and we conclude in section 8.6.

8.2 Hyperspectral geometrical unmixing framework

In this section, we introduce concepts and notations used throughout the rest of the chapter. Most of the results given below are not new and can be found elsewhere in the literature : see [Bioucas-Dias et al., 2012] for a thorough review of hyperspectral unmixing and [Chan et al., 2009] for an introduction to convex geometry applied to endmember extraction.

8.2.1 Linear mixing model

Consider an hyperspectral image measuring radiance on L different spectral bands (*channels*) and N pixels. We gather the data in a $L \times N$ matrix \mathbf{X} and use the following notations :

1. \mathbf{x}^ℓ is the ℓ -th row of \mathbf{X} , that is the 2D image at channel ℓ after lexicographical ordering into a row vector of length N ;
2. \mathbf{x}_n is the n -th column of \mathbf{X} , i.e. the $L \times 1$ spectrum of the n -th pixel (also termed spectral vector or pixel vector).⁸

Each spectral vector in the image is a linear combination of an known number P of endmembers $\{\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_P\}$. When unknown, P can be obtained by some model order estimation method such

⁷. Here, blind unmixing refers to the joint estimation of endmembers and abundances.

⁸. In this chapter, we transpose the data matrix used in previous chapters so that endmembers are indexed as column vectors.

as *virtual dimensionality* [Chang et Du, 2004]. Ignoring noise for now, the linear mixing model (LMM) writes

$$\mathbf{X} = \mathbf{S}\mathbf{A}$$

where the p th column of $L \times P$ *source matrix* \mathbf{S} indexes endmember \mathbf{s}_p and the n th column \mathbf{a}_n of $P \times N$ *abundance matrix* \mathbf{A} contains the fractional abundance coefficients for \mathbf{x}_n :

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{S}\mathbf{a}_n = \sum_{p=1}^P A_{p,n}\mathbf{s}_p. \quad (8.1)$$

The LMM is generally based on the following assumptions [Bioucas-Dias et al., 2012] :

- i) the number of endmembers P is much smaller than the number of bands L , that is $P \ll L$;
- ii) matrix \mathbf{S} is of full column rank, *i.e.* endmembers $\{\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_P\}$ are linearly independent ;
- iii) *Abundance Nonnegativity Constraint* (ANC) : $A_{p,n} \geq 0$ for all p and n ;
- iv) *Abundance Sum Constraint* (ASC) : $\sum_{p=1}^P A_{p,n} = 1$ for all n .

Assumptions (i) and (ii) seem very reasonable in hyperspectral imaging since many bands are collected and the image is made up of a few distinct materials. Assumptions (iii) and (iv) come from the physical interpretation of abundance coefficient $A_{p,n}$ as the fractional spatial area occupied by the p th endmember in the n th pixel.

To model illumination variability due to surface topography [Nascimento et Bioucas-Dias, 2005], equation (8.1) sometimes writes $\mathbf{x}_n = \gamma_n \mathbf{S}\mathbf{a}_n$ where parameter γ_n is a scale factor for each pixel in the hyperspectral scene. This phenomenon can be accounted for in model (8.1) by simply rejecting hypothesis (iv). The geometrical consequences of this choice are detailed below.

8.2.2 Dimension reduction and affine projection

From equation (8.1) and assumptions (i) and (ii), it is immediate that pixel vectors lie in a P -dimensional vector subspace of \mathbb{R}^L . Suppose the subspace orthonormal basis $\mathbf{E} = [\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_P]$ has been inferred from the data, e.g. by the HySime algorithm [Bioucas-Dias et Nascimento, 2008], then the n -th dimension-reduced pixel is given by

$$\hat{\mathbf{x}}_n = \mathbf{E}^T \mathbf{x}_n \in \mathbb{R}^P. \quad (8.2)$$

From equation (8.2) and assumption (iii), P -dimensional pixel vectors are enclosed in the convex cone spanned by dimension-reduced endmembers $\{\hat{\mathbf{s}}_1, \dots, \hat{\mathbf{s}}_P\}$ [Ifarraguerri et Chang, 1999] (see figure 8.2) :

$$\{\hat{\mathbf{x}}|\hat{\mathbf{x}} = \sum_{p=1}^P \theta_p \hat{\mathbf{s}}_p, \theta_p \geq 0, p = 1 \dots P\}. \quad (8.3)$$

In order to satisfy hypothesis (iv), the P -dimensional points are then projected onto a $(P - 1)$ -dimensional affine plane (see figure 8.2). The choice of a particular affine plane is arbitrary and may be viewed as imposing the norm of the supporting endmembers.

Most algorithms use either an orthogonal projection [Chan et al., 2009] or the perspective projection [Bioucas-Dias et al., 2012] onto the $(P - 1)$ -dimensional affine plane : the choice of one method or another is related to the SNR, see [Nascimento et Bioucas-Dias, 2005]. For example, the perspective projection consists in scaling pixel vectors

$$\overset{\circ}{\mathbf{x}}_n = \frac{\hat{\mathbf{x}}_n}{\hat{\mathbf{x}}_n^T \mathbf{u}} \quad (8.4)$$

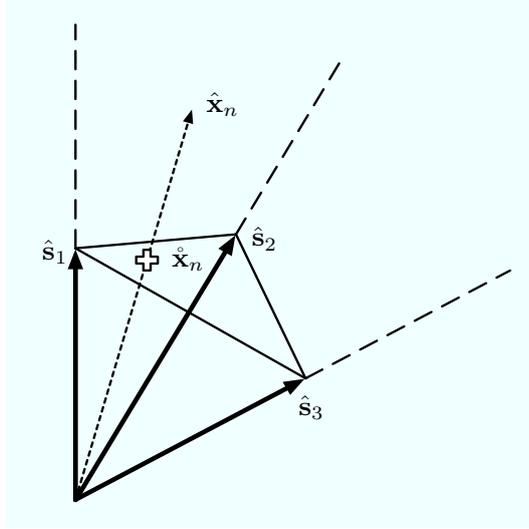


FIGURE 8.2 – Illustration in dimension $P = 3$ of the convex cone spanned by dimension-reduced endmembers $\{\hat{\mathbf{s}}_p, p = 1 \dots P\}$ enclosing dimension-reduced pixels $\hat{\mathbf{x}}_n$'s. $\hat{\mathbf{x}}_n$ is obtained by perspective projection of $\hat{\mathbf{x}}_n$ on the affine plane supported by $\{\hat{\mathbf{s}}_p, p = 1 \dots P\}$.

to project them onto the hyperplane defined by $\hat{\mathbf{v}}^T \mathbf{u} = 1$ for every vector $\hat{\mathbf{v}} \in \mathbb{R}^P$, where $\mathbf{u} \in \mathbb{R}_+^P$ is chosen beforehand such that $\hat{\mathbf{x}}_n^T \mathbf{u} > 0$ for all n . From equations (8.1), (8.2) and (8.4), the n -th projected pixel vector rewrites

$$\hat{\mathbf{x}}_n = \sum_{p=1}^P \alpha_{p,n} \hat{\mathbf{s}}_p \quad (8.5)$$

where coefficients $\alpha_{p,n}$ are given by

$$\alpha_{p,n} = A_{p,n} \frac{\hat{\mathbf{s}}_p^T \mathbf{u}}{\hat{\mathbf{x}}_n^T \mathbf{u}} = \frac{A_{p,n} \hat{\mathbf{s}}_p^T \mathbf{u}}{\sum_q A_{q,n} \hat{\mathbf{s}}_q^T \mathbf{u}}. \quad (8.6)$$

It is easy to see that the $\alpha_{p,n}$'s satisfy the following properties :

1. $\alpha_{p,n} \geq 0$ for all p and n , under the ANC ;
2. $\sum_p \alpha_{p,n} = 1$ for all n .

It follows that each projected pixel vector $\hat{\mathbf{x}}_n$ is a convex combination of the projected endmembers $\{\hat{\mathbf{s}}_p, p = 1 \dots P\}$. Hence, projected pixel vectors belong to the convex set \mathcal{S} :

$$\mathcal{S} = \{\hat{\mathbf{x}} | \hat{\mathbf{x}} = \sum_{p=1}^P \theta_p \hat{\mathbf{s}}_p | \theta_p \geq 0, p = 1 \dots P, \sum_{p=1}^P \theta_p = 1\}. \quad (8.7)$$

By definition, \mathcal{S} is the simplex whose vertices are the projected endmembers $\{\hat{\mathbf{s}}_1, \dots, \hat{\mathbf{s}}_P\}$.

8.2.3 Minimum Volume Simplex (MVS)

Most geometrical unmixing algorithms are based on the key idea introduced by Craig [Craig, 1994] that the **minimum-volume simplex** (MVS) enclosing all the pixel vectors identifies with \mathcal{S} and thus the endmembers we seek can be extracted as the vertices of the MVS. The MV constraint allows to regularize the ill-posed nature of the nonnegative source separation

problem [Moussaoui et al., 2005]. Alternatively, one can look for the **maximum-volume simplex** inscribed in the dataset, provided the image contains pure pixels (PP). Recovering both simplices can be addressed as a combinatorial problem but is too complex to handle high dimensional data [Gritzmann et Klee, 1994, Zhou et Suri, 2002]. Simple and computationally efficient approaches were proposed e.g. [Winter, 1999, Nascimento et Bioucas-Dias, 2005] in the MVS case and [Craig, 1994, Chang et al., 2006, Chan et al., 2009] in the PP case, among many others.

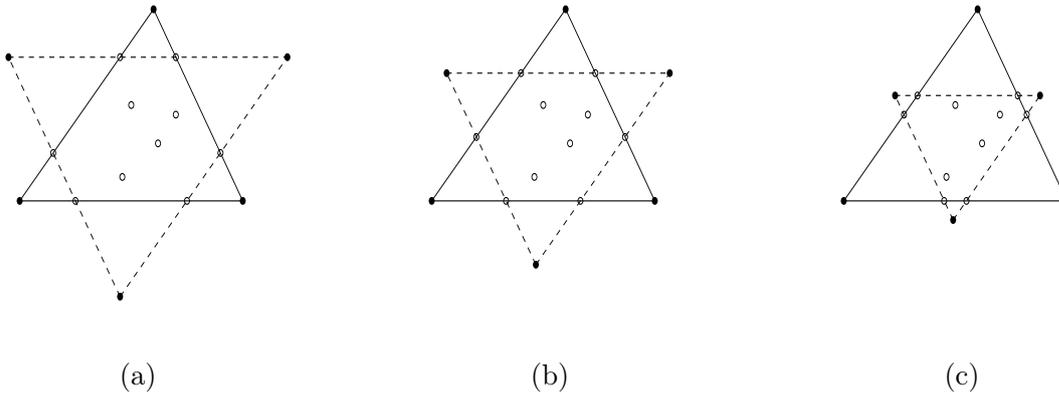


FIGURE 8.3 – 2D examples of triangles enclosing the data for $P = 3$ endmembers. The true unknown simplex \mathcal{S} is represented with a straight line while the other candidate triangle is plotted with a dotted line. Data points are represented as hollow circles and the vertices of the simplexes are filled circles. (a) : Statement (1) is true, i.e. \mathcal{S} is the MVS. (b) : both triangles are MVS's for this data configuration. (c) : the dotted-lined triangle has a smaller volume than \mathcal{S} and thus is the MVS.

We point out that unlike in the PP case, the MVS and the *true* simplex \mathcal{S} whose vertices are the endmembers may be different simplices. Figure 8.3 illustrates the distinction between the MVS and \mathcal{S} in the simple case where $P = 3$, yielding a 2D affine plane. In what follows, we discuss the problem of endmember identifiability using the MVS approach. Craig's statement can be rewritten in the following way :

Statement 1 *the MVS identifies with \mathcal{S} .*

The first problem with the statement is that there might exist more than one MVS : see figure 8.3b. This case is not likely to arise in practice if enough data points have been collected so that there exists data points near the vertices of \mathcal{S} .

Assuming there exists only one MVS, the following result can be found in the literature [Bioucas-Dias et al., 2012] :

Sufficient condition 1 *If there is at least one data point on each vertex of \mathcal{S} , then statement 1 is true.*

This sufficient condition (SC) is known as the *pure pixel condition*. For $P = 3$, we make the following statement (see figure 8.3c) :

Sufficient condition 2 *If there are at least two data points per facet of \mathcal{S} whose distance to the closest vertex is no greater than a third of the corresponding facet's length, then statement 1 is true.*

Proof 1 Suppose an hyperspectral image contains three endmembers. After dimension reduction and affine projection (see section (8.2)), pixel vectors are enclosed in a triangle \mathcal{S} whose vertices correspond to the endmembers. Suppose further that there are exactly two data points per facet of \mathcal{S} and denote these six points by $\{P_1 \dots P_6\}$. Each point P_i is assumed to be located at a distance $r*d$ from the closest vertex on its facet, where d is the facet length and $r \in [0, 1/2]$. As illustrated in figure 8.4, there are two possible triangles fitting $\{P_1 \dots P_6\}$, \mathcal{S} and \mathcal{S}' .

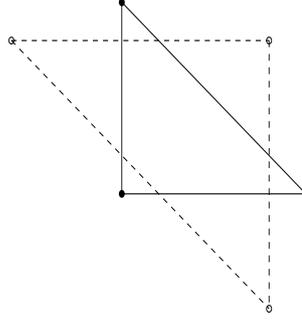


FIGURE 8.4 – \mathcal{S} is the straight-lined triangle, \mathcal{S}' is the dotted-line triangle. $r = 0.2$ in this illustration.

We first perform an affine transformation so that \mathcal{S} is transformed into a right isosceles triangle. The respective areas $\mathcal{A}(\mathcal{S})$ and $\mathcal{A}(\mathcal{S}')$ are scaled by the same number (that is, the determinant of the transform matrix) and the distance ratio r is conserved since the transformation is affine. In the new domain, we have $\mathcal{A}(\mathcal{S}) = 1/2$. By first calculating the equations of the facets of \mathcal{S}' and the coordinates of the vertices of \mathcal{S}' , it is easy to compute $\mathcal{A}(\mathcal{S}')$ as a function of r :

$$\mathcal{A}(\mathcal{S}') = \left| \frac{9}{2}r^2 - 6r + 2 \right| \quad (8.8)$$

Solving $\mathcal{A}(\mathcal{S}') > \mathcal{A}(\mathcal{S})$ for $r \in [0, 1/2]$ is trivial and yields $r < 1/3$.

SC 2 is weaker than SC 1. We note that a recent paper establishes necessary and sufficient conditions for the identifiability of endmembers by Craig's criterion in the 3-endmember case, see [Lin et al., 2013]. Formulating such a statement for higher dimensions (that is, for more than three endmembers) is difficult and out of the scope of this chapter. Rather, we stress that endmembers are more likely to be accurately identified by a MVS algorithm if there are pixel vectors near the vicinity of the vertices of \mathcal{S} in the data. Obviously, if the data is highly mixed, the MVS will be enclosed in \mathcal{S} and identifiability conditions will not be satisfied. Such a situation can arise because of two major reasons :

1. the abundance distributions themselves ;
2. additional mixing due to the imaging system, as we will demonstrate in the next section.

In the latter case, this undesirable contribution can be removed by image restoration methods, thus improving endmember identifiability conditions.

8.3 Effect of the imaging process

8.3.1 Blurring of the linear mixture

In this section we now account for the fact that the image is degraded during the acquisition process. Under the common linear blur assumption, the 2D image \mathbf{y}^ℓ observed at a given channel ℓ is obtained as the 2D convolution product of the true image and the channel point-spread function \mathcal{H}^ℓ :

$$\mathbf{y}^\ell = \mathbf{x}^\ell \mathbf{H}^\ell \quad (8.9)$$

where the $N \times N$ observation matrix \mathbf{H}^ℓ is a convolution matrix corresponding to \mathcal{H}^ℓ . For instance, when the blur is space-invariant, $(\mathbf{H}^\ell)^T$ is a block-Toeplitz matrix where each block is Toeplitz [Henrot et al., 2013]⁹. Each entry of the observed data matrix \mathbf{Y} is given by

$$Y_{\ell,k} = \sum_{n=1}^N X_{\ell,n} H_{n,k}^\ell. \quad (8.10)$$

Using equations (8.1) and (8.10), the overall model combining noise, observation blurring and linear mixing of endmembers writes

$$Y_{\ell,k} = \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P S_{\ell,p} A_{p,n} H_{n,k}^\ell + W_{\ell,k} \quad (8.11)$$

where \mathbf{W} is the noise term and model (8.11) assumes that the SNR is high enough for the noise to be additive and i.i.d. Gaussian. We observe that the blurred data do not satisfy the LMM since the mixing coefficients $A_{p,n} H_{n,k}^\ell$ depend on the channel index ℓ . Thus, even in the absence of noise, **the \mathbf{y}_k 's do not necessarily belong to \mathcal{S} anymore.**

8.3.2 Pixel trajectories

Since the abundances vary with the channel index, it is no longer possible to use barycentric coordinates to represent a pixel vector in the simplex formed by the endmembers [Honeine et Richard, 2012]. To give some insight into the understanding of the effect of the channel dependent blur on the linear mixture, we propose to use the representation of figure 4. The endmembers correspond to the vertices of the simplex. Note that in this figure the simplices locations are arbitrarily fixed to $(0, 0)$, $(0, 1)$ and $(1/2, \sqrt{3}/2)$ resulting in an isocèles triangle. As the mixing coefficients are depending on the channel index, a mixed pixel can no longer be represented as a single point. For each channel, we have different mixing coefficients. We rather represent a channel dependent mixed pixel by a “trajectory” where each point of the trajectory corresponds to the barycentric coordinates at a particular channel.

Figure 8.5 displays a few pixel trajectories for a Gaussian PSF whose width linearly increases with the channel index¹⁰. Interestingly, this representation provides spatial information about the pixel at hand. For instance, a trajectory that goes from a vertex to another indicates that the pixel is located in the boundary of two regions, each corresponding to a particular endmember ; a trajectory pointing towards the center of the simplex corresponds to a highly mixed pixel.

9. The transpose comes from the fact that \mathbf{x}^ℓ and \mathbf{y}^ℓ are row vectors.

10. We restrict our analysis to the case of PSFs whose width increases with the channel index (i.e. wavelength) because this is the relevant case of conventional optical systems.

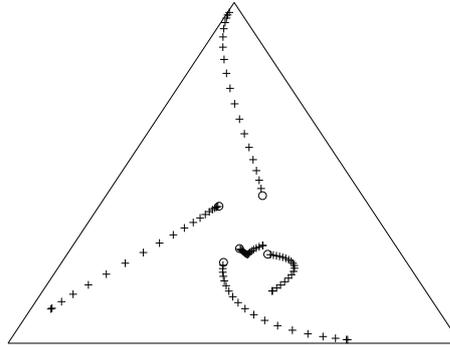


FIGURE 8.5 – Examples of trajectories of a few pixel vectors.

As a consequence, even if applying a linear unmixing algorithm directly to the data is feasible, the resulting endmembers and abundances are literally unmeaningful. We rather propose to perform deblurring prior to the unmixing step and numerical experiments are conducted in the next section to assess the gain of doing so.

To conclude this section, we note that blurring caused by a nonnegative PSF results in a *contraction property* whose importance increases with the PSF width. We will come back to that point in section 8.4.

8.3.3 Experimental results

To quantitatively assess the effects of deblurring on hyperspectral unmixing, we use synthetic data so that the extracted endmembers may be compared to their true counterparts. First, we select $P = 3$ true independent endmembers from the United States Geological Survey (USGS) spectral library¹¹, displayed in figure 8.6. Each endmember signature is sampled on 224 spectral bands. We then synthesize a set of P random two-dimensional (2D) 30×30 abundance maps modeled as a mixture of 2D Gaussian functions with random locations and widths, under the constraint that the abundances for each pixel sum to one : see figure 8.7. The true data stack is then computed using equation (8.1).

Image degradation is simulated by convolving each channel with a 2D Gaussian PSF whose width varies linearly with the channel index, from one pixel to the entire field of view. The approximation of physical PSFs by 2D Gaussian functions is actually reasonable for numerous optical systems, including fluorescence microscopy [Zhang et al., 2007], Raman microscopy [De Grauw et al., 1997] and atmospheric turbulence [Zhao et al., 2013]. We then add i.i.d. Gaussian noise at a specific SNR value. We wish to evaluate the effect of deconvolution for different noise levels. Hence, we run three separate experiments with respective SNRs of 5dB, 25dB and 50dB. The rationale for these values is that at 5dB, the role of the deconvolution algorithm is to both denoise and deblur the data, while at 50 dB its main role will consist in deblurring. A SNR of 25dB is viewed as a more standard situation.

Image deconvolution is achieved using the algorithm described in chapter 7 which accounts for spectral and spatial smoothness and non-negativity of multispectral and hyperspectral data. The rationale for this choice is that the priors of the methods are well adapted to the data

11. Available online from : <http://speclab.cr.usgs.gov/spectral-lib.html>

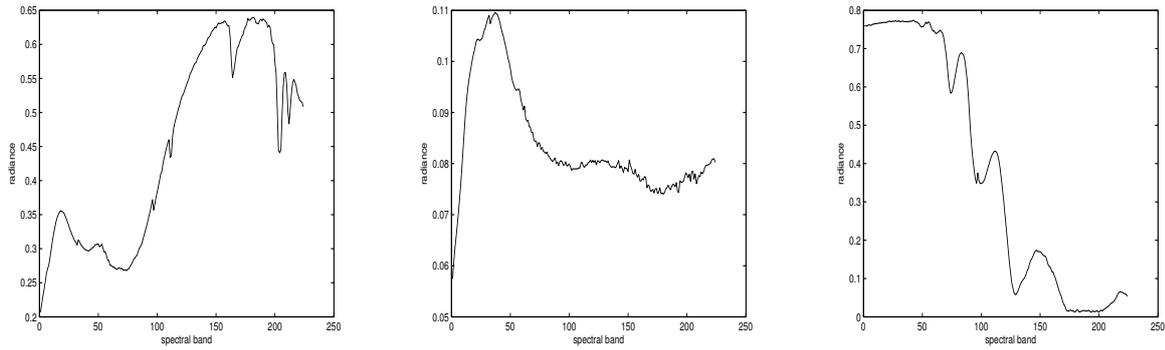


FIGURE 8.6 – Selected endmembers.

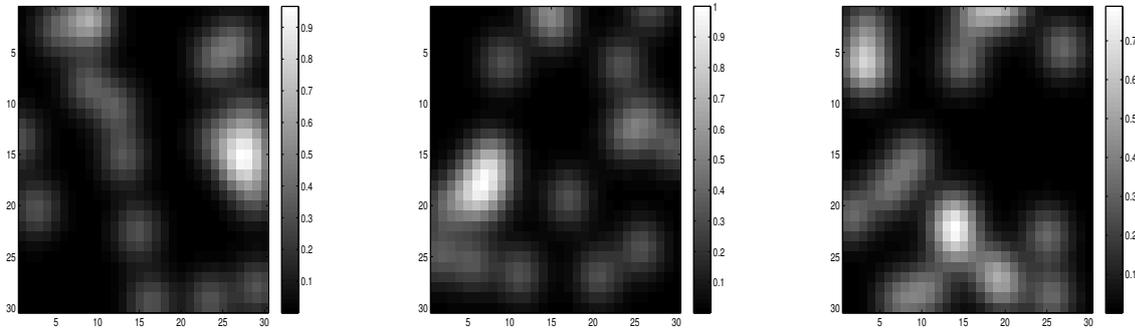


FIGURE 8.7 – Examples of abundance maps generated as spatial mixtures of 2D Gaussian distributions with random means and variances.

and its low complexity allows a computationally efficient simulation. This algorithm requires tuning two regularization parameters, weighting respectively a spatial and spectral smoothness prior, denoted by μ and ν . For each situation, we run the algorithm by setting these parameters on a 10×10 logarithmic grid, with values ranging from 10^{-4} to 10^2 . Since we only evaluate hyperparameters on a finite grid, deconvolution of the data may not be optimal. However, the deconvolved image is always closer to the true image in the mean square error sense.

For each experiment, spectral unmixing is carried out on both the degraded data set and the deconvolved data set. Endmember extraction is performed using three widespread geometrical-based algorithms : *Vertex Component Analysis* (VCA) [Nascimento et Bioucas-Dias, 2005], *Minimum-Volume Enclosing Simplex* (MVES) [Chan et al., 2009] and *Simplex Identification via variable Splitting and Augmented Lagrangian* (SISAL) [Bioucas-Dias, 2009], using MATLAB code published by the authors. Abundance estimation is automatically carried out with MVES and we use Fully Constrained Least Squares inversion (FCLS) [Heinz et Chang, 2001] to compute abundances for VCA and SISAL. While VCA is based on the pure pixel hypothesis, both MVES and SISAL are minimum-volume algorithms, hence the choice of these three methods allows the scrutiny of a wide range of situations. The goal here is to evaluate the increase of performance brought by a deconvolution step for all algorithms, rather than comparing the results of one algorithm to another, which would not be fair as they depend on the situation at hand.

We choose the following performance metrics :

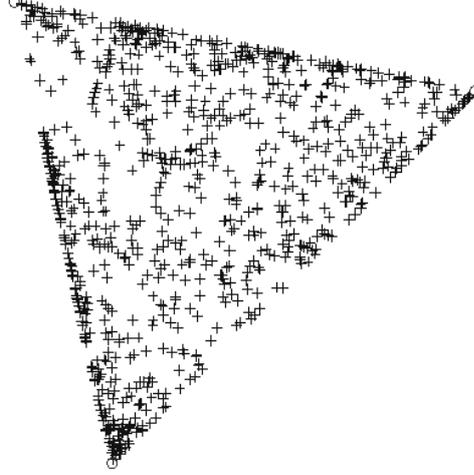


FIGURE 8.8 – Original data simplex (with no blur and noise) obtained by Principal Component Analysis and orthogonal projection. Pixel vectors are denoted by the symbol '+', endmembers by circles.

1. the *spectral angle distance* (SAD) between the true and extracted endmembers :

$$SAD_p = \cos^{-1} \left(\frac{\mathbf{s}_p^T \hat{\mathbf{s}}_p}{\|\mathbf{s}_p\|_2 \|\hat{\mathbf{s}}_p\|_2} \right), p = 1 \dots P. \quad (8.12)$$

The total SAD is given by $SAD = \sum_p SAD_p$;

2. The *Mean Square Error* (MSE) between the true and estimated abundances, given by

$$MSE = \|\hat{\mathbf{A}} - \mathbf{A}\|_F^2. \quad (8.13)$$

We then store the unmixing results on the raw data for each point of the hyperparameter grid and select the point which corresponds to the best extraction SAD. This choice is arbitrary : depending on the application, it may be better to select the deconvolution result yielding the smallest abundance estimation MSE. In either case, we point out that both these quantities could provide interesting criteria for hyperparameter selection.

Tables 8.1 and 8.2 gives the various performances obtained for endmember extraction and abundance estimation by VCA, MVES and SISAL with and without a prior deconvolution step. Deconvolving the image prior to image unmixing improves the results for all algorithms.

8.4 Case of PSF invariance

In this section, we focus on the specific case where the PSF is invariant across channels. This case is actually important in practice and arises in many imaging situations, such as Raman microscopy.

SNR	Endmember extraction SAD					
	VCA		MVES		SISAL	
Data	Raw	Restored	Raw	Restored	Raw	Restored
5	0.8840	0.4344	2.2361	0.5206	0.8439	0.4936
25	0.8951	0.2780	0.6640	0.583	0.7856	0.4385
50	0.8926	0.2915	3.0823	0.4330	0.8527	0.4176

TABLE 8.1 – Endmember extraction errors for a variant PSF.

SNR	Abundance estimation MSE					
	VCA		MVES		SISAL	
Data	Raw	Restored	Raw	Restored	Raw	Restored
5	0.0032	0.0029	0.0062	0.0031	0.0035	0.0027
25	0.0046	0.0085	0.0037	0.0041	0.0035	0.0027
50	0.0046	0.0082	0.0062	0.0018	0.0035	0.0017

TABLE 8.2 – Abundance estimation errors for a variant PSF.

8.4.1 Bilinear model

In the specific case where the PSF is invariant across channels, model (8.11) reduces to the bilinear equation $\mathbf{Y} = \mathbf{SAH} + \mathbf{W}$ where each dimension-reduced pixel is given by

$$\hat{\mathbf{y}}_k = \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P A_{p,n} H_{n,k} \hat{\mathbf{s}}_p + \hat{\mathbf{w}}_k. \quad (8.14)$$

The k -th projected pixel vector $\hat{\mathbf{y}}_k = \hat{\mathbf{y}}_k / \hat{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{u}$ is then a noisy bilinear combination of the projected endmembers $\{\hat{\mathbf{s}}_p = \hat{\mathbf{s}}_p / \hat{\mathbf{s}}_p^T \mathbf{u}, p = 1 \dots P\}$:

$$\hat{\mathbf{y}}_k = \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P \alpha'_{p,n,k} \hat{\mathbf{s}}_p + \frac{\hat{\mathbf{w}}_k^T \mathbf{u}}{\hat{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{u}} \hat{\mathbf{w}}_k. \quad (8.15)$$

where coefficients $\alpha'_{p,n,k}$ are given by

$$\alpha'_{p,n,k} = A_{p,n} H_{n,k} \frac{\hat{\mathbf{s}}_p^T \mathbf{u}}{\hat{\mathbf{y}}_k^T \mathbf{u}} = \frac{A_{p,n} H_{n,k} \hat{\mathbf{s}}_p^T \mathbf{u}}{\sum_{q,m} A_{q,m} H_{m,k} \hat{\mathbf{s}}_q^T \mathbf{u}}. \quad (8.16)$$

From equation (8.16), we can see that coefficients $\alpha'_{p,n,k}$ satisfy the nonnegativity and sum-to-one properties :

1. $\alpha'_{p,n,k} \geq 0$ for all p, n and k under the ANC and knowing that PSFs entries are nonnegative ;
2. $\sum_{p,n} \alpha'_{p,n,k} = 1$ for all $k = 1 \dots N$.

Thus, in the case where the PSF is invariant across channels and in the absence of noise, the observed pixel vectors $\{\hat{\mathbf{y}}_k, k = 1 \dots N\}$ remain in the simplex \mathcal{S} (defined in equation (8.7)). However, the additional mixing introduced by the PSF may hinder spectral unmixing in a different way, as shown in section 8.4.2.

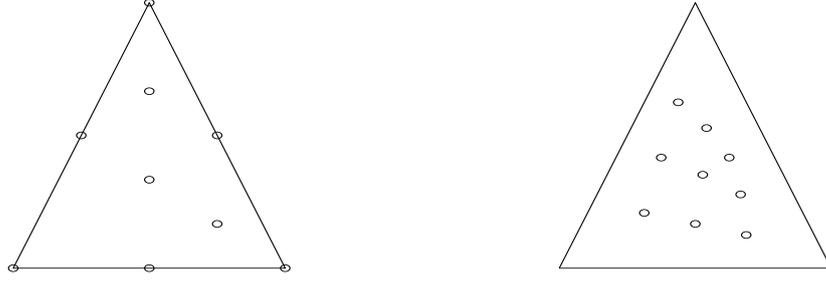


FIGURE 8.9 – Left : original projected pixel vectors, right : degraded projected pixel vectors. The data cloud is shrunk by the observation process and pure pixels become mixed in the observed data.

8.4.2 MVS contraction

How does the observation process affect the distribution of pixel vectors inside the simplex? The answer to the question obviously depends on the nature of the PSF. Since the entries of \mathbf{H} are known to be nonnegative, the blurring process tends to average neighboring pixel intensities. Hence :

1. suppose the data include a pure pixel \mathbf{x}_n : then $\hat{\mathbf{x}}_n$ locates on a vertex of \mathcal{S} . If a mixed pixel \mathbf{x}_m is in the spatial neighborhood of \mathbf{x}_n , the observed \mathbf{y}_n will appear mixed in the observed image, which will relocate $\hat{\mathbf{y}}_n$ towards the inside of \mathcal{S} ;
2. similarly, if a source \mathbf{s}_p is not present in a given pixel \mathbf{x}_n but appears in its neighborhood, the observed pixel vector \mathbf{y}_n will include a contribution from \mathbf{s}_p and $\hat{\mathbf{y}}_n$ will move towards the inside of \mathcal{S} .

This phenomenon inclines observed spectral vectors to cluster towards the center of \mathcal{S} . As a graphical illustration, consider for a simple multispectral image with $3 \times 3 = 9$ pixels and 3 spectral bands, each blurred with a 3×3 averaging kernel :

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 1/9 & 1/9 & 1/9 \\ 1/9 & 1/9 & 1/9 \\ 1/9 & 1/9 & 1/9 \end{pmatrix}. \quad (8.17)$$

Suppose our data set satisfies the pure pixel hypothesis, and also includes some mixed pixels, yielding the following 3×9 abundance matrix :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 0 & 1/2 & 1/3 & 1/6 & 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/3 & 1/6 & 1 & 2/3 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1 & 0 & 1/3 & 2/3 & 0 & 1/6 & 1/2 \end{pmatrix}. \quad (8.18)$$

The resulting simplexes for the original and degraded data are given in figure 8.9. The data cloud clearly suffers a shrinkage inside of \mathcal{S} from the observation process. Let us now formally state this contraction property, using the notion of *convex hull*. The convex hull of the data should not be confused with the MVS which necessarily has P vertices ; in contrast, the convex hull has up to N vertices which all are pixels.

Proposition 1 Let $\mathcal{S}_{\mathbf{x}}^*$ denote the MVS enclosing the true data \mathbf{X} , $\mathcal{S}_{\mathbf{y}}^*$ the one enclosing the blurred data \mathbf{Y} and \mathcal{V} denote the volume. If the PSF is nonnegative, then the convex hull of $\hat{\mathbf{Y}}$ is enclosed in the convex hull of $\hat{\mathbf{X}}$ and

$$\mathcal{V}(\mathcal{S}_{\mathbf{y}}^*) \leq \mathcal{V}(\mathcal{S}_{\mathbf{x}}^*) \quad (8.19)$$

Proof 2 Assume the PSF coefficients are nonnegative. Then each observed pixel $\hat{\mathbf{y}}_k$ is a linear nonnegative combination of the original pixels $\{\hat{\mathbf{x}}_n, n = 1 \dots N\}$ (or possibly a subset of $\hat{\mathbf{X}}$ depending on the support of the PSF). Hence $\hat{\mathbf{y}}_k$ belongs to the conical hull of $\hat{\mathbf{X}}$ for each k . It follows that the convex hull of the projected observed pixel vectors $\{\hat{\mathbf{y}}_k, k = 1 \dots N\}$ is included in the convex hull of $\{\hat{\mathbf{x}}_n, n = 1 \dots N\}$.

Therefore $\mathcal{S}_{\mathbf{x}}^*$ encloses all pixels $\{\hat{\mathbf{y}}_k, k = 1 \dots N\}$. Since $\mathcal{S}_{\mathbf{y}}^*$ is the MVS enclosing $\{\hat{\mathbf{y}}_k, k = 1 \dots N\}$, we necessarily have

$$\mathcal{V}(\mathcal{S}_{\mathbf{y}}^*) \leq \mathcal{V}(\mathcal{S}_{\mathbf{x}}^*) \quad (8.20)$$

(Note however that while the volume of $\mathcal{S}_{\mathbf{y}}^*$ is smaller, $\mathcal{S}_{\mathbf{y}}^*$ is not necessarily included in $\mathcal{S}_{\mathbf{x}}^*$.)

In the case of Gaussian PSFs, Proposition 1 has an interesting consequence for the variant PSF case.

Proposition 2 Consider two symmetric separable 2D Gaussian PSFs \mathcal{H}_1 and \mathcal{H}_2 of respective width satisfying $\sigma_1 > \sigma_2$. Let $\{\hat{\mathbf{y}}_1, \hat{\mathbf{y}}_2\}$ denote the respective observed projected pixels and $\{\mathcal{S}_1^*, \mathcal{S}_2^*\}$ the respective MVSs. Then the convex hull of $\hat{\mathbf{y}}_1$ is included in the convex hull of $\hat{\mathbf{y}}_2$ and $\mathcal{V}(\mathcal{S}_1^*) \leq \mathcal{V}(\mathcal{S}_2^*)$.

Proof 3 The PSFs being separable, \mathcal{H}_1 may be written as the 2D convolution product of \mathcal{H}_2 and a Gaussian kernel of standard deviation $\sqrt{\sigma_1^2 - \sigma_2^2}$. Since all kernels are nonnegative, Proposition 2 is a straightforward application of Proposition 1.

Getting back to the idea of pixel trajectories outlined in section (8.3.2), when the PSF width increases with the channel, proposition (2) allows us to deduce that the convex hull of points at a given channel ℓ is included in the convex hull of points at channel $\ell - 1$. We now resume the discussion of the invariant PSF case.

Hence, we know from section 8.2.3 that directly applying a geometrical unmixing algorithm to the observed data may produce incorrect endmembers, and thus the subsequent estimation of abundances will also be biased. In the next section, we study the improvement of unmixing performance after applying a deconvolution algorithm to the data.

8.4.3 Experimental results

Here, we consider the effect of the standard deviation of the PSF on our performance metric, using the same synthetic data and experimental protocol as in section 8.3.3. For a fixed SNR value, we consider each kernel size from one pixel ($\sigma = 0.1$) to the entire field of view of the image ($\sigma = 5$). For each value of σ , we run the deconvolution algorithm for spatial and spectral regularization parameters on the previously used grid. We display our experimental results on figure 8.11 and note a few key points :

1. As expected, the performance of both endmember extraction and abundance estimation are better after a deconvolution step, the margin between the two results tending to increase with σ except for a few localized values of σ . The reason why the unmixing algorithms perform slightly better on the raw data for these values certainly owes to the limited tuning of hyperparameters in the deconvolution step.

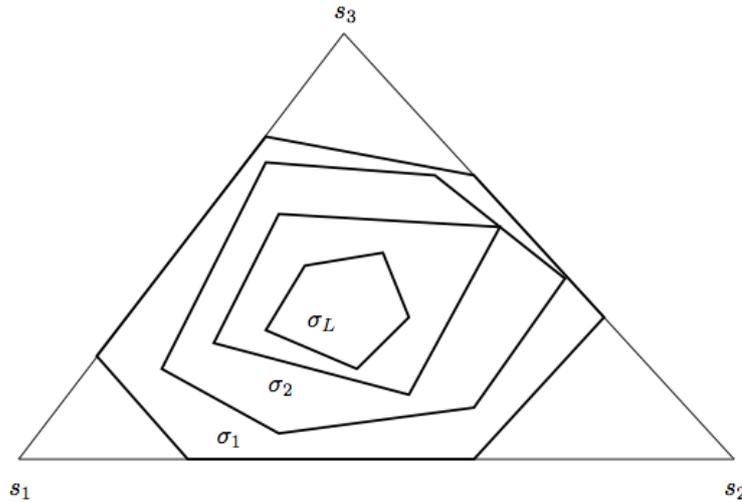


FIGURE 8.10 – Illustration of the nesting property of convex hulls from channel to channel (variant PSF case).

2. All unmixing results show a decrease in performance, both in terms of endmember extraction (increase of SAD) and abundance estimation (increase of MSE) when σ increases. Owing to the random initializations of the unmixing algorithms, the error curves are not purely monotonic. The decrease in performance seems very intuitive since the severity of the observed data degradation increases with σ .
3. The parameter search on the deconvolution step allows to stabilize the solution. Of course, the simulation makes use of ground truth while computing the best parameter values. In order to perform tuning in real imaging situations, one could use a library of spectral signatures and seek the parameters minimizing the spectral angle distance between the extracted endmembers and the corresponding ground truth endmembers that are a priori known to be present in the image.

Figure 8.12 is a geometrical view of the results of figure 8.11 illustrating the distance between the unknown and recovered sources, both on the raw and restored data for three values of the PSF spread σ . The results clearly show the MVS contraction caused by the blurring process and the reverse effect of the deconvolution step.

Let us sum up our experimental results in the invariant PSF case. A prior deconvolution step increases the performance of endmember extraction and abundance estimation for a vast majority of σ values. Of course, the wide variety of situations (abundance maps, endmembers, PSF spread, SNR, ...) make general statements difficult to quantify. However, in all our experiments, the unmixing results after deconvolution were always at least comparable and most of the time much better than the results obtained on the raw data.

Comparison of the (deconvolution / unmixing) and (unmixing / deconvolution) procedures

As a final point, let us now experimentally compare the abundance maps estimated from the (deconvolution / unmixing) and (unmixing / deconvolution) procedures. Although the latter one is cheaper - one only needs to restore P abundance maps as opposed to L spectral bands, it is clear from the above discussion that its results will suffer from the MVS contraction property.

First, consider the case of small value of σ : estimation results are displayed in figure 8.13. As evidenced by the simplices of the true, observed and restored data, the MVS contraction is not severe and both procedures yield abundance maps resembling the true ones. Note that the third abundance map from the (unmixing / deconvolution) procedure is slightly incorrect, which might be attributed to the loss of the prior information in the deconvolution step. Indeed, the P abundance maps are independent, unlike the L spectral bands which are expected to be spectrally smooth. However, in the case of a large value of σ , the (deconvolution / unmixing) procedure is clearly the better choice, as evidenced in figure 8.14. Although the deconvolution step cannot perfectly restore the true data, the abundance maps estimated from the restored stack resemble the true ones, whereas the abundance maps estimated from the (unmixing / deconvolution) procedure are severely wrong.

8.5 Experimental results on real data

In this section, we evaluate the gain of deconvolution on unmixing real Raman spectroscopy data. Our hyperspectral data set comprises images of size 98×131 pixels, each pixel being $100 \text{ nm} \times 100 \text{ nm}$, acquired on 337 bands ranging from 800 cm^{-1} to 1200 cm^{-1} . The scene of interest consists in a grain of *sodium acetate* (CH_3COONa) covered with *sodium carbonate* (Na_2CO_3) laying on a *silicon* layer (Si). Part of the sodium carbonate reacts with water vapor to yield hydrated sodium carbonate. These four chemical compounds are the endmembers we seek. A thorough inspection of the data reveals that the silicon compound contributes to all pixels of the image. The extraction of these endmembers is a challenging problem, since silicon is the only compound for which the pure pixel assumption is fulfilled. Because of the inherent high mixing of the data, even MV methods are not supposed to produce good results on this data set.

Given the limited spectral range, the PSF is considered to be invariant across channels. It is modeled as a 2D Gaussian function [De Grauw et al., 1997] with an experimentally measured full-width at half maximum of 300 nm. We apply our deconvolution algorithm to the data by setting regularization parameters through a trial-and-error process to $\mu_s = 20$ and $\mu_\lambda = 5$.

VCA and FCLS are carried out on both the raw data matrix and its restored counterpart ; the results are displayed in figure 8.16. The first endmember displayed in figure 8.15 corresponds to the silicon layer, which presents a broad band at $910 - 960 \text{ cm}^{-1}$ due to the 2TO harmonic phonon mode of bulk silicon. The deconvolution step allows to denoise its abundance map and more importantly, uncovers structure that was distributed throughout other abundance maps. The second endmember is sodium acetate, with a peak at 930 cm^{-1} due to the intense C-C stretching mode of the acetate molecule [Wang et al., 2005]. It is well isolated by VCA (both for the raw and restored data), perhaps because the width of the grain make this endmember almost uniquely contribute to some pixels. However, the third and fourth endmembers present mixed spectral contributions from all compounds : both forms of sodium carbonate, hydrated and non hydrated (respective peaks at 1060 and 1080 cm^{-1}) as well as silicon and sodium acetate. The deconvolution step again reveals structure in the fourth endmember that was not displayed in the case of raw data.

Further analysis of the spectra also show bands at 840 cm^{-1} and 1004 cm^{-1} , which reveals that the data have accidentally been polluted with sodium benzoate ($\text{NaC}_7\text{H}_5\text{O}_2$) [De Veij et al., 2009]. Because this compound is associated with the sodium carbonate phase, experiments with 5 endmembers do not yield improvements, both compounds being mixed in a unique endmember.

Both MVES and SISAL extract endmembers with negative peaks from this data set, rending them physically unmeaningful, so we do not include results from these algorithms. However,

we employ another minimum-volume algorithm : the *Nonnegative Matrix Factorization* (NMF) with volume constraints (*NMF-vol*) on the inferred simplex [Miao et Qi, 2007]. The algorithm operates on both the raw data (where negative pixels have been clipped to zero since the algorithm imposes a nonnegative data matrix) and restored data. Due to computation times, it was not possible to include this method in our previous simulations on synthetic data ; here we set 10000 as the maximum number of iterations. The resulting abundance maps and endmembers are given in figures 8.15 and 8.16. The spectral shapes of endmembers extracted from the raw data appear noisier, a problem solved by the deconvolution step. The sodium acetate endmember displays more undesirable contribution from the silicon compound. However, the algorithm is able to separate the sodium carbonate compound (third endmember, characterized by the peak at 1080 cm^{-1}) from the hydrated sodium carbonate compound (fourth endmember, peak at 1060 cm^{-1}) ; both are mixed with the sodium benzoate, as expected. The main gain of deconvolution clearly appears on the third endmember, where the silicon contribution is completely suppressed. Another benefit of the restoration step is to reveal structure hidden in raw abundance maps (first and third endmember).

8.6 Conclusion

In this chapter, we have analyzed the effect of a linear observation system on geometrical hyperspectral unmixing. When the observation system varies with the spectral channels, the joint mixing and observation model is no longer bilinear. Blurring by a nonnegative PSF results in the contraction of the minimum volume simplex enclosing the data. We formally prove the contraction property in the case of a spectrally constant PSF and show that its extent increases with the PSF width. Hence, unmixing blurred hyperspectral data is expected to significantly benefit from a deconvolution procedure, which we demonstrate in terms of endmember extraction and abundance estimations using both synthetic and real Raman spectroscopic data. Comparing the benefits and computational costs of a sequential or joint deconvolution and unmixing approach remains an open problem, especially when one needs to resort to blind deconvolution methods. Perspectives also include identifying application domains where the issue might have been overlooked, e.g. microscopy and ground-based astrophysical imaging, and addressing nonlinear unmixing schemes [Honeine et al., 2013].

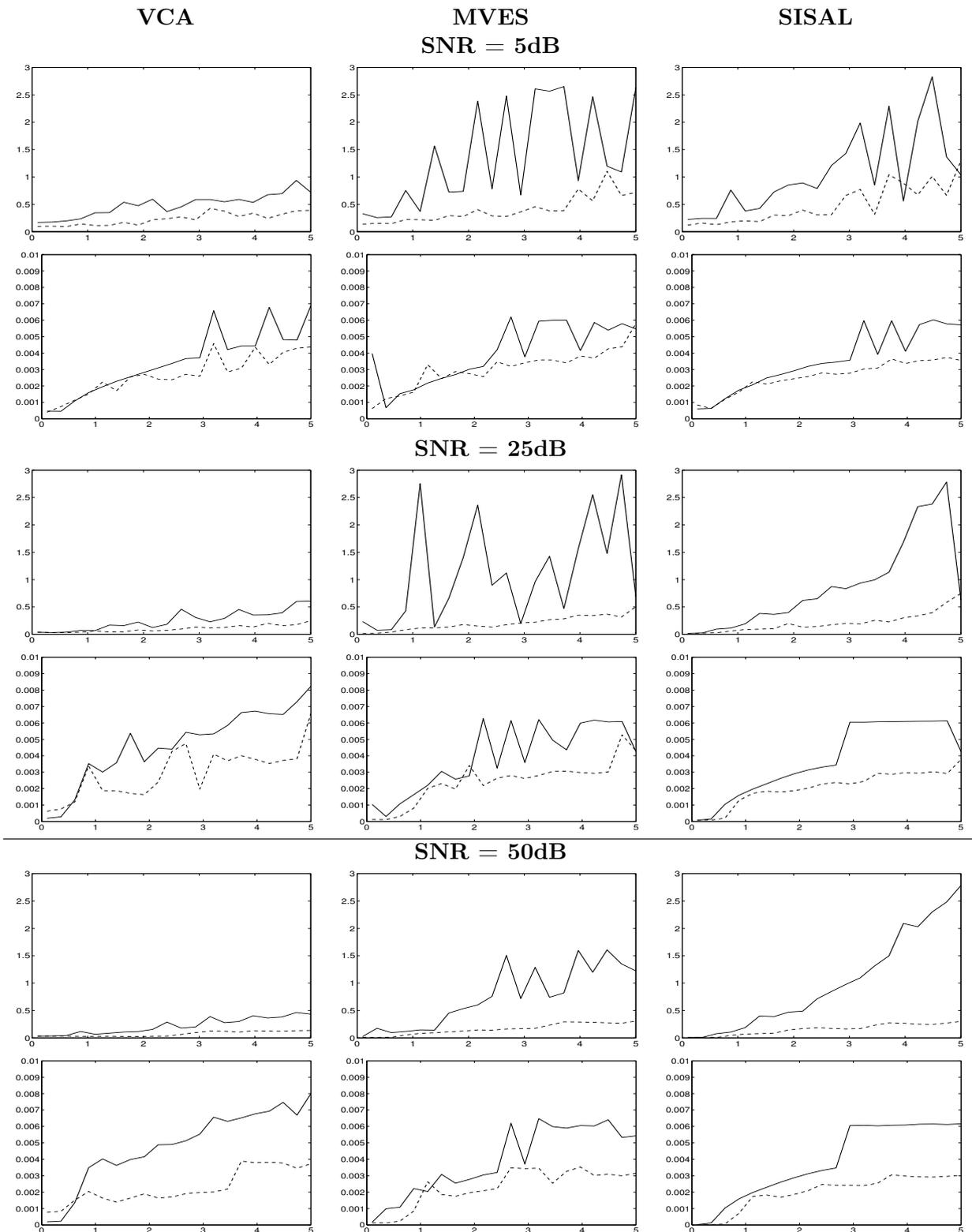


FIGURE 8.11 – Performance of unmixing methods as a function of the PSF spread σ . First column : VCA, second : MVES, third : SISAL. For each SNR section, the first row displays the spectral angle divergence between the observed / restored extracted endmembers and their true counterparts (respectively solid and dotted line). The second row displays the mean square error between the observed / restored estimated abundances and their true counterparts.

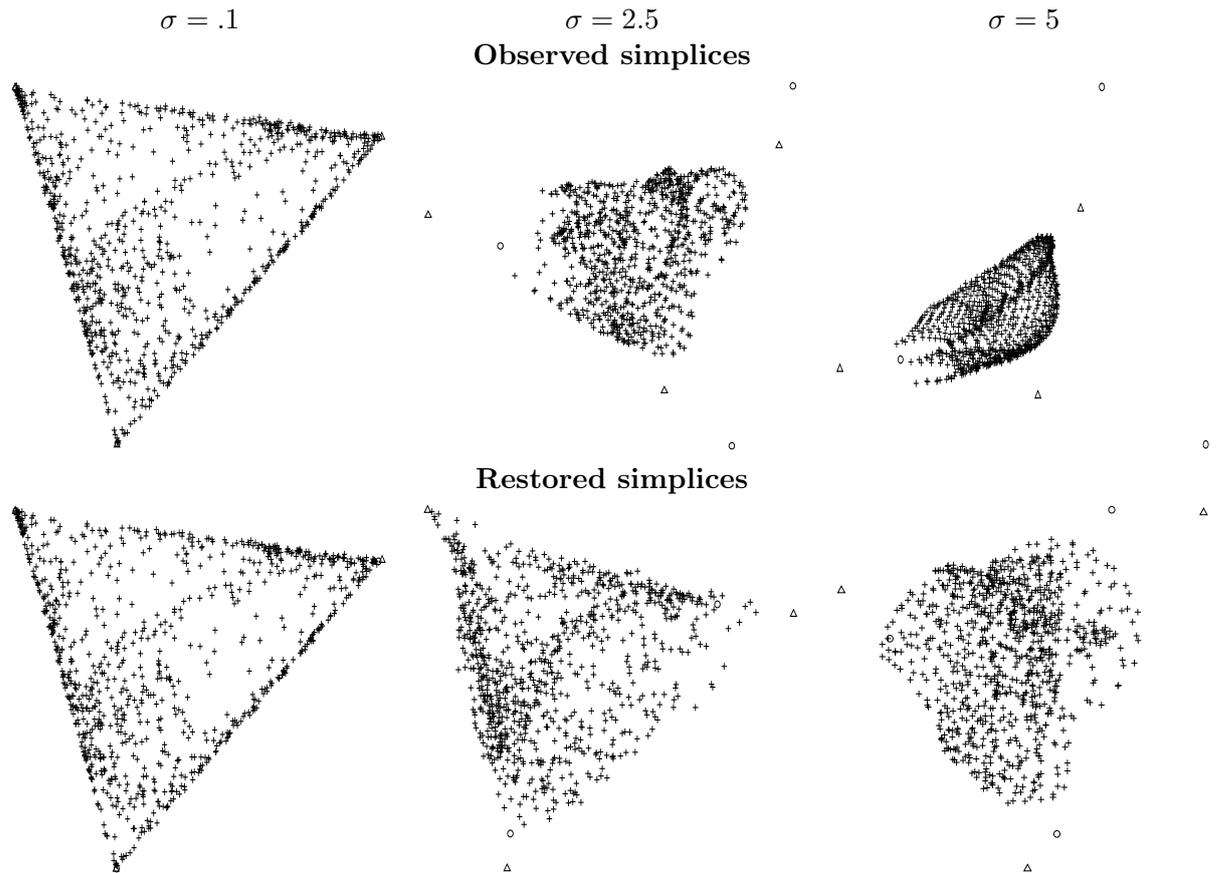


FIGURE 8.12 – Observed and SISAL-restored simplices for three values of σ and a SNR of 25dB. $\sigma = .1$ corresponds to no blurring (the PSF is only one pixel) while the PSF covers the entire field of view for $\sigma = 5$. Pixel vectors are denoted by the symbol '+'; true endmembers by circles; SISAL-estimated endmembers by triangles. The MVS contraction is increasingly severe when σ increases.

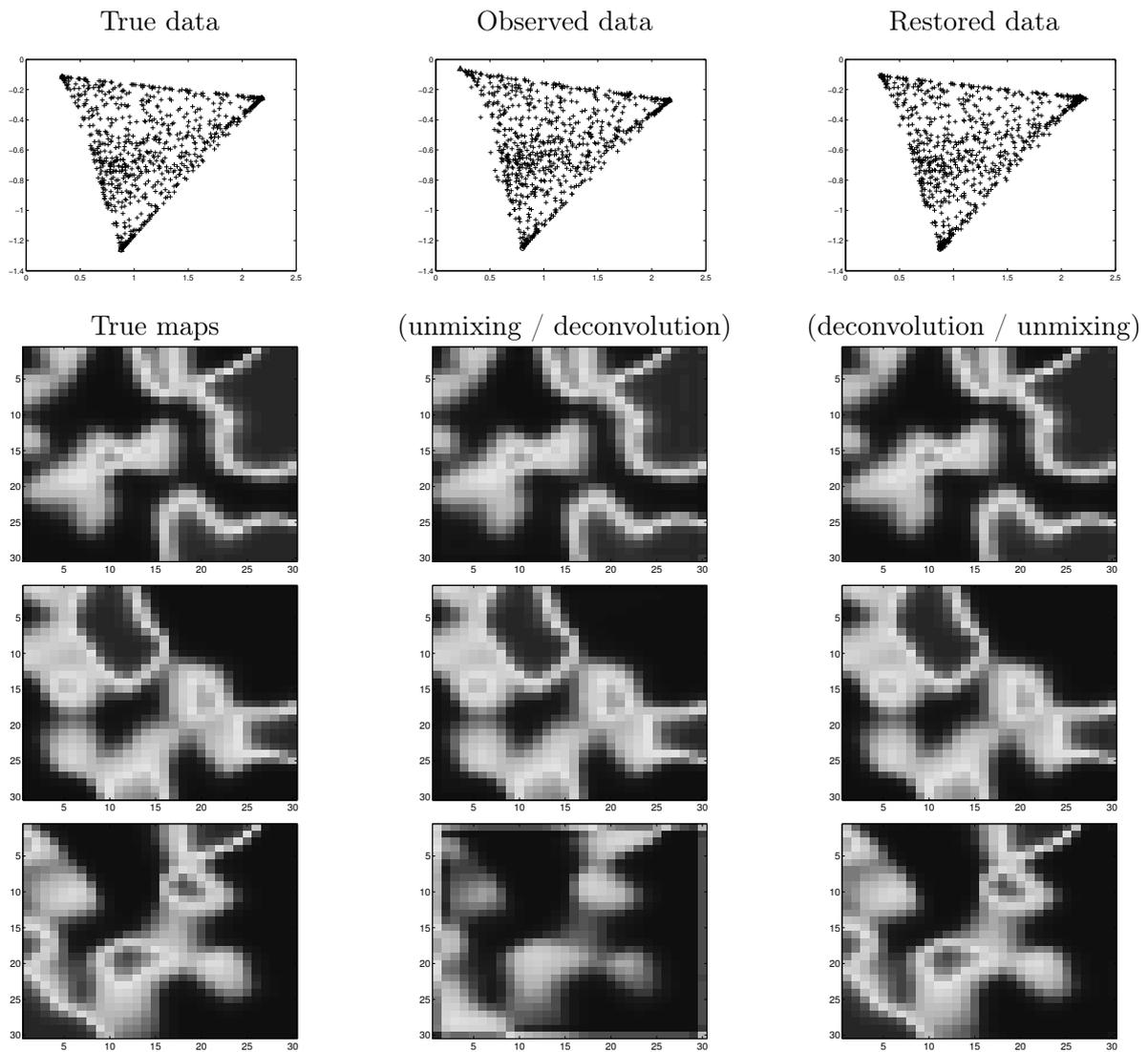


FIGURE 8.13 – Simplices and estimated abundances from an image blurred by a small PSF.

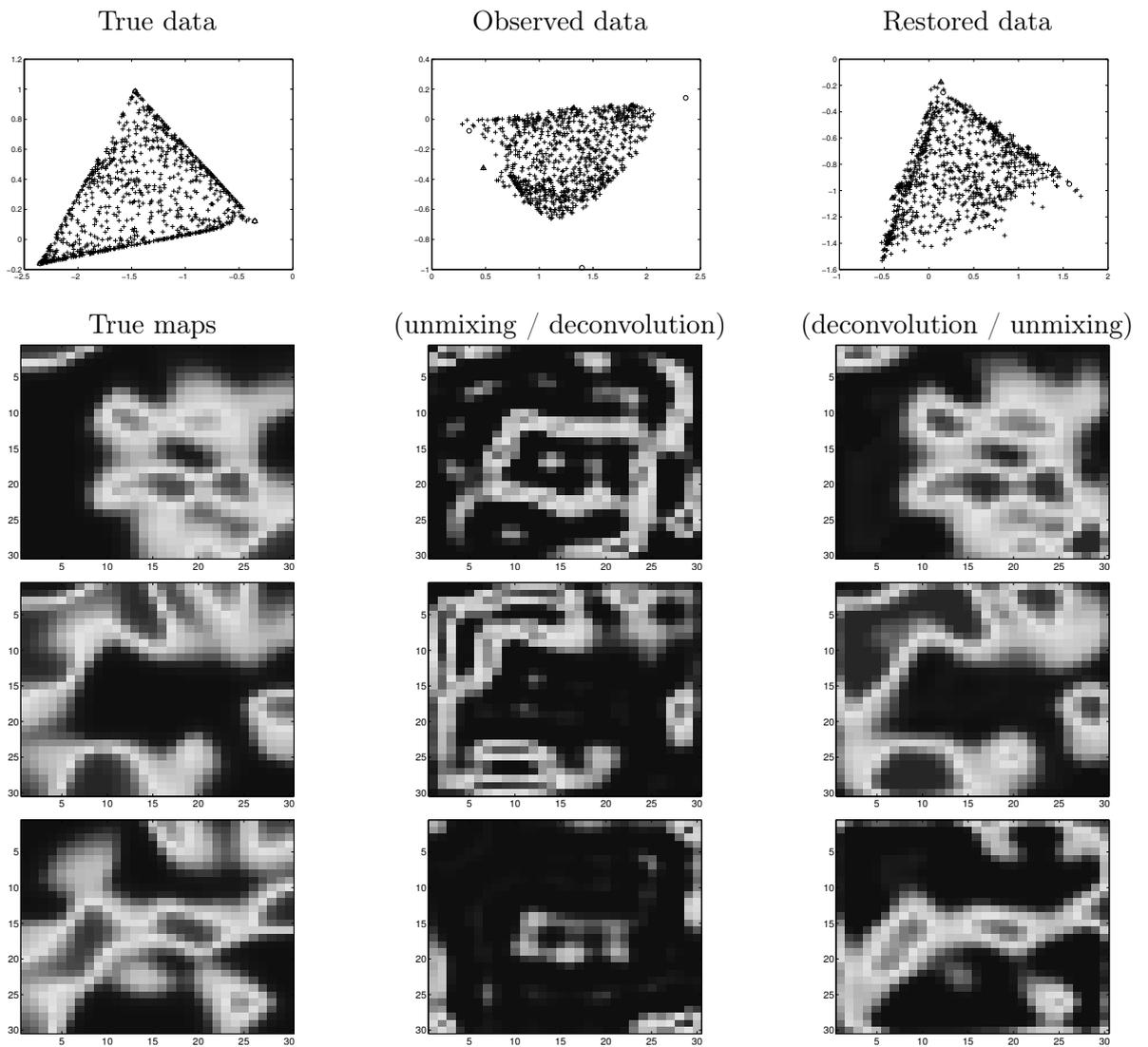


FIGURE 8.14 – Simplices and estimated abundances from an image blurred by a large PSF.

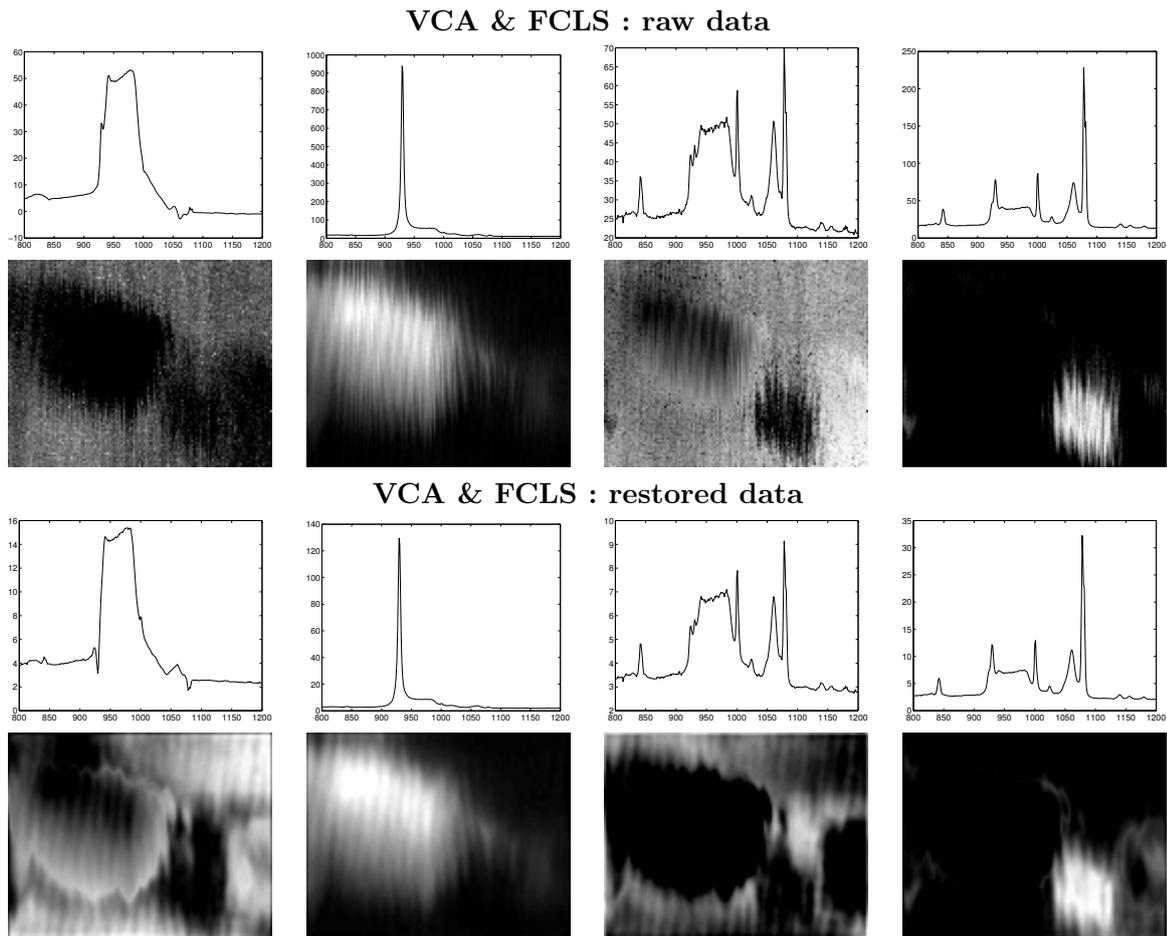


FIGURE 8.15 – Spectral unmixing results on the real Raman spectroscopy data set. The first and second row are respectively the abundance maps and endmembers obtained by VCA and FCLS applied on the raw data. The third and fourth row are obtained by VCA and FCLS applied on the restored data.

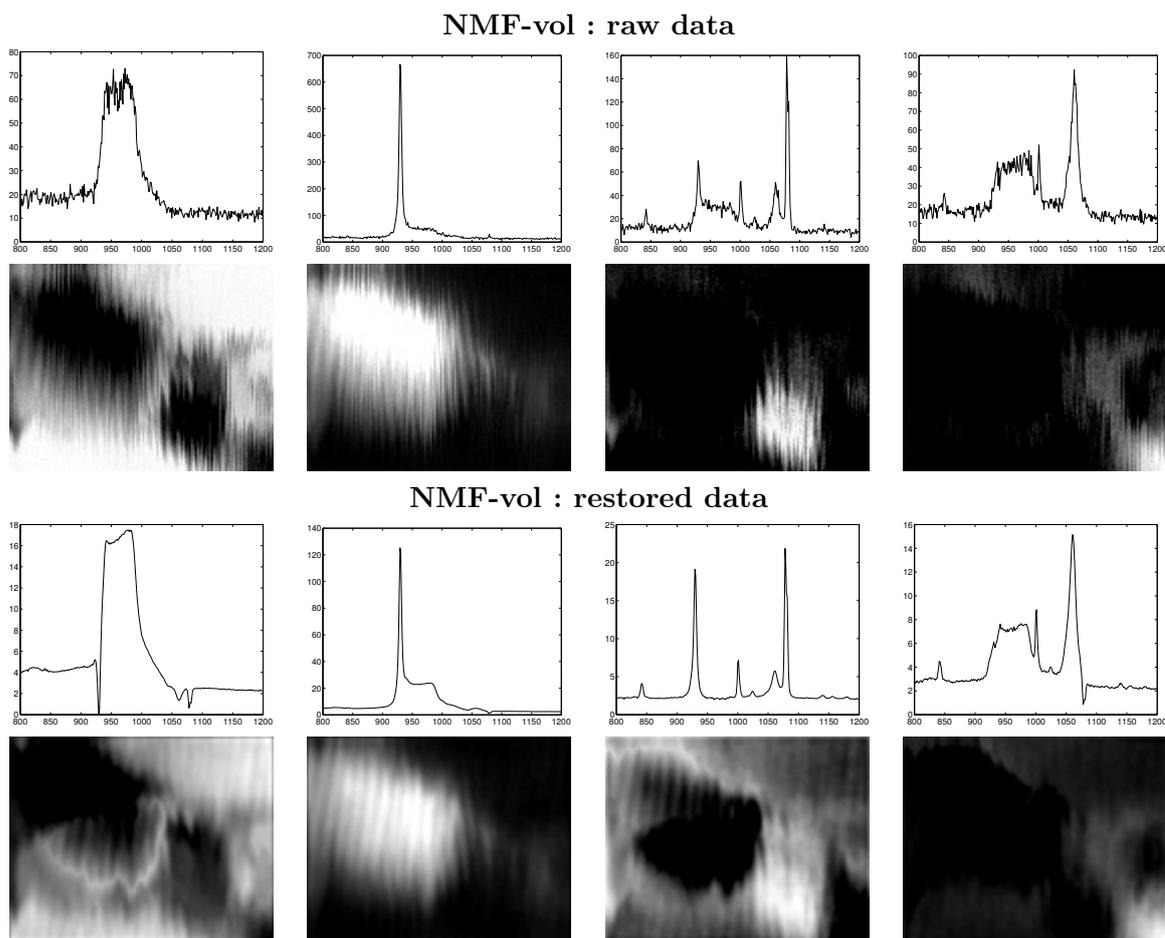


FIGURE 8.16 – Spectral unmixing results on the real Raman spectroscopy data set. The first and second row are respectively the abundance maps and endmembers obtained by NMF-VOL applied on the raw data. The third and fourth row are obtained by NMF-vol applied on the restored data.

Conclusion générale

1 Bilan

Nous avons étudié dans ce document deux problèmes inverses en imagerie hyperspectrale acquise en microscopie.

La première partie du travail a été focalisée sur l'étude des modèles de formation et d'acquisition d'images hyperspectrales en microscopies confocale et plein-champ, dont la validité pour les techniques d'imagerie en fluorescence et Raman a été justifiée. La formation de l'image est abordée sous l'angle de l'optique physique, afin de faciliter les échanges avec les biologistes et physiciens impliqués dans les applications tandis que les modèles d'acquisition présentent un aspect statistique. Cette partie sert de base aux deux suivantes.

La seconde partie de la thèse propose des contributions algorithmiques dans le domaine de la restauration d'images hyperspectrales. Nous avons proposé une structure de calcul générique pouvant être utilisée pour la résolution du problème de déconvolution avec différents *a priori*, incluant une contrainte de positivité sur l'image ainsi que la préservation des contours dans l'image. Cette méthode permet l'utilisation de techniques d'optimisation de l'état de l'art telles que l'algorithme des directions alternées de la méthode des multiplicateurs (ADMM). Les performances des méthodes proposées ont été évaluées sur des données synthétiques et des images réelles de biocapteurs bactériens acquises en microscopie confocale de fluorescence.

La troisième partie du travail est axée sur le couplage du modèle d'observation convolutif développé dans la première partie avec une structure de mélange posée sur la matrice de donnée. Nous avons démontré que le flou induit par l'instrument provoque la contraction du simplexe de volume minimal contenant les données. L'intérêt de la prise en compte de la déconvolution comme étape préliminaire de la séparation a été montrée pour l'extraction des sources et le calcul des coefficients de mélange sur des données synthétiques et réelles acquises en microscopie confocale Raman.

2 Perspectives

2.1 Déconvolution d'images hyperspectrales

Parallélisation des inversions

D'un point de vue implémentation, le coût de calcul de la structure proposée dans la deuxième partie peut être considérablement diminué en parallélisant les inversions des systèmes linéaires associés à chaque fréquence spatiale. Une telle approche peut être mise en œuvre sur des réseaux logiques programmables (FPGA) ou des processeurs graphiques (GPU) [Plaza et al., 2011, Legendre et al., 2013], mais nécessite des compétences en programmation dépassant celles de l'auteur ! Elle pourrait néanmoins être implémentée dans le cadre d'un stage ou d'une collaboration.

Déconvolution aveugle

Le problème de déconvolution aveugle consiste à estimer conjointement l'image originale \mathbf{x} et la matrice d'observation \mathbf{H} à partir des données \mathbf{y} . On parle généralement de *déconvolution myope* lorsque l'estimation de \mathbf{H} est paramétrique, *e.g.* en utilisant les modèles de RIO développés dans la première partie et en supposant que les paramètres physiques d'acquisition sont inconnus ou connus de manière imprécise (voir [Park et al., 2012] pour un exemple en microscopie à force de résonance magnétique, où la résolution est accomplie dans un cadre bayésien par un algorithme de type *Metropolis-within-Gibbs*). Dans le cas d'un grand nombre de paramètres inconnus, la RIO est couramment décomposée sur une base, par exemple en utilisant les polynômes de Zernike [Mahajan et Shannon, 1994, Markham et Conchello, 1999, Soulez et al., 2012].

En reprenant l'approche du chapitre 5, le problème de déconvolution aveugle pourrait s'écrire comme la minimisation du critère

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_2^2 + \mu_s \|\mathbf{D}_s \mathbf{x}\|_2^2 + \mu_\lambda \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{x}\|_2^2 + \nu_s \|\mathbf{D}_s \mathbf{h}\|_2^2 + \nu_\lambda \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{h}\|_2^2 \quad (1)$$

où \mathbf{h} désigne la RIO hyperspectrale après réindiciation lexicographique et ν_s , ν_λ désignent les hyperparamètres de régularisation spatiale et spectrale associés. Le critère (1), bilinéaire en (\mathbf{x}, \mathbf{h}) et quadratique et généralement multimodal, mais présente des garanties de convergence vers un minimum local pour une initialisation donnée dès lors qu'on adopte une stratégie de minimisation alternée [Chan et Wong, 2000]. Sa résolution pose néanmoins des problèmes de temps de calcul et la question du choix de quatre hyperparamètres. Son application sous contrainte de positivité ou en préservant les contours semble ainsi difficile.

L'approche de déconvolution myope pourrait dispenser des termes de régularisation sur la RIO, mais ne garantit pas non plus la convergence vers un minimum global.

2.2 Sélection d'hyperparamètres

La figure 8.12 représente les simplexes de volume minimal contenant les données avant et après restauration par l'algorithme SISAL. Le flou induit par l'appareil de mesure contracte le nuage de points tandis que la procédure de déconvolution permet d'inverser partiellement cet effet. La solution « optimale » du problème de déconvolution peut ainsi être vue comme celle produisant le nuage de point pour lequel le volume de l'enveloppe convexe est maximal. Une stratégie de sélection des deux hyperparamètres μ_s et μ_λ pourrait ainsi consister à utiliser cette quantité comme mesure de la qualité de la restauration. Les écueils de cette approche sont liés aux temps de calcul impliqués par la fonction de qualité proposée.

2.3 Domaines applicatifs

Dans ce document, nous avons démontré l'intérêt de la procédure de déconvolution comme préliminaire à la séparation de sources dans le domaine de la microscopie. Physiquement, nous nous plaçons dans des situations où le flou induit par l'instrument est non négligeable. C'est par exemple le cas de l'imagerie de biocapteurs bactériens lorsque l'on observe les signaux de fluorescence à l'échelle d'une bactérie. Il est envisageable d'appliquer cette méthodologie dans d'autres domaines, *e.g.* en astrophysique : son efficacité sera croissante avec le niveau de flou des situations.

2.4 Algorithme de déconvolution et séparation conjointe

Une perspective de notre travail est de développer un algorithme appliquant conjointement les procédures de déconvolution et de séparation pour une RIO connue (le problème de déconvolution aveugle et séparation conjointe semblant rédhibitoire en termes de calculs). Une telle approche permettrait d'éviter la propagation potentielle d'erreurs liées à une procédure séquentielle de déconvolution et de séparation, ainsi que d'imposer explicitement une régularisation sur les matrices de sources et de mélange lors de la restauration.

A notre connaissance, il n'existe pas de méthode conjointe de déconvolution et séparation aveugle ; un travail récent [Zhao et al., 2013] propose une méthode de type ADMM pour estimer les coefficients de mélange en supposant la matrice de sources et la RIO connues et en imposant la parcimonie de la solution et une régularisation de type variation totale. Un travail antérieur [Moudden et al., 2008] souligne la difficulté du problème aveugle et propose un algorithme pour le résoudre lorsque les coefficients de mélange sont connus.

RIO spectralement invariante

Dans le cas où la RIO est invariante selon les canaux, le terme d'adéquation aux données $\mathbf{Y} - \mathbf{HSA}$ est bilinéaire en \mathbf{S} et \mathbf{A} . Une première idée consiste à utiliser la structure de calcul proposée dans la deuxième partie pour minimiser un critère de la forme

$$\|\mathbf{Y} - \mathbf{HSA}\|_F^2 + \mu_s \|\mathbf{D}_s \mathbf{a}\|_2^2 + \mu_\lambda \|\mathbf{D}_\lambda \mathbf{s}\|_2^2 \quad (2)$$

où \mathbf{a} et \mathbf{s} désignent les vecteurs obtenus respectivement par réindiciation lexicographique de \mathbf{A} et \mathbf{S} . Dans une stratégie de minimisation alternée, le terme d'adéquation aux données serait ainsi respectivement réécrit $\|\mathbf{y} - \mathbf{M}_s \mathbf{a}\|_2^2$ et $\|\mathbf{y} - \mathbf{M}_a \mathbf{s}\|_2^2$ à chaque itération de minimisation par rapport à \mathbf{a} et \mathbf{s} , où \mathbf{M}_a et \mathbf{M}_s incorporent la matrice d'observation \mathbf{H} et les matrices \mathbf{A} et \mathbf{s} « dépliées » (structure par bloc liée à la réindiciation de \mathbf{a} et \mathbf{s}). Malheureusement ces matrices ne possèdent pas la structure circulante-bloc-circulante nécessaire à l'application de notre méthode. Le coût de calcul d'une telle approche est également un problème potentiel, en particulier en cas d'adaptation à d'autres régularisations.

Une seconde possibilité pourrait consister à modifier l'approche de factorisation de matrices non négatives (NMF) : voir [Miao et Qi, 2007] pour un exemple incorporant un terme de régularisation lié au simplexe de volume minimal.

RIO spectralement variante

Le cas d'une RIO variante selon les canaux semble plus difficile à traiter en raison de la non-bilinéarité du terme d'adéquation aux données

$$F(\mathbf{S}, \mathbf{A}) = \sum_{\ell=1}^L \sum_{k=1}^N \left[Y_{\ell,k} - \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^P S_{\ell,p} A_{p,n} H_{n,k}^\ell \right]^2,$$

qui ne peut plus être factorisé sous la forme matricielle $\|\mathbf{Y} - \mathbf{HSA}\|_F^2$. La minimisation de la fonction objectif associée pose donc la question de l'existence et de l'unicité d'un minimum global. En revanche, le terme d'adéquations aux données conserve un caractère linéaire à chaque bande spectrale λ_ℓ . Il serait ainsi possible d'envisager des pistes d'optimisation par modification de l'algorithme NMF comme dans le cas précédent.

A

Convolution discrète

Lorsqu'un signal est filtré par un *système linéaire invariant*, le signal de sortie s'obtient comme la *convolution* du signal d'entrée par la réponse impulsionnelle du système ou *noyau* de convolution. Dans le cas de la convolution discrète, cette opération peut s'écrire sous forme matricielle, i.e.

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} \tag{A.1}$$

où \mathbf{x} est le signal d'entrée, \mathbf{y} est le signal de sortie et \mathbf{H} est la *matrice d'observation* ou *matrice de convolution* du système (dans toute cette partie on néglige le terme de bruit du modèle direct). On donne ici l'expression de cette matrice lorsque l'on travaille avec des signaux à support fini, à une ou deux dimensions.

A.1 Cas monodimensionnel

Par souci de clarté, on écrit les résultats pour $N = 5$ et $P = 3$:

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) \text{ et } \mathbf{h} = (h_1, h_2, h_3) \tag{A.2}$$

On obtient le *masque* de convolution en retournant horizontalement le noyau :

$$\mathbf{m} = (h_3, h_2, h_1) \tag{A.3}$$

Pour calculer la valeur de l'échantillon y_i , la méthode de convolution consiste à superposer le masque \mathbf{m} et le signal \mathbf{x} en faisant coïncider h_1 avec x_i . On réalise alors un produit terme à terme des deux signaux et y_i est obtenu en faisant la somme des valeurs obtenues. Formellement, ceci peut s'écrire :

$$y_n = \sum_{k=1}^P h_k x_{n-k+1} \tag{A.4}$$

où $P = 3$ est la longueur du noyau (l'indice $n - k + 1$ non standard résulte de l'utilisation d'indices strictement positifs pour le noyau). Pour certaines valeurs de n , cette somme contient des termes en \mathbf{x} d'indices n'appartenant pas à son support. Il est donc nécessaire de définir des conditions aux bords de \mathbf{x} .

Convolution simple

On s'intéresse ici à l'opération de *convolution simple*. En toute généralité, la matrice d'observation \mathbf{H} s'écrit :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_2 & h_1 & 0 & 0 & 0 \\ h_3 & h_2 & h_1 & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & h_2 & h_1 & 0 \\ 0 & 0 & h_3 & h_2 & h_1 \\ 0 & 0 & 0 & h_3 & h_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Il s'agit d'une matrice de Tœplitz, c'est-à-dire que ses éléments sur une diagonale descendante de gauche à droite sont constants. Les séparations par des lignes horizontales correspondent aux conditions aux bord que l'on impose au signal \mathbf{x} . Trois hypothèses sont classiques :

1. on prolonge \mathbf{x} par des zéros à gauche et à droite. \mathbf{y} est de taille $N + P - 1$ et on utilise la matrice complète ;
2. on prolonge \mathbf{x} par des zéros à gauche et on ne prend pas en compte les termes problématiques à droite. \mathbf{y} est de taille N et on tronque \mathbf{H} de sa partie inférieure ;
3. on ne prend pas en compte les termes problématiques à gauche et à droite. \mathbf{y} est de taille $N - P + 1$ et on ne conserve que la partie centrale de \mathbf{H} .

Convolution circulaire

L'opération de *convolution circulaire* notée $*$ concerne les signaux périodiques et l'*approximation circulante* consiste à prolonger le signal \mathbf{x} par périodicité. L'opération produit une séquence périodique de période N et le signal de sortie \mathbf{y} en est le motif. La matrice d'observation s'écrit :

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_1 & 0 & 0 & h_3 & h_2 \\ h_2 & h_1 & 0 & 0 & h_3 \\ h_3 & h_2 & h_1 & 0 & 0 \\ 0 & h_3 & h_2 & h_1 & 0 \\ 0 & 0 & h_3 & h_2 & h_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Il s'agit d'une matrice circulante, c'est-à-dire que chaque ligne est obtenue par permutation circulaire de la précédente (cas particulier d'une matrice de Tœplitz). L'intérêt de la convolution circulaire est qu'elle satisfait le *Théorème de Plancherel* :

$$\mathbf{y} = \mathbf{h} * \mathbf{x} \Leftrightarrow \tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{h}} \cdot \tilde{\mathbf{x}} \quad (\text{A.7})$$

où \cdot désigne le produit terme à terme ou *produit de Hadamard*. Par conséquent, cette opération peut être réalisée à l'aide de la formule suivante, présentant un faible coût de calcul :

$$\mathbf{y} = \text{FFT}^{-1}(\text{FFT}(\mathbf{h}) \cdot \text{FFT}(\mathbf{x})) \quad (\text{A.8})$$

Le spectre $\tilde{\mathbf{h}}$ est calculé en complétant le signal \mathbf{h} par $N - P$ zéros et correspond à la fonction de transfert discrète du système.

A.2 Cas bidimensionnel

On s'intéresse cette fois à la convolution de l'image \mathbf{X} de taille $M \times N$ par le noyau \mathbf{h} de taille $P \times P$ (on suppose classiquement que le noyau est une matrice carrée possédant un nombre impair de colonnes). L'objectif est d'obtenir un système linéaire de la forme :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} \quad (\text{A.9})$$

où \mathbf{y} et \mathbf{x} sont les images vectorisées. Par souci de clarté, on écrit les résultats pour $P = 3$ et $M = N = 4$:

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} & X_{14} \\ X_{21} & X_{22} & X_{23} & X_{24} \\ X_{31} & X_{32} & X_{33} & X_{34} \\ X_{41} & X_{42} & X_{43} & X_{44} \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

Le principe de la convolution à deux dimensions est similaire au cas monodimensionnel. On obtient le masque de convolution en retournant le noyau horizontalement et verticalement :

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} h_{33} & h_{32} & h_{31} \\ h_{23} & h_{22} & h_{21} \\ h_{13} & h_{12} & h_{11} \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

Pour les images, il n'y a pas de notion de causalité : on superpose le masque \mathbf{m} à l'image \mathbf{x} en faisant coïncider le pixel central $m_{(P+1)/2,(P+1)/2}$ (ici h_{22}) et le pixel $X_{i,j}$. On réalise un alors un produit terme à terme des deux matrices et $Y_{i,j}$ est obtenu en faisant la somme des valeurs obtenues. Formellement, ceci peut s'écrire :

$$Y_{i,j} = \sum_{k=-\frac{P-1}{2}}^{\frac{P-1}{2}} \sum_{l=-\frac{P-1}{2}}^{\frac{P-1}{2}} m_{\frac{P+1}{2}+k, \frac{P+1}{2}+l} X_{i-k, j-l} \quad (\text{A.12})$$

De même que dans le cas précédent, il est nécessaire de poser des conditions aux bords pour la matrice \mathbf{X} .

Convolution simple

Dans le cadre de la *convolution simple*, on prolonge l'image \mathbf{X} par des zéros dans toutes les directions afin d'imposer que l'image résultante \mathbf{Y} soit de taille $M \times N$. La matrice d'observation \mathbf{H} est Toeplitz-bloc-Toeplitz :

1. \mathbf{H} est une matrice Toeplitz par blocs, de taille $MN \times MN$
2. chaque bloc \mathbf{B}_i est une matrice de Toeplitz de taille $M \times N$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{B}_3 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 & \mathbf{B}_2 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} h_{2i} & h_{1i} & 0 & 0 \\ h_{3i} & h_{2i} & h_{1i} & 0 \\ 0 & h_{3i} & h_{2i} & h_{1i} \\ 0 & 0 & h_{3i} & h_{2i} \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

Convolution circulaire

Une seconde possibilité est de prolonger l'image \mathbf{X} par périodicité : ceci correspond à l'opération de *convolution circulaire*. La matrice d'observation \mathbf{H} est circulante-bloc-circulante :

1. \mathbf{H} est une matrice circulante par blocs, de taille $MN \times MN$
2. chaque bloc \mathbf{B}_i est une matrice circulante de taille $M \times N$

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 \\ \mathbf{B}_3 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 & \mathbf{B}_2 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} h_{2i} & h_{1i} & 0 & h_{3i} \\ h_{3i} & h_{2i} & h_{1i} & 0 \\ 0 & h_{3i} & h_{2i} & h_{1i} \\ h_{1i} & 0 & h_{3i} & h_{2i} \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

La convolution circulaire en deux dimensions peut également se calculer dans le domaine spectral :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{h} * \mathbf{X} \Leftrightarrow \tilde{\mathbf{Y}} = \tilde{\mathbf{h}} \cdot \tilde{\mathbf{X}} \quad (\text{A.15})$$

B

Normes vectorielles et matricielles

\mathbb{K} désigne un corps muni d'une valeur absolue.

B.1 Normes vectorielles

On considère un vecteur \mathbf{u} sur \mathbb{K}^n . La norme p est donnée par :

$$\|\mathbf{u}\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |u_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (\text{B.1})$$

Quelques normes vectorielles fréquemment utilisées sont :

1. la norme 1 :

$$\|\mathbf{u}\|_1 = \sum_{i=1}^n |u_i| \quad (\text{B.2})$$

2. la norme 2 ou *norme euclidienne* :

$$\|\mathbf{u}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |u_i|^2} \quad (\text{B.3})$$

3. la norme "infinie" (limite des normes p lorsque p tend vers l'infini) :

$$\|\mathbf{u}\|_\infty = \max_i |u_i| \quad (\text{B.4})$$

B.2 Normes matricielles

On considère une matrice \mathbf{U} sur $\mathbb{K}^{m \times n}$. Une norme matricielle peut être *subordonnée* à une norme vectorielle :

$$\|\mathbf{U}\| = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{U}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \quad (\text{B.5})$$

En particulier, les normes p matricielles subordonnées sont données par :

$$\|\mathbf{U}\|_p = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{U}\mathbf{x}\|_p}{\|\mathbf{x}\|_p} = \max_{\|\mathbf{x}\|_p=1} \|\mathbf{U}\mathbf{x}\|_p \quad (\text{B.6})$$

Quelques normes matricielles fréquemment utilisées sont :

1. la norme 1 :

$$\|\mathbf{U}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |U_{i,j}| \quad (\text{B.7})$$

2. la norme 2 ou *norme euclidienne* (σ désigne une valeur singulière) :

$$\|\mathbf{U}\|_2 = \sigma_{max} \quad (\text{B.8})$$

3. la norme de Frobenius (non subordonnée) :

$$\|\mathbf{U}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |U_{i,j}|^2} = \sqrt{\sum_i \sigma_i^2} \quad (\text{B.9})$$

C

Approches probabilistes de l'estimation

C.1 Approche fréquentiste

Dans le cadre de la *statistique mathématique*, le choix d'un estimateur $\hat{\mathbf{x}}$ de \mathbf{x} se fait à l'aide d'une *fonction de perte* $\mathcal{C}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})$. Cette fonction représente le coût d'une mauvaise estimation de \mathbf{x} et dispose des caractéristiques suivantes :

1. \mathcal{C} est une fonction positive
2. $\mathcal{C}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0$
3. la pénalité augmente avec l'erreur d'estimation $\mathbf{e} = \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}$

On introduit alors une *fonction de risque* $\mathcal{R}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})$ qui représente la moyenne des pertes associées au choix de l'estimateur $\hat{\mathbf{x}}$. L'écriture du risque dépend de l'approche probabiliste considérée et dans le cadre fréquentiste :

$$\mathcal{R}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) = \mathbb{E}_{\mathbf{y}}[\mathcal{C}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})] = \int \mathcal{C}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}) p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) d\mathbf{y} \quad (\text{C.1})$$

Classiquement, on utilise un coût quadratique et le risque correspond alors à l'Erreur Quadratique Moyenne (EQM) :

$$\text{EQM}(\hat{\mathbf{x}}) = \mathbb{E}_{\mathbf{y}}[(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})^2] \quad (\text{C.2})$$

Une propriété avantageuse de ce critère est de nécessiter que le calcul des deux premiers moments de l'estimateur :

$$\text{EQM}(\hat{\mathbf{x}}) = \text{var}(\hat{\mathbf{x}}) + \text{biais}(\hat{\mathbf{x}})^2 \quad (\text{C.3})$$

Malheureusement, l'utilisation de l'estimateur optimal au sens de l'EQM n'est pas possible car sa formulation dépend de l'image inconnue \mathbf{x} . Plusieurs stratégies sont alors possibles :

1. Recherche de l'*Estimateur Sans Biais à Variance Minimale* (ESBVM). Cet estimateur présente cependant deux inconvénients :
 - il n'existe pas systématiquement
 - le choix d'un estimateur biaisé peut souvent engendrer une EQM moindre en jouant sur le compromis entre biais et variance
2. Recherche de l'estimateur au sens du *maximum de vraisemblance* si l'ESBVM n'existe pas ou s'il est difficile à trouver :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) \quad (\text{C.4})$$

Un avantage de cet estimateur est qu'il existe des procédures systématiques pour le calculer :

- minimisation de l'anti-log-vraisemblance par des algorithmes d'optimisation sans contraintes :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} (-\ln(p(\mathbf{y}|\mathbf{x}))) \quad (\text{C.5})$$

- utilisation d'algorithmes de résolution d'équations non-linéaires sur un système d'équations établies analytiquement traduisant la condition nécessaire d'extremum sur le gradient

C.2 Inférence bayésienne

L'idée générale de la régularisation par minimisation d'un critère composite consiste à introduire un terme d'information *a priori* au critère afin de stabiliser la solution. Ceci peut s'interpréter dans le cadre de l'*inférence bayésienne*, où on dispose :

1. d'une densité de probabilité *a priori* sur l'image à estimer : $p(\mathbf{x})$
2. du modèle d'observation : $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$
3. d'une famille d'estimateurs : $\hat{\mathbf{x}}(\mathbf{y})$
4. d'une fonction de coût $d(\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{x})$ dont le rôle est d'évaluer la qualité des estimateurs candidats

Le choix d'une fonction de coût particulière détermine alors l'estimateur bayésien correspondant. Par exemple, si d est l'erreur quadratique moyenne, l'estimateur est :

$$\hat{\mathbf{x}} = \int \mathbf{x} p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (\text{C.6})$$

C.2.1 Lien entre régularisation et approche bayésienne

Un exemple illustre l'idée de régularisation par minimisation d'un critère composite : on se place ici dans le cadre de l'inférence bayésienne (cf annexe C.2). L'estimateur du *maximum a posteriori* (MAP) est défini par :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \quad (\text{C.7})$$

En utilisant la règle de Bayes :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \max_{\mathbf{x}} \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y})} \quad (\text{C.8})$$

le terme $p(\mathbf{y})$ ne joue qu'un rôle de normalisation :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \max_{\mathbf{x}} p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x}). \quad (\text{C.9})$$

L'estimateur au sens du MAP peut finalement s'écrire :

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} (-\ln(p(\mathbf{y}|\mathbf{x})) - \ln(p(\mathbf{x}))). \quad (\text{C.10})$$

Le premier terme du critère est l'anti-log-vraisemblance et traduit l'adéquation aux données ; le second terme représente les connaissances *a priori* introduites sur la solution. L'estimateur MAP peut donc être interprété comme une régularisation de l'estimateur du maximum de vraisemblance (avec égalité dans le cas d'une densité de probabilité *a priori* $p(\mathbf{x})$ uniforme, ce terme n'apportant aucune information). On peut noter que les autres estimateurs bayésiens sont plus difficiles à interpréter en terme de régularisation.

Bibliographie

- [Afonso et al., 2010] Afonso, M. V., Bioucas-Dias, J. M., et Figueiredo, M. A. (2010). Fast image recovery using variable splitting and constrained optimization. *IEEE Transactions on Image Processing*, 19(9) :2345–2356.
- [Akgun et al., 2005] Akgun, T., Altunbasak, Y., et Mersereau, R. (2005). Super-resolution reconstruction of hyperspectral images. *IEEE Transactions on Image Processing*, 14(11) :1860–1875.
- [Allain et al., 2006] Allain, M., Idier, J., et Goussard, Y. (2006). On global and local convergence of half-quadratic algorithms. *IEEE Trans. Image Process*, 15(5) :1130–1142.
- [Almeida et Figueiredo, 2013a] Almeida, M. et Figueiredo, M. (2013a). Deconvolving images with unknown boundaries using the alternating direction method of multipliers. *IEEE Trans. Image Process*, 22(8) :3074–3086.
- [Almeida et Figueiredo, 2013b] Almeida, M. et Figueiredo, M. (2013b). Parameter estimation for blind and non-blind deblurring using residual whiteness measures. *Image Processing, IEEE Transactions on*, 22(7) :2751–2763.
- [Bach et al., 2012] Bach, F., Jenatton, R., Mairal, J., et Obozinski, G. (2012). Optimization with sparsity-inducing penalties. *Foundations and Trends in Machine Learning*, 4(1) :1–106.
- [Bardsley et al., 2008] Bardsley, J., Merikoski, J., et Vio, R. (2008). The stabilizing properties of nonnegativity constraints in least-squares image reconstruction. *Int. J. of Pure and Applied Mathematics*, 43(1) :95–109.
- [Beck et Teboulle, 2009] Beck, A. et Teboulle, M. (2009). A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm for linear inverse problems. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 2(1) :183–202.
- [Ben Hadj et al., 2013] Ben Hadj, S., Blanc-Féraud, L., et Engler, G. (2013). Restauration aveugle d’image 3D de microscopie de fluorescence avec prise en compte des aberrations sphériques et contrainte de phase. In *Proc. 24th GRETSI Workshop, Brest, France*.
- [Benvenuto et al., 2010] Benvenuto, F., Zanella, R., Zanni, L., et Bertero, M. (2010). Nonnegative least-squares image deblurring : improved gradient projection approaches. *Inverse Problems*, 26 :1–18.
- [Bertero et al., 2009] Bertero, M., Boccacci, P., Desiderà, G., et Vicidomini, G. (2009). Image deblurring with Poisson data : from cells to galaxies. *Inverse Problems*, 12 :1–26.
- [Bioucas-Dias, 2009] Bioucas-Dias, J. (2009). A variable splitting augmented Lagrangian approach to linear spectral unmixing. In *WHISPERS : First Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing*, pages 1–4.
- [Bioucas-Dias et Nascimento, 2008] Bioucas-Dias, J. et Nascimento, J. (2008). Hyperspectral subspace identification. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 46(8) :2435–2445.

- [Bioucas-Dias et al., 2012] Bioucas-Dias, J., Plaza, A., Dobigeon, N., Parente, M., Du, Q., Gader, P., et Chanussot, J. (2012). Hyperspectral unmixing overview : Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches. *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*, 5(2) :354–379.
- [Blake et Zisserman, 1987] Blake, A. et Zisserman, A. (1987). *Visual Reconstruction*. The MIT Press, Cambridge, MA.
- [Blanc-Féraud et al., 2010] Blanc-Féraud, L., Mugnier, L., et Jalobeanu, A. (2010). Blind image deconvolution. *Inverse Problems in Vision and 3D Tomography*, pages 97–121.
- [Bongard et al., 2011] Bongard, S., Soulez, F., Thiébaud, E., et Pecontal, E. (2011). 3D deconvolution of hyper-spectral astronomical data. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 418 :258–270.
- [Bouman et Sauer, 1996] Bouman, C. A. et Sauer, K. D. (1996). A unified approach to statistical tomography using coordinate descent optimization. *IEEE Trans. Image Processing*, 5(3) :480–492.
- [Bourguignon et al., 2012] Bourguignon, S., Mary, D., et Slezak, E. (2012). Processing MUSE hyperspectral data : Denoising, deconvolution and detection of astrophysical sources. *Statistical Methodology*, 9 :32–43.
- [Boyd et al., 2011] Boyd, S., Parikh, N., Chu, E., Peleato, B., et Eckstein, J. (2011). Distributed optimization and statistical learning via the alternating direction method of multipliers. *Foundations and Trends® in Machine Learning*, 3(1) :1–122.
- [Caland, 2013] Caland, F. (2013). *Décomposition tensorielle de signaux luminescents émis par des biosenseurs bactériens pour l'identification de Systèmes Métaux-Bactéries*. PhD thesis, Université de Lorraine.
- [Chan et Wong, 2000] Chan, T. F. et Wong, C.-K. (2000). Convergence of the alternating minimization algorithm for blind deconvolution. *Linear Algebra and its Applications*, 316(1) :259–285.
- [Chan et al., 2009] Chan, T.-H., Chi, C.-Y., Huang, Y.-M., et Ma, W.-K. (2009). A convex analysis-based minimum-volume enclosing simplex algorithm for hyperspectral unmixing. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 57(11) :4418–4432.
- [Chang et Du, 2004] Chang, C.-I. et Du, Q. (2004). Estimation of number of spectrally distinct signal sources in hyperspectral imagery. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 42(3) :608–619.
- [Chang et al., 2006] Chang, C.-I., Wu, C.-C., Liu, W.-M., et Ouyang, Y.-C. (2006). A new growing method for simplex-based endmember extraction algorithm. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 44(10) :2804–2819.
- [Charbonnier et al., 1994] Charbonnier, P., Blanc-Feraud, L., Aubert, G., et Barlaud, M. (1994). Two deterministic half-quadratic regularization algorithms for computed imaging. In *IEEE International Conference on Image Processing*, volume 2, pages 168–172.
- [Charbonnier et al., 1997] Charbonnier, P., Blanc-Féraud, L., Aubert, G., et Barlaud, M. (1997). Deterministic edge-preserving regularization in computed imaging. *IEEE Trans. Image Processing*, 6(2) :298–311.
- [Chaux et al., 2007] Chaux, C., Combettes, P., Pesquet, J.-C., et Wajs, V. (2007). A variational formulation for frame-based inverse problems. *Inverse Problems*, 23(4) :1495.
- [Chouzenoux, 2010] Chouzenoux, E. (2010). *Recherche de pas par Majoration-Minoration. Application à la résolution de problèmes inverses*. PhD thesis, Ecole centrale de nantes-ECN.

-
- [Chouzenoux et al., 2011] Chouzenoux, E., Moussaoui, S., Idier, J., et al. (2011). Algorithme primal-dual de points intérieurs pour l'estimation pénalisée des cartes d'abondances en imagerie hyperspectrale. *Actes de GRETSI 2011*.
- [Combettes et Pesquet, 2007] Combettes, P. et Pesquet, J.-C. (2007). Proximal thresholding algorithm for minimization over orthonormal bases. *SIAM Journal on Optimization*, 18(4) :1351–1376.
- [Combettes et Pesquet, 2011] Combettes, P. et Pesquet, J.-C. (2011). Proximal splitting methods in signal processing. In *Fixed-Point Algorithms for Inverse Problems in Science and Engineering*, pages 185–212. Springer.
- [Comon et Jutten, 2007a] Comon, P. et Jutten, C., editors (2007a). *Séparation de Sources – Tome 1 : Concepts de base et Analyse en Composantes Indépendantes*. Traité IC2, Série traitement du signal et de l'image, Hermès, Paris.
- [Comon et Jutten, 2007b] Comon, P. et Jutten, C., editors (2007b). *Séparation de Sources – Tome 2 : au-delà de l'aveugle et applications*. Traité IC2, Série traitement du signal et de l'image, Hermès, Paris.
- [Craig, 1994] Craig, M. (1994). Minimum-volume transforms for remotely sensed data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 32(3) :542–552.
- [Daube-Witherspoon et Muehllehner, 1986] Daube-Witherspoon, M. et Muehllehner, G. (1986). An iterative image space reconstruction algorithm suitable for volume ect. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 5(2) :61–66.
- [De Grauw et al., 1997] De Grauw, C., Sijtsma, N., Otto, C., et Greve, J. (1997). Axial resolution of confocal raman microscopes : Gaussian beam theory and practice. *Journal of Microscopy*, 188(3) :273–279.
- [De Veij et al., 2009] De Veij, M., Vandenabeele, P., De Beer, T., Remon, J. P., et Moens, L. (2009). Reference database of Raman spectra of pharmaceutical excipients. *Journal of Raman Spectroscopy*, 40(3) :297–307.
- [Demoment et Idier, 2001] Demoment, G. et Idier, J. (2001). Régularisation d'un problème mal posé : approches génériques. In Idier, J., editor, *Approche bayésienne pour les problèmes inverses*, pages 41–58, Paris. Traité IC2, Série traitement du signal et de l'image, Hermès.
- [Dey et al., 2004] Dey, N., Blanc-Féraud, L., Zimmer, C., Roux, P., Kam, Z., Olivo-Marin, J.-C., et Zérubia, J. (2004). 3D microscopy deconvolution using Richardson-Lucy algorithm with total variation regularization. Rapport de recherche n° 5272, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique.
- [Dupé et al., 2009] Dupé, F.-X., Fadili, J. M., et Starck, J.-L. (2009). A proximal iteration for deconvolving Poisson noisy images using sparse representations. *IEEE Trans. Image Processing*, 18(2) :310–321.
- [Eldar, 2009] Eldar, Y. C. (2009). Generalized sure for exponential families : Applications to regularization. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 57(2) :471–481.
- [Fessler, 1994] Fessler, J. A. (1994). Penalized weighted least-squares image reconstruction for positron emission tomography. *IEEE Trans. Medical Imaging*, 13(2) :290–300.
- [Figueiredo et Bioucas-Dias, 2010] Figueiredo, M. et Bioucas-Dias, J. (2010). Restoration of poissonian images using alternating direction optimization. *IEEE Trans. Image Processing*, 19(12) :3133–3145.
- [Galatsanos et Chin, 1989] Galatsanos, N. P. et Chin, R. T. (1989). Digital restoration of multichannel images. *IEEE Trans. Acous., Speech, Signal Processing*, 37 :415–421.

- [Galatsanos et al., 1991] Galatsanos, N. P., Katsaggelos, A. K., Chin, R. T., et Hillery, A. D. (1991). Least squares restoration of multichannel images. *IEEE Trans. Signal Processing*, 39 :2222–2236.
- [Geman et Reynolds, 1992] Geman, D. et Reynolds, G. (1992). Constrained restoration and the recovery of discontinuities. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, 14(3) :367–383.
- [Geman et Yang, 1995] Geman, D. et Yang, C. (1995). Nonlinear image recovery with half-quadratic regularization. *IEEE Trans. Image Processing*, 4(7) :932–946.
- [Gibson et Lanni, 1991] Gibson, S. et Lanni, F. (1991). Experimental test of an analytical model of aberration in oil-immersion objective lens used in three-dimensional light microscopy. *J. Opt. Soc. Amer. A.*, 8 :1601–1612.
- [Giovannelli et Coulais, 2005] Giovannelli, J.-F. et Coulais, A. (2005). Positive deconvolution for superimposed extended source and point sources. *Astronomy and Astrophysics*, 439 :401–412.
- [Giryès et al., 2011] Giryès, R., Elad, M., et Eldar, Y. C. (2011). The projected gsure for automatic parameter tuning in iterative shrinkage methods. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 30(3) :407–422.
- [Goodman, 2005] Goodman, J. (2005). *Introduction to Fourier Optics*. Roberts & Company Publishers.
- [Gritzmann et Klee, 1994] Gritzmann, P. et Klee, V. (1994). On the complexity of some basic problems in computational convexity : I. containment problems. *Discrete Mathematics*, 136(1) :129–174.
- [Gu, 1996] Gu, M. (1996). *Principles of three-dimensional imaging in confocal microscopes*. World Scientific.
- [Haeberlé et al., 2003] Haeberlé, O., Ammar, M., Furukawa, H., Tenjimbayashi, K., et Török, P. (2003). The point spread function of optical microscopes imaging through stratified media. *Optics Express*, 11(22) :2964–2969.
- [Heinz et Chang, 2001] Heinz, D. et Chang, C.-I. (2001). Fully constrained least squares linear spectral mixture analysis method for material quantification in hyperspectral imagery. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 39(3) :529–545.
- [Henrot et al., 2011] Henrot, S., Soussen, C., et Brie, D. (2011). Fast deconvolution of large hyperspectral images. In *Proceedings of WHISPERS - 3rd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing*.
- [Henrot et al., 2013] Henrot, S., Soussen, C., et Brie, D. (2013). Fast positive deconvolution of hyperspectral images. *IEEE Transactions on Image Processing*, 22(2) :828–833.
- [Honeine et Richard, 2012] Honeine, P. et Richard, C. (2012). Geometric unmixing of large hyperspectral images : A barycentric coordinate approach. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 50(6) :2185–2195.
- [Honeine et al., 2013] Honeine, P., Richard, C., et Nguyen, N. H. (2013). Approches géométriques pour l’estimation des fractions d’abondance en traitement de données hyperspectrales extensions aux modèles de mélange non-linéaires. *Traitement du signal*, 30(1-2) :61–86.
- [Hunt et Kubler, 1984] Hunt, B. R. et Kubler, O. (1984). Karhunen-Loève multispectral image restoration. part i : Theory. *IEEE Trans. Acoust., Speech, Signal Processing*, 32 :592–599.
- [Idier, 2001] Idier, J. (2001). Convex half-quadratic criteria and interacting auxiliary variables for image restoration. *IEEE Trans. Image Processing*, 10(7) :1001–1009.

-
- [Idier et Blanc-Féraud, 2001] Idier, J. et Blanc-Féraud, L. (2001). Déconvolution en imagerie. In Idier, J., editor, *Approche bayésienne pour les problèmes inverses*, pages 139–165, Paris. Traité IC2, Série traitement du signal et de l’image, Hermès.
- [Ifarraguerri et Chang, 1999] Ifarraguerri, A. et Chang, C.-I. (1999). Multispectral and hyperspectral image analysis with convex cones. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 37(2) :756–770.
- [Kundur et Hatzinakos, 1996] Kundur, D. et Hatzinakos, D. (1996). Blind image deconvolution. *Signal Processing Magazine, IEEE*, 13(3) :43–64.
- [Labat, 2006] Labat, C. (2006). *Algorithmes d’optimisation de critères pénalisés pour la restauration d’images. Application à la déconvolution de trains d’impulsion en imagerie ultrasonore*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Nantes et Université de Nantes.
- [Legendre et al., 2013] Legendre, M., Capriotti, L., Schmidt, F., Moussaoui, S., et Schmidt, A. (2013). GPU implementation issues for fast unmixing of hyperspectral images. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, volume 15, page 11686.
- [Lin et al., 2013] Lin, C.-H., Ambikapathi, A., Li, W.-C., et Chi, C.-Y. (2013). On the endmember identifiability of Craig’s criterion for hyperspectral unmixing : A statistical analysis for three-source case. In *Proc. IEEE ICASSP, Vancouver, Canada*.
- [Mahajan et Shannon, 1994] Mahajan, V. N. et Shannon, R. R. (1994). *Zernike circle polynomials and optical aberrations of systems with circular pupils*. Optical Society of America.
- [Markham et Conchello, 1999] Markham, J. et Conchello, J.-A. (1999). Parametric blind deconvolution : a robust method for the simultaneous estimation of image and blur. *Journal of the Optical Society of America A*, 16(10) :2377–2391.
- [Matakos et al., 2013] Matakos, A., Ramani, S., et Fessler, J. (2013). Accelerated edge-preserving image restoration without boundary artifacts. *IEEE Trans. Image Process*, 22(5).
- [Mazet, 2005] Mazet, V. (2005). *Développement de méthodes de traitement de signaux spectroscopiques : estimation de la ligne de base et du spectre de raies*. These, Université Henri Poincaré - Nancy I.
- [Miao et Qi, 2007] Miao, L. et Qi, H. (2007). Endmember extraction from highly mixed data using minimum volume constrained nonnegative matrix factorization. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 45(3) :765–777.
- [Moudden et al., 2008] Moudden, Y., Bobin, J., et Starck, J. (2008). An iterative thresholding algorithm for joint deconvolution and separation of multichannel data. *ADA V, Heraklion*.
- [Moulin, 2008] Moulin, P. (2008). Advanced image processing. Course notes, University of Illinois at Urbana-Champaign.
- [Moussaoui, 2005] Moussaoui, S. (2005). *Séparation de sources non-négatives. Application au traitement des signaux de spectroscopie*. These, Université Henri Poincaré - Nancy I.
- [Moussaoui et al., 2005] Moussaoui, S., Brie, D., et Idier, J. (2005). Non-negative source separation : range of admissible solutions and conditions for the uniqueness of the solution. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP) 2005.*, volume 5, pages v–289. IEEE.
- [Moussaoui et al., 2006] Moussaoui, S., Brie, D., Mohammad-Djafari, A., et Carteret, C. (2006). Separation of non-negative mixture of non-negative sources using a Bayesian approach and MCMC sampling. *IEEE Trans. Signal Processing*, 54(11) :4133–4145.

- [Moussaoui et al., 2008] Moussaoui, S., Hauksdóttir, H., Schmidt, F., Jutten, C., Chanussot, J., Brie, D., Douté, S., et Benediktsson, J. A. (2008). On the decomposition of Mars hyperspectral data by ICA and Bayesian positive source separation. *Neurocomputing*, 71(10–12) :2194–2208.
- [Nascimento et Bioucas-Dias, 2005] Nascimento, J. et Bioucas-Dias, J. (2005). Vertex component analysis : a fast algorithm to unmix hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 43(4) :898 – 910.
- [Nocedal et Wright, 2006] Nocedal, J. et Wright, S. (2006). *Numerical Optimization*. Springer.
- [Nowak, 2005] Nowak, R. (2005). Fast convolution using the FFT. Retrieved from the Connexions Web site : <http://cnx.org/content/m10963/2.6/>.
- [Ouedraogo et al., 2012] Ouedraogo, W. S., Souloumiac, A., Jaidane, M., et Jutten, C. (2012). Geometrical method using simplicial cones for overdetermined nonnegative blind source separation : application to real PET images. In *Latent Variable Analysis and Signal Separation*, pages 494–501. Springer.
- [Pankajakshan, 2010] Pankajakshan, P. (2010). *Blind Deconvolution for Confocal Laser Scanning Microscopy*. PhD thesis, University of Nice - Sophia Antipolis.
- [Pankajakshan et al., 2009a] Pankajakshan, P., Blanc-Féraud, L., Kam, Z., et Zerubia, J. (2009a). Point-spread function retrieval for fluorescence microscopy. In *IEEE International Symposium on Biomedical Imaging : From Nano to Macro.*, pages 1095–1098.
- [Pankajakshan et al., 2009b] Pankajakshan, P., Bland-Féraud, L., Kam, Z., et Zérubia, J. (2009b). Space non-invariant point-spread function and its estimation in fluorescence microscopy. Rapport de recherche n° 7157, Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique.
- [Park et al., 2012] Park, S., Dobigeon, N., et Hero, A. (2012). Semi-blind sparse image reconstruction with application to mrfm. *IEEE Trans. Image Processing*, 21(9) :3838–3849.
- [Plaza et al., 2011] Plaza, A., Plaza, J., Paz, A., et Sanchez, S. (2011). Parallel hyperspectral image and signal processing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 28 :119–126.
- [Press et al., 2007] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., et Flannery, B. P. (2007). *Numerical recipes : The art of scientific computing*. Cambridge Univ. Press, New York, 3rd edition.
- [Pustelnik, 2010] Pustelnik, N. (2010). *Méthodes proximales pour la résolution de problèmes inverses. Application à la Tomographie par Emission de Positrons*. thèse de doctorat, Université de Paris-Est, Marne-la-Vallée.
- [Richard, 2009] Richard, A. (2009). Traitement statistique du signal. Notes de cours, ENSEM.
- [Richardson, 1972] Richardson, W. H. (1972). Bayesian-based iterative method of image restoration. *J. Opt. Soc. Amer. A.*, 62 :55–59.
- [Rodet et al., 2008] Rodet, T., Orioux, F., Giovannelli, J.-F., et Abergel, A. (2008). Data inversion for over-resolved spectral imaging in astronomy. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, 2(5) :802–811.
- [Sahnoun, 2012] Sahnoun, S. (2012). *Développement de méthodes d'estimation modale de signaux multidimensionnels. Application à la spectroscopie RMN multidimensionnelle*. These, Université de Lorraine. IRIS, SBS IRIS, SBS.
- [Sarder et Nehorai, 2006] Sarder, P. et Nehorai, A. (2006). Deconvolution methods for 3D fluorescence microscopy images. *IEEE Sig. Proc. Mag*, 23 :32–45.

-
- [Shah, 2006] Shah, S. (2006). *Deconvolution algorithms for fluorescence and electron microscopy*. Ph.D. dissertation, University of Michigan.
- [Shaw et Burke, 2003] Shaw, G. A. et Burke, H.-H. K. (2003). Spectral imaging for remote sensing. *Lincoln Laboratory Journal*, 14(1) :3–28.
- [Soulez et al., 2012] Soulez, F., Denis, L., Tourneur, Y., et Thiébaud, E. (2012). Blind deconvolution of 3D data in wide field fluorescence microscopy. In *9th IEEE International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI)*, pages 1735–1738.
- [Soulez et al., 2008a] Soulez, F., Thiébaud, E., et Bongard, S. (2008a). Deconvolution of (x, y, wavelength) images. *Astronomical Data Analysis V*, page 14.
- [Soulez et al., 2008b] Soulez, F., Thiébaud, E., Gressard, A., Dauphin, R., et Bongard, S. (2008b). Heterogeneous multidimensional data deblurring. In *Eur. Sig. Proc. Conference*.
- [Soussen et al., 2009] Soussen, C., Miron, S., Caland, F., Brie, D., Billard, P., et Mustin, C. (2009). Complexity reduction by convex cone detection for unmixing hyperspectral images of bacterial biosensors. In *Eur. Sig. Proc. Conference*.
- [Tibshirani, 1996] Tibshirani, R. (1996). Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, pages 267–288.
- [Török et al., 1997] Török, P., Hewlett, S., et Varga, P. (1997). The role of specimen-induced spherical aberration in confocal microscopy. *Journal of microscopy*, 188(2) :158–172.
- [Van der Vorst, 1992] Van der Vorst, H. A. (1992). Bi-cgstab : A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing*, 13(2) :631–644.
- [Villeneuve et al., 2011] Villeneuve, E., Carfantan, H., et Serre, D. (2011). PSF estimation of hyperspectral data acquisition system for ground-based astrophysical observations. In *Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS), 2011 3rd Workshop on*, pages 1–4. IEEE.
- [Vonesch et al., 2006] Vonesch, C., Aguet, F., Vonesch, J.-L., et Unser, M. (2006). The colored revolution of bioimaging. *IEEE Sig. Proc. Mag*, 23 :20–31.
- [Vonesch et al., 2008] Vonesch, C., Ramani, S., et Unser, M. (2008). Recursive risk estimation for non-linear image deconvolution with a wavelet-domain sparsity constraint. In *Image Processing, 2008. ICIP 2008. 15th IEEE International Conference on*, pages 665–668. IEEE.
- [Wang et al., 2005] Wang, L.-Y., Zhang, Y.-H., et Zhao, L.-J. (2005). Raman spectroscopic studies on single supersaturated droplets of sodium and magnesium acetate. *The Journal of Physical Chemistry A*, 109(4) :609–614.
- [Winter, 1999] Winter, M. E. (1999). N-findr : an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data. In *SPIE's International Symposium on Optical Science, Engineering, and Instrumentation*, pages 266–275. International Society for Optics and Photonics.
- [Zhang, 2007] Zhang, B. (2007). *Contributions à la microscopie à fluorescence en imagerie biologique : modélisation de la PSF, restauration d'images et détection super-résolutive*. These, Télécom ParisTech.
- [Zhang et al., 2007] Zhang, B., Zerubia, J., et Olivo-Marin, J.-C. (2007). Gaussian approximations of fluorescence microscope point-spread function models. *Applied Optics*, 46 :1819–1829.
- [Zhang et al., 2009] Zhang, Y., Duijster, A., et Scheunders, P. (2009). A hyperspectral image restoration technique. In *Proceedings of the 16th IEEE International Conference on Image Processing (ICIP)*.

- [Zhao et al., 2013] Zhao, X.-L., Wang, F., Huang, T.-Z., Ng, M. K., et Plemmons, R. J. (2013). Deblurring and sparse unmixing for hyperspectral images. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, PP(99) :1–14.
- [Zhou et Suri, 2002] Zhou, Y. et Suri, S. (2002). Algorithms for a minimum volume enclosing simplex in three dimensions. *SIAM Journal on Computing*, 31(5) :1339–1357.
- [Zhu et Milanfar, 2010] Zhu, X. et Milanfar, P. (2010). Automatic parameter selection for denoising algorithms using a no-reference measure of image content. *IEEE Transactions on Image Processing*, 19(12) :3116–3132.
- [Zibulevsky et Elad, 2010] Zibulevsky, M. et Elad, M. (2010). $\ell_1 - \ell_2$ optimization in signal and image processing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 27(3) :76–88.

Résumé

L'imagerie hyperspectrale consiste à acquérir une scène spatiale à plusieurs longueurs d'onde, de manière à reconstituer le spectre des pixels. Cette technique est utilisée en microscopie pour extraire des informations spectrales sur les spécimens observés. L'analyse de telles données est bien souvent difficile : lorsque l'image est observée à une résolution suffisamment fine, elle est dégradée par l'instrument (flou ou *convolution*) et une procédure de *déconvolution* doit être utilisée pour restaurer l'image originale. On parle ainsi de *problème inverse*, par opposition au *problème direct* consistant à modéliser la dégradation de l'image observée, étudié dans la première partie de la thèse. Un autre problème inverse important en imagerie consiste à extraire les signatures spectrales des composants purs de l'image ou *sources* et à estimer les contributions fractionnaires de chaque source à l'image. Cette procédure est qualifiée de *séparation de sources*, accomplie sous contrainte de positivité des sources et des mélanges.

La deuxième partie propose des contributions algorithmiques en restauration d'images hyperspectrales. Le problème de déconvolution est formulé comme la minimisation d'un critère pénalisé et résolu à l'aide d'une structure de calcul rapide. Cette méthode générique est adaptée à la prise en compte de différents *a priori* sur la solution, tels que la positivité de l'image ou la préservation des contours. Les performances des techniques proposées sont évaluées sur des images de biocapteurs bactériens en microscopie confocale de fluorescence.

La troisième partie de la thèse est axée sur la problématique de séparation de sources, abordé dans un cadre géométrique. Nous proposons une nouvelle condition suffisante d'identifiabilité des sources à partir des coefficients de mélange. Une étude innovante couplant le modèle d'observation instrumental avec le modèle de mélange de sources permet de montrer l'intérêt de la déconvolution comme étape préliminaire de la séparation. Ce couplage est validé sur des données acquises en microscopie confocale Raman.

Mots-clés: image hyperspectrale, déconvolution, séparation de sources, microscopie, fluorescence, diffusion Raman.

Abstract

Hyperspectral imaging refers to the acquisition of spatial images at enough spectral bands to produce highly resolved pixel spectra. When applied to microscopy, this technique allows to collect additional information about the specimens of interest. Processing hyperspectral data is often challenging due to the blurring caused by the observation system, mathematically expressed as a *convolution*. The operation of *deconvolution* is thus necessary to restore the original image from the observations. Image restoration falls into the class of *inverse problems*, as opposed to the *direct problem* which consists in modeling the image degradation process, treated in part 1 of the thesis. Another inverse problem with many applications in hyperspectral imaging consists in extracting the pure materials making up the image, called *endmembers*, and their fractional contribution to the data or *abundances*. This problem is termed *spectral unmixing* and its resolution accounts for the nonnegativity of the endmembers and abundances.

Part 2 presents algorithms designed to efficiently solve the hyperspectral image restoration problem, formulated as the minimization of a composite criterion. The methods are based on a common framework allowing to account for several *a priori* assumptions on the solution, including a nonnegativity constraint and the preservation of edges in the image. The performance of the proposed algorithms are demonstrated on fluorescence confocal images of bacterial biosensors.

Part 3 deals with the spectral unmixing problem from a geometrical viewpoint. A sufficient condition on abundance coefficients for the identifiability of endmembers is proposed. We derive and study a joint observation model and mixing model and demonstrate the interest of performing deconvolution as a prior step to spectral unmixing on confocal Raman microscopy data.

Keywords: hyperspectral imaging, deconvolution, spectral unmixing, microscopy, fluorescence, Raman diffusion.

