HAL
open science

Tomographie de diffraction sans mesure de phase en régime de diffusion multiple

Kevin Unger

To cite this version:

Kevin Unger. Tomographie de diffraction sans mesure de phase en régime de diffusion multiple. Optique [physics.optics]. Aix Marseille Université, Ecole doctorale N°352 : Physique et Sciences de la Matière, 2019. Français. NNT : . tel-02624407

HAL Id: tel-02624407

https://theses.hal.science/tel-02624407

Submitted on 26 May 2020

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.

AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ

ED 352 PHYSIQUE ET SCIENCES DE LA MATIERE

INSTITUT FRESNEL / UMR 7249

Thèse présentée pour obtenir le grade universitaire de docteur

Discipline : Physique et Sciences de la Matière
Spécialité : Optique, Photonique et Traitement d'Image

Kévin UNGER

Tomographie de diffraction sans mesure de phase en régime de diffusion multiple

Phaseless diffraction tomography in the multiple scattering regime

Soutenue le 03/12/2019 devant le jury composé de :

Claire PRADA-JULIA	Institut Langevin, ESPCI Paris	Examinatrice
Emmanuel BOSSY	LIP, Université Grenoble Alpes	Rapporteur
Jérôme IDIER	LS2N, Ecole Centrale de Nantes	Rapporteur
Anthony DUBOIS	CEA, centre de Grenoble	Examinateur
Patrick CHAUMET	Institut Fresnel, Université Aix-Marseille	Directeur de thèse
Kamal BELKEBIR	Institut Fresnel, Université Aix-Marseille	Co-directeur de thèse

Remerciements

à Raph et Jo, mes chers frangins,
à Papa et Maman, qui ont toujours
été là pour moi
à Anne-Claire, ma tendre chérie.

En trois ans de thèse, beaucoup de choses se sont passées. La découverte d'une nouvelle ville, d'un sujet de thèse passionnant, la rencontre de collègues, d'amis, et même de membres de la famille ! Ma thèse s'achève et je veux remercier toutes les personnes qui ont participé à mon épanouissement, et qui font que je quitte Marseille avec un petit pincement au coeur...

Je tiens à vous remercier, Patrick CHAUMET et Kamal BELKEBIR, mes deux directeurs de thèse, pour m'avoir formé avec bienveillance et pédagogie pendant ces trois années de thèse. Vous avez toujours su être disponibles pour moi pour m'aider face aux difficultés que j'ai rencontrées et c'est en grande partie grâce à vous que cette thèse s'est bien déroulée. Patrick, j'aurai découvert avec toi la rigueur et l'intransigeance du calcul numérique. Ta sérénité à toute épreuve face aux bugs les plus tenaces continue de m'épater. Je te remercie pour ta patience, pour être venu souvent à mon secours lorsque j'étais désemparé face à mes incohérences numériques. Et je garderai ton sage conseil : surtout, ne pas essayer de raisonner à partir d'un programme faux... Kamal, j'aurai découvert grâce à toi le monde passionnant des problèmes inverses. Tu m'auras montré que pour construire une inversion, il faut bien sûr une solide compréhension du problème direct, mais aussi de l'intuition, une idée initiale qui va modeler la conception de l'algorithme. Je me souviendrai que dans l'étude des algorithmes itératifs, les tout petits détails comptent... Et enfin, que face à des difficultés, quelle que soit leur nature, il y a toujours plusieurs façons de les appréhender et d'exprimer le problème.

Anne, je te remercie pour les nombreuses discussions de physique et les calculs théoriques passionnants. Ton accueil enthousiaste, lorsque je suis venu visiter l'institut Fresnel à la recherche d'un sujet de thèse il y a trois ans, m'avait convaincu de rester à Marseille. Ta joie rayonnante et ton humour contagieux embellissent le quotidien.

Je remercie la très chouette équipe SEMO pour le cadre de travail agréable dans lequel j'ai réalisé ma thèse : Anne, Hugues, Guillaume, Gabriel, Nicolas, Patrick, Kamal, Kévin, Rased.

Je salue tous les doctorants et post-docs fresneliens passés et présents, que j'ai eu la chance de croiser pendant ma thèse : Ting, Charan, Dam-Bé, Awoke, Marie-Florence, Kévin, Rased, Thibault, Luisa, Nicolas, Arthur, Peng, Tilman, Marine, Claire, Elena, Sylvain R., Emmanuel, Marc D., Guochao, Valentina, Simon, Xavier, Camille S., Hadrien, Samira, Faris, Mohammed, François, Ugo, Vasyl, Barbara, Siddharth, Sandro, Luis, Camille P.

Je remercie mes collègues d'enseignement à l'IUT, qui m'ont intégré dans leur équipe, encadré et qui m'ont initié à l'exercice difficile de l'enseignement : Valérie, Thomas B., Hugues, Kostas.

Je salue le Fresnel Band : Julien Savatier, Dam-Bé, Ugo, Valentina, Guillaume Baffou. C'était pour moi un grand plaisir de se retrouver et de jouer de la musique ensemble sur l'heure du midi. Je garde de joyeux souvenirs de nos concerts aux JDDs et si je joue de nouveau dans un groupe de rock, j'investirai peut-être dans un violon électrique...

Merci à toute l'équipe administrative du rez-de-chaussée que j'avais le plaisir de saluer tous les matins avant de monter dans mon bureau : grand Fred et Joëlle, petit Fred, capitaine Marc, Julien Woj, Nelly, Aurore, Samia, Claire, Emilie, Guylène, Nadège, Gérard, Julien M., Jean.

Je remercie les deux dames de ménage du 3ième étage, qui nettoyaient quotidiennement les bureaux.

Je salue les fins gourmets du Resto U avec lesquels mêmes les sujets de société les plus sérieux étaient abordés à table avec beaucoup d'humour et d'autodérision : Hugues, Anne, Nicolas, Gabriel, Guillaume, Kamal, Julien D., Virginie, Patrick F., Marc A., Loïc, Anne-Laure, Brian, Fred, Joëlle.

Merci à ma chérie Anne-Claire. Ta présence rassurante, constante tout au long de ma thèse, était joyeuse et m'a permis de prendre un peu de recul lorsque le moral n'était parfois pas au plus haut.

Merci à Papa et Maman ! qui m'avez élevé et à qui je dois une grande partie de ce que je suis aujourd'hui. A mes tendres frangins Raph, Jo, que j'espère pouvoir voir plus souvent maintenant que ma thèse terminée, et que je reviens sur la région parisienne. Merci à Papi et Daniel.

Merci à toi Marie-Claude, pour ta générosité et ta fantastique convivialité. Moi qui croyais arriver seul en ville inconnue en venant à Marseille, cela a été une grande joie de te rencontrer et de découvrir la famille. Merci à Julien et Sarah, que j'espère revoir bientôt.

Merci à mes amis de PC et de Paris, pour les bons moments passés ensemble lorsque je revenais à la capitale. Aux rois de la Glisse : Bibi Nico, Minh, Dr Romain. À Adri, Tomtom, Tiftouf, Reda, Sylvain, Thibault. À Nicoco. À monsieur Jean.

Merci Marine, pour ta gaieté et ta serviabilité. Je garderai en souvenir les formidables virées en Provence pour déguster de bons vins et les joyeuses soirées jeu.

Enfin, merci aux Marseillais, joueurs fous et bons vivants, et avec lesquels le temps filait beaucoup trop vite : Michel, Tristan, Ouarda, Isabelle, Marilène, Roland, Pierre, Giuseppe, Bernard, Gas, Hélène.

Résumé

La tomographie de diffraction optique est une technique d'imagerie dans laquelle un objet est illuminé successivement par un faisceau laser sous différents angles d'incidence avec une méthode interférométrique qui permet d'enregistrer à la fois la phase et l'intensité du champ dans l'espace image d'un microscope. La permittivité de l'objet est alors reconstruite numériquement à partir du jeu de données des champs complexes à l'aide d'une méthode d'inversion.

Dans ce tapuscript, nous étudions tout d'abord l'effet de la diffusion multiple dans l'objet sur les reconstructions obtenues, en étudiant notamment différentes possibilités d'approximation (Born) pour accélérer le calcul.

La mesure de la phase dans le domaine de l'optique étant délicate, car obtenue par une méthode interférentielle, j'ai développé une technique de reconstruction basée uniquement sur les intensités. J'ai notamment montré que les reconstructions ainsi obtenues sont proches de celles avec le jeu de données complet champ + phase.

Enfin, nous proposons de coupler la tomographie de diffraction sans mesure de phase à la microscopie de fluorescence à illumination structurée. Dans ce cadre, nous illustrons l'impact de la modélisation de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores sur le pouvoir de résolution de la technique d'imagerie. Par ailleurs, nous présentons une méthode d'imagerie qui estime simultanément les fluorophores et le milieu qui les entoure à partir de la mesure conjointe des intensités de diffraction et de fluorescence.

Abstract

Optical diffraction tomography is an imaging technique in which a target is successively illuminated by a laser beam under different angles of incidence with an interferometric setup which enables to record both the phase and the intensity of the field in the image space of a microscope. The permittivity of the target is then numerically estimated from the complex field dataset thanks to an inversion procedure.

In this typescript, we first study the effect of multiple scattering inside the target on the obtained reconstructions by studying different approximations (Born) to speed up the computation.

The recording of the phase in the optical domain is tricky, for it requires an interferometric setup. I have built a reconstruction technique based only on the intensities. I show that the obtained reconstructions are close to those obtained with the complete dataset field + phase.

Finally, we propose to adjoin phaseless diffraction tomography to fluorescence structured illumination microscopy. In this framework, we illustrate the impact of the modelization of the illumination excitating the fluorophores on the resolving power of the imaging technique. Moreover, we demonstrate an imaging method which estimates simultaneously the fluorophores and the surrounding media from the joint recording of diffraction and fluorescence intensities.

Table des matières

Remerciements

Résumé

Abstract

Table des figures

Introduction **1**

1 Imagerie sous l'approximation de Born **5**
1.1 Introduction 5
1.2 Modélisation du problème de diffraction direct 5
1.3 Un modèle direct approché : l'approximation de Born 8
1.4 Résolution approchée du problème de diffraction inverse par tomographie sous l'approximation de Born 10
1.4.1 Imagerie de Fourier 11
1.4.2 Méthode de la rétropropagation 12
1.4.3 Lien entre l'optique de Fourier et la méthode de rétropropagation 14
1.5 Conclusion 15
Bibliographie 15

2 Tomographie de diffraction en présence de diffusion multiple **17**
2.1 Introduction 18
2.2 Problème de la diffraction inverse et stratégie d'inversion en diffusion multiple 18
2.3 Minimisation de la fonction coût 19
2.4 Calcul de l'opérateur de Fréchet 21
2.4.1 Définitions et notation des opérateurs 21
2.4.2 Différentiation directe du modèle de diffraction 21
2.4.3 Approche variationnelle 22
2.4.4 Calcul du gradient par le théorème de réciprocité de Lorentz . 24
2.4.5 Équivalences des différentes expressions de l'opérateur de Fréchet 25
2.4.6 Discussion sur les différentes méthodes pour obtenir l'opérateur de Fréchet 26
2.5 Étude de la minimisation de la fonction coût sous l'approximation de Born 27
2.5.1 Relation entre la rétropropagation et le gradient de la fonction coût 27

2.5.2 Caractérisation de la solution fournie par l'algorithme itératif sous l'approximation de Born . . . 28
2.6 Implémentation de l'algorithme . . . 30
2.6.1 Informations générales . . . 30
2.6.2 Structure du programme . . . 30
2.6.3 Définition du repère cartésien . . . 32
2.6.4 Définition du milieu de référence, calcul de sa fonction de Green et calcul du champ électrique dans le domaine d'investigation 32
2.6.5 Position et discrétisation du domaine d'investigation . . . 33
2.6.6 Calcul du champ diffracté au travers du microscope et de la fonction de Green du microscope . . . 34
2.6.7 Implémentation numérique de l'algorithme de minimisation . . 35
2.7 Reconstruction d'objets en présence de diffusion multiple . . . 36
2.8 Conclusion . . . 40
Bibliographie . . . 42

3 Tomographie de diffraction sans mesure de phase 43
3.1 Introduction . . . 43
3.2 Positionnement du problème . . . 44
3.3 Algorithme de reconstruction . . . 46
3.4 Rôle du champ spéculaire dans la reconstruction d'objets par les intensités . . . 47
3.5 Étude sur données synthétiques de la résolution transverse . . . 49
3.6 Capacité de reconstruction selon l'axe optique . . . 50
3.7 Discrimination entre des objets de phase et des objets absorbants . . 52
3.8 Reconstruction d'objets en régime de diffusion multiple . . . 54
3.9 Application à la microscopie par tomographie CARS . . . 55
3.10 Conclusion . . . 55
Bibliographie . . . 57

4 Le microscope bimodal 61
4.1 Introduction . . . 61
4.2 Tomographie de diffraction sans mesure de phase en configuration TIRF avec illumination structurée . . . 62
4.3 Microscopie de fluorescence à illumination structurée en configuration TIRF . . . 64
4.4 Modélisation de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores à l'aide de la tomographie de diffraction sans mesure de phase . . . 66
4.5 Reconstruction conjointe des fluorophores et du milieu qui les entoure 69
4.5.1 Le modèle direct . . . 69
4.5.2 L'algorithme de reconstruction . . . 71
4.6 Conclusion . . . 74
Bibliographie . . . 75

5 Conclusion et perspectives 77
Bibliographie . . . 78

A Quelques définitions **79**
A.1 Polarisation p et s 79
A.2 Produit scalaire dans $\mathcal{L}^2(\Omega)$ 79
A.3 Définition de l'adjoint d'un opérateur linéaire 80

B A propos du tenseur de Green en espace libre **81**
B.1 Expression explicite de la fonction de Green en espace libre 81
B.2 Expression en champ lointain 82

C Fonction de Green d'un miroir parfait **85**

D Démonstration du théorème de réciprocité de Lorentz **87**

E Étude de l'opérateur de rétropropagation **91**

F Calcul du gradient pour l'inversion sur des intensités par méthode variationnelle **95**
F.1 Introduction 95
F.2 Différentielles partielles de $\mathcal{L}$ 95
F.3 Calcul du gradient g_χ 96

G Inversion à partir de mesures d'amplitudes **99**
G.1 Fonctionnelle coût et gradient 99
G.2 Polynôme de minimisation 99

H Calcul du coefficient de minimisation **101**
H.1 Pour l'algorithme sur champs 101
H.2 Pour l'algorithme sur intensité 102
H.3 Remarques 102

I Relation entre les gradients des fonctions coûts à variable complexe et réelle **105**

J Publications associées **107**

Résumé

Table des figures

1.1 Configuration d'imagerie. Une source électromagnétique éclaire un objet de distribution de permittivité $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ situé à l'intérieur du domaine d'investigation Ω. Le champ diffusé par l'objet est mesuré aux points d'observations formant un domaine Γ. 6

1.2 Un objet est éclairé par différentes illuminations. Pour chaque illumination, le champ diffusé par l'objet est mesuré au niveau de points d'observation. 6

1.3 Schéma du montage expérimental interférométrique hors axe : M, miroir orientable ; BE, élargisseur de faisceau ; D, diaphragme ; OL, objectif ; L_1, lentille de tube ; $L_{2...5}$, lentilles ; $BS_{1...3}$, séparateur de faisceaux ; PM, modulateur de phase ; P, sténopé. 10

1.4 Les fonctions de transfert optiques en tomographie de diffraction en transmission et en réflexion. 12

2.1 Schéma du microscope implémenté dans le problème direct. Un champ incident $\boldsymbol{E}^{\text{inc}}$ éclaire un objet posé sur un substrat. La différence de permittivité entre les milieux ε_1 et ε_2 donne naissance à des champs spéculaires réfléchi $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}$ et transmis $\boldsymbol{E}^{\text{trans}}$. Sous illumination, l'objet rayonne un champ diffracté $\boldsymbol{E}^{\text{scat}}$. Le microscope est constitué d'un objectif de focale f_o et d'ouverture numérique NA, et d'une lentille de tube de focale f_t. Le microscope, ici en transmission, forme une image de l'objet dans le plan focal image du microscope, au niveau d'une caméra. 31

2.2 Evolution de la fonction coût $\mathcal{F}(\chi)$ (*première ligne*) et de l'erreur relative sur le contraste $\text{Err}(\chi) = \frac{\|\chi-\chi^{\text{exact}}\|_\Omega^2}{\|\chi^{\text{exact}}\|_\Omega^2}$ (*deuxième ligne*) en fonction des itérations en utilisant trois expressions différentes du gradient. *colonne de gauche* : deux cubes identiques (chacun de côté 2.5 cm, de permittivité 2.4) séparés l'un de l'autre de 2.5 cm selon l'axe $\hat{\boldsymbol{z}}$ éclairés à 8 GHz ($\lambda = 3.75$ cm). *colonne au centre* : deux boules identiques (chacune de rayon 2.5 cm, de permittivité 2.6) en contact selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminées à 5 GHz ($\lambda = 6$ cm). *colonne de droite* : un cylindre avec une base circulaire (de hauteur 8 cm, de rayon 4 cm, et de permittivité relative 3.05) orienté selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminé à 3 GHz ($\lambda = 10$ cm). 38

2.3 Reconstructions d'objet utilisant trois expressions différentes du gradient. *colonne de gauche* : deux cubes identiques (chacun de côté 2.5 cm, de permittivité 2.4) séparés l'un de l'autre de 2.5 cm selon l'axe $\hat{\boldsymbol{z}}$ éclairés à 8 GHz ($\lambda = 3.75$ cm). *colonne au centre* : deux boules identiques (chacune de rayon 2.5 cm, de permittivité 2.6) en contact selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminées à 5 GHz ($\lambda = 6$ cm). *colonne de droite* : un cylindre avec une base circulaire (de hauteur 8 cm, de rayon 4 cm, et de permittivité relative 3.05) orienté selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminé à 3 GHz ($\lambda = 10$ cm). La *première ligne*, la *deuxième ligne*, et la *troisième ligne* correspondent respectivement aux reconstructions avec les gradients Born-Born, Born-Rig et Rig-Rig. La ligne en trait plein indique le contour exact de l'objet. Les unités de la figure sont le centimètre. A chaque fois mis à part les cas Born-Born/Cylindre et Born-Rig/Cylindre, la 100 e itération est montrée à partir de laquelle la fonction coût atteint un plateau. Pour le cylindre cependant, la diffusion multiple est si forte à l'intérieur de l'objet que la fonction coût présente une évolution chaotique sous l'approximation Born-Rig. La 5 e itération sous l'approximation Born-Born est montrée. La 63 e itération sous l'approximation Born-Rig à laquelle la fonction coût atteint sa valeur la plus basse est montrée. 39

3.1 a) Configuration d'imagerie en réflexion. b) Configuration d'imagerie en transmission. 45

3.2 a) Une étoile en résine constituée de 12 branches identiques (chaque branche a une permittivité 2.0, une hauteur 160 nm, une longueur 400 nm, une largeur 100 nm) est placée sur un substrat de verre (permittivité 2.25). L'étoile est illuminée par le substrat en réflexion totale par 6 ondes planes polarisées p à la longueur d'onde 475 nm et avec des vecteurs d'onde incidents régulièrement répartis dans un cône d'angle 60 ° par rapport à l'axe optique. b) L'image plein-champ (dite *brightfield*) obtenue en faisant la moyenne sur les illuminations des intensités mesurées sur la caméra. c) L'image champ sombre (dite *darkfield*) construite de la même manière que l'image brightfield mais en ayant supprimé préalablement la réflexion spéculaire du champ détecté. d) Permittivité estimée de l'étoile à partir de la mesure du champ. e) Permittivité estimée de l'étoile à partir de la mesure de l'intensité. f) Pareil que e) mais en ayant préalablement supprimé la réflexion spéculaire du champ détecté. Les images d), e) et f) correspondent à l'itération finale de la minimisation de la fonction coût. 51

3.3 Un objet composé de 2 parallélépipèdes identiques (chaque parallélépipède a une largeur et une longueur de 250 nm, une hauteur selon l'axe optique de 1 μm, et a une permittivité 1.05) séparés par 2 μm selon l'axe optique sont éclairés à la longueur d'onde 500 nm par 9 ondes planes polarisées p selon des vecteurs d'onde incidents répartis de façon régulière dans un cône d'angle 30 ° par rapport à l'axe optique. Les parallélépipèdes sont centrés à 3.5 μm et à 6.5 μm du plan focal du microscope. a) Permittivité théorique des parallélépipèdes. Permittivité estimée en *transmission* : b) à partir de données de champs complexes vectoriels, c) à partir de données d'intensités, d) à partir de données d'intensités où la réflexion spéculaire du champ incident a été supprimée. Permittivité estimée en *réflexion* : e) à partir de données de champs complexes vectoriels, f) à partir de données d'intensités, g) à partir de données d'intensités en présence d'un miroir. A chaque fois, la reconstruction de l'itération finale est montrée. 53

3.4 Quatre cubes (chacun d'arête 150 nm et de permittivité 1.1+i0.1, 1.0+i1.0, 2.0+i0.5 et 1.5) centrés aux coins d'un carré de coté 450 nm sont placés dans l'air au plan focal du microscope. Les cubes sont éclairés à la longueur d'onde 700 nm par 9 ondes planes polarisées p dont les vecteur d'onde incidents sont répartis de façon régulière dans un cône d'angle 60 ° par rapport à l'axe optique. Permittivité théorique : (a) partie réelle, (b) partie imaginaire. Permittivité estimée en transmission : (c) partie réelle, (d) partie imaginaire. Permittivité estimée en réflexion : (e) partie réelle, (f) partie imaginaire. La barre verte mesure 200 nm. 54

3.5 Deux boules identiques (de diamètre 250 nm, de permittivité 2.05) placées dans l'air sont en contact dans le plan focal du microscope. Les boules sont illuminées à la longueur d'onde 450 nm par 9 ondes planes polarisées p dont les vecteurs d'onde incidents sont choisis de façon régulière dans un cône d'angle 60 ° par rapport l'axe optique. L'intensité est mesurée en transmission. Permittivité estimée à partir de données de champ et avec un calcul rigoureux des champs : (a) plan transversal, (b) plan axial. Permittivité estimée à partir de données d'intensités et avec un calcul rigoureux des champs : (c) plan transversal, (d) plan axial. Permittivité estimée à partir de données de champ sous l'approximation de Born : (e) plan transversal, (f) plan axial. Permittivité estimée à partir de données d'intensités sous l'approximation de Born : (g) plan transversal, (h) plan axial. A chaque fois l'itération finale est montrée. La barre verte mesure 200 nm. . . . 56

4.1 a) Les fluorophores sont éclairés successivement par 9 grilles de lumière. b) Chaque grille de lumière est obtenue en faisant interférer deux ondes planes de même polarisation linéaire ayant des vecteurs d'onde aux composantes axiales égales et aux composantes transverses opposées. 63

4.2 a) Un pavé de permittivité 1.7 est posé sur un substrat de verre. b) Le pavé est éclairé en réflection totale interne dans le verre par une grille de lumière à la longueur d'onde $\lambda = 500$ nm. c) L'image plein-champ est obtenue en sommant les intensités mesurées sur les différentes illuminations. d) Le pavé est reconstruit par l'algorithme de tomographie de diffraction sans mesure de phase après 100 itérations. e) Évolution de la fonction coût en fonction des itérations. f) Évolution de l'erreur relative sur la reconstruction en fonction des itérations. . . 63

4.3 Un pavé de permittivité 1.7 (a) est éclairé par des grilles de lumière ($\lambda = 500$ nm) (b). Ces dernières sont modifiées lors de leur propagation dans le milieu dû à la diffusion multiple (c). Une bande de fluorophores est placée au-dessus du pavé de permittivité, à une hauteur de 150 nm du substrat de verre (d). L'image plein-champ de fluorescence est obtenue en sommant les intensités sur la caméra pour chaque illumination (e). Cette dernière est de sens inversé par rapport à l'objet de fluorescence à cause du grandissement négatif du microscope. Un algorithme de reconstruction standard estime la distribution de fluorophores à partir des intensités de fluorescence mesurées (f). 65

4.4 Un pavé de permittivité posé sur un substrat de verre (a) est illuminé en configuration TIRF avec un grille de lumière ($\lambda = 500$ nm) (b). L'illumination incidente est altérée lors de sa propagation à cause de la diffusion multiple (c). L'image de diffraction plein-champ est obtenue en sommant les intensités diffractées pour chaque illumination (d). Une bande de fluorophores est placée au-dessus de l'objet de permittivité, à 150 nm du substrat (e). L'image de fluorescence plein-champ est obtenue en sommant les intensités de fluorescence pour chaque illumination (f). Les images de diffraction et de fluorescence plein-champ sont de sens inversé par rapport aux objets à cause du grandissement négatif du microscope. La tomographie de diffraction sans mesure de phase permet d'estimer l'objet de permittivité (g). Ce dernier, éclairé par la grille de lumière (h), permet d'estimer l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores (i). La densité de fluorophores est reconstruite (j) à partir de l'estimation de l'illumination (i) et des intensités de fluorescence (f). Ce résultat est à comparer aux reconstructions sans connaissance du milieu (k) et à celle en connaissant exactement l'illumination au niveau des fluorophores (l). 67

4.5 a) Une mire de permittivité posée sur un substrat de verre. b) Exemple d'une grille de lumière c) Même grille de lumière qu'en b) modifiée par la présence de la mire de permittivité. d) Une mire de fluorophores à reconstruire. e) Image de fluorescence mesurée dans le plan focal image du microscope récoltée en réflexion dans le verre. f) Estimation des fluorophores sous l'approximation de Born. g) Estimation des fluorophores en calculant rigoureusement la diffusion multiple. Le niveau de bruit sur les mesures est de 15%. La distribution de fluorophores a été initialisée constante égale à 0.0001. 68

4.6 Le diagramme de Perrin-Jablonski décrit les mécanismes de conversion d'énergie à l'œuvre dans l'émission de la fluorescence. Les niveaux d'énergie du fluorophores sont représentés. Les photons qui excitent le fluorophore sont absorbés et des électrons de l'état fondamental (ground state S_{00}) partent peupler un niveau d'énergie haut (S_{13}). Des désexcitations non-radiatives transfèrent ces électrons vers un niveau d'énergie plus bas (S_{10}). Une désexcitation radiative vers des niveaux vibrationnels du fluorophore (S_{03},S_{02},S_{01}...) donne lieu à l'émission des photons de fluorescence. L'écart d'énergie entre l'absorption des photons excitateurs et l'émission des photons de fluorescence est le décalage de Stokes. 70

4.7 Configuration d'imagerie. Une source éclaire un objet $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ et des fluorophores $\rho(\boldsymbol{r})$ situés à l'intérieur d'un domaine d'investigation Ω. Les intensités de diffraction (bleu) et de fluorescence (rouge) sont mesurées au niveau de points d'observation. 71

A.1 Une onde plane de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ illumine une interface de normale $\boldsymbol{z}$. a) L'onde est polarisée $\boldsymbol{s}$. b) L'onde est polarisée $\boldsymbol{p}$. 79

D.1 Configurations a) et b) 87

E.1 Un parallélépipède (de dimension $\lambda\backslash 2 \times \lambda\backslash 2 \times \lambda$ et de permittivité 1.05) placé à 2λ au-dessus d'un miroir parfait (de permittivité 20) est illuminé en incidence normale par une onde plane de longueur d'onde $\lambda = 500$ nm. Dimension du domaine d'investigation : $2\lambda \times 2\lambda \times 4\lambda$. Pas de discrétisation : $\lambda\backslash 10$. a) Permittivité de l'objet théorique. b) Permittivité obtenue par la méthode de la rétropropagation. c) Permittivité reconstruite à l'aide d'un algorithme itératif. d) Permittivité reconstruite avec le même algorithme qu'en c) et en ajoutant une contrainte de régularité selon l'axe optique. 94

Introduction

> Les relations sont le miroir dans lequel on se découvre soi-même.
>
> Jiddu Krishnamurti

Encouragées par l'amélioration constante des capacités des ordinateurs, les deux dernières décennies ont vu l'émergence de l'imagerie électromagnétique computationnelle, d'abord dans le domaine micro-onde et plus récemment dans le domaine optique. Cette technique d'imagerie est basée sur la modélisation précise du lien entre le champ mesuré et la permittivité de l'échantillon et l'utilisation d'une technique d'inversion pour reconstruire l'échantillon à partir des mesures. Lorsque l'échantillon est faiblement contrasté, les mesures sont habituellement supposées être reliées linéairement à la permittivité de l'objet d'étude et des techniques de reconstruction directes ou des méthodes d'inversion itérative linéaires sont utilisées. Lorsque l'échantillon présente de la diffusion multiple, le champ mesuré n'est plus relié linéairement à la distribution de permittivité de l'échantillon et des stratégies de reconstruction itératives essayent d'estimer la solution. La technique classique, qui appartient aux schémas d'inversion linéaires, consistent à estimer itérativement la permittivité de l'échantillon de manière à minimiser la distance (ou fonctionnelle coût) entre les données et le champ simulé pour une estimation donnée de l'échantillon. Dans la plupart des cas, la minimisation est effectuée en utilisant une technique de gradient. La principale difficulté est l'obtention du gradient de la fonction coût par rapport à la permittivité qui n'est pas triviale lorsque la diffusion multiple est présente. En pratique, seulement quelques études ont étudié ce problème dans le cas de l'imagerie électromagnétique 3D. Des expressions obtenues par des approches variationnelles ou par une dérivation directe de la fonctionnelle coût ont été proposées mais la complexité de leur formulation constitue un frein à leur comparaison et leur utilisation. Nous présentons une technique basée sur une approche physique pour calculer le gradient dans la configuration complexe de l'imagerie 3D vectorielle d'objets éventuellement anisotropes. Une approche similaire a été utilisée, en imagerie acoustique, afin de fournir une expression qui est équivalente à celle donnée par les multiplicateurs de Lagrange ou par différentiation directe. L'interprétation simple du gradient permet d'étudier plusieurs approximations pour plus ou moins de diffusion multiple et qui sont tractables numériquement.

La tomographie de diffraction optique (TDO) ou la microscopie par tomographie de diffraction (MTD) est une technique d'imagerie quantitative dans laquelle un objet est illuminé par un faisceau laser collimaté sous différents angles d'incidence, et une méthode interférométrique permet d'enregistrer à la fois la phase et l'intensité du champ dans l'espace image d'un microscope. La permittivité de l'objet est reconstruite numériquement à partir d'un jeu de données de champs complexes à l'aide d'une méthode d'inversion. Cette approche s'est avérée être particulièrement prometteuse

pour obtenir des images 3D d'échantillons non marqués avec une résolution meilleure que celle obtenue par les meilleurs microscopes analogiques et, dans certains cas, au-delà de la limite de diffraction. Malheureusement, malgré ces réussites, la MTD n'a toujours pas été utilisée comme outil d'imagerie de référence. En particulier, la nécessité de mesurer la phase du champ dans le plan image, qui complexifie le montage expérimental et empêche l'utilisation de microscopes standards, apparaît comme un inconvénient majeur. Ainsi, parvenir à des performances équivalentes avec un montage tomographique plus simple dans lequel seulement l'intensité est mesurée raviverait l'intérêt pour ce type technique d'imagerie computationnelle. La tomographie de diffraction sans mesure de phase, dans laquelle la permittivité de l'échantillon est reconstruite à partir des images d'intensités enregistrées sous différents angles d'incidence, a été popularisée sous le nom de la ptychographie optique de Fourier (POF). Cependant, jusqu'à maintenant, elle a été étudiée uniquement en configuration transmission avec des objectifs à faibles ouvertures numériques. Ces restrictions permettent l'utilisation de modèles directs scalaires approchés, tel que la méthode de la beam-propagation, qui facilite grandement la méthode de reconstruction. Des images 3D qualitatives de grands échantillons avec une résolution modérée (environ de quelques micromètres) ont été obtenus avec cette approche. Afin de pousser plus en avant l'intérêt de la tomographie de diffraction sans mesure de phase, ses performances doivent être étudiées avec des objectifs à forte ouverture numérique, en configurations transmission et réflexion, et pour des échantillons qui présentent de la diffusion multiple. Dans ces cas, les modèles directs scalaires approchés, sur lesquels repose actuellement la POF, ne sont pas toujours valides. C'est pourquoi, développer un schéma d'inversion qui ne dépend pas d'un modèle direct particulier et qui peut être appliqué à n'importe quelle méthode pour simuler les données étendrait grandement le domaine d'application de la tomographie sans mesure de phase.

La possibilité d'appliquer la tomographie de diffraction sans mesure de phase a des systèmes d'imagerie standards sans modifier de manière importante leur mode de fonctionnement ouvre la voie à l'élaboration de systèmes imageurs multimodaux. Nous proposons d'appliquer la tomographie de diffraction sans mesure de phase à la microscopie de fluorescence, afin d'estimer à l'aide d'un microscope standard et d'un algorithme de reconstruction la distribution de permittivité du milieu sondé ainsi que sa distribution de fluorophores, avec une résolution supérieure aux méthodes de microscopie analogiques. La technique de l'illumination structurée appliquée à la microscopie de fluorescence montre que l'on peut obtenir une résolution au moins deux fois meilleure dans les dimensions axiales et transversales par rapport à la résolution obtenue par un système limité par la limite de diffraction. Cette technique utilise des grilles de lumières finement calibrées qui éclairent les fluorophores sous différentes orientations. L'obtention de la super-résolution nécessite de connaître avec une grande précision l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores, ce qui limite l'utilisation de ces techniques d'imagerie à des milieux peu diffusants. En revanche, lorsque le contraste de permittivité du milieu qui environne les fluorophores est suffisamment important pour déformer l'illumination excitatrice, la qualité des reconstructions est rapidement dégradée. La prise en compte de la diffusion du milieu sur l'excitation des fluorophores, n'est à notre connaissance, pas traitée dans la littérature sur la microscopie à illumination structurée. La tomographie de

diffraction sans mesure de phase, utilisée avec un modèle de diffraction rigoureux, doit pouvoir fournir une estimation du milieu qui environne les fluorophores. La déformation de l'illumination excitatrice par le milieu peut être ainsi modélisée lors de la reconstruction des fluorophores, et permettre d'étendre les techniques de microscopie de fluorescence super-résolue à des milieux diffusants.

La présente thèse est organisée en quatre parties principales.

Le premier chapitre est axé sur l'imagerie dans le cadre de l'approximation de Born. Cette approximation est valide pour des objets d'études faiblement contrastés ou petits devant la longueur d'onde, la diffusion multiple au sein de l'objet peut être négligée et consiste à assimiler le champ électrique à l'intérieur de l'objet à celui obtenu en l'absence de l'objet. L'étude préalable de la diffraction en régime de diffusion simple est importante pour deux raisons. Premièrement, elle permet d'établir des modèles de diffraction analytiques simples qui serviront de modèles de référence lorsque nous étudierons l'imagerie en présence de la diffusion multiple. Ensuite, l'approximation de Born permet de construire des méthodes de reconstructions directes et rapides. Ces méthodes seront utilisées pour fournir une première estimation du milieu sondé dans le cadre de reconstructions avec diffusion multiple. Nous présenterons en particulier l'imagerie de Fourier et la méthode de la rétropropagation et établirons l'équivalence des estimations fournies par ces deux techniques.

Le deuxième chapitre aborde le problème de l'imagerie en présence de la diffusion multiple. Dans ce cadre, la relation entre le champ électrique et le contraste de permittivité du milieu sondé est non linéaire et il n'y a pas de manière simple d'inverser les données. Nous présenterons la stratégie de reconstruction classiquement utilisée qui consiste à estimer itérativement le milieu de manière à minimiser une fonctionnelle coût mesurant l'erreur entre les données et les prédictions du modèle de diffraction pour une estimation du milieu. La minimisation est effectuée par des techniques de gradient et nécessite le calcul du gradient de la fonctionnelle coût à minimiser. A cause de la non-linéarité du modèle direct par rapport au paramètre d'intérêt, ce calcul n'est pas simple et nous présenterons trois façons de calculer le gradient. Nous montrerons leur équivalence analytique et discuterons de leur utilisation. Ce travail d'équivalence permet la comparaison des différentes expressions des gradients trouvés dans la littérature. Enfin, nous appliquerons l'algorithme itératif présenté sur des données expérimentales où la diffusion multiple est importante et montrerons l'importance du calcul rigoureux du gradient.

Dans le troisième chapitre, nous présentons une technique de reconstruction versatile pour la tomographie de diffraction sans mesure de phase qui fournit des reconstructions de la distribution de permittivité de l'échantillon pour une configuration d'imagerie quelconque. Le point clé dans notre approche d'inversion est qu'elle ne dépend pas du modèle liant les intensités mesurées à la distribution de permittivité recherchée. Ainsi, elle peut être utilisée avec le modèle le plus adapté aux échantillons : sous l'approximation de Born en régime de diffusion faible, la méthode de la beam-propagation dans le régime de la diffusion vers l'avant, ou un solveur rigoureux des équations de Maxwell dans le régime de diffusion multiple.

Dans le quatrième et dernier chapitre, nous développons un algorithme de reconstruction tomographique sans mesure de phase qui estime conjointement la distribution de fluorophores et le milieu qui environne les fluorophores à partir des intensités de diffraction et de fluorescence. Nous étudierons ses performances de reconstruction

dans des milieux où la diffusion multiple n'est plus négligeable.

1. Imagerie sous l'approximation de Born

Je sers la science et c'est ma joie.

le disciple de Léonard

Table des matières

1.1 Introduction 5
1.2 Modélisation du problème de diffraction direct 5
1.3 Un modèle direct approché : l'approximation de Born 8
1.4 Résolution approchée du problème de diffraction inverse par tomographie sous l'approximation de Born 10
1.4.1 Imagerie de Fourier 11
1.4.2 Méthode de la rétropropagation 12
1.4.3 Lien entre l'optique de Fourier et la méthode de rétropropagation 14
1.5 Conclusion 15
Bibliographie 15

1.1. Introduction

Une expérience d'imagerie active en optique consiste à éclairer un objet matériel par une source lumineuse et à mesurer le champ diffusé par l'objet en un ou plusieurs points d'observation. À partir de ces mesures, les différentes techniques d'imagerie consistent à restituer les propriétés opto-géométriques de l'objet par un procédé analogique ou numérique. Les propriétés de l'objet sont estimées dans un volume de $\mathbb{R}^3$ qui contient l'objet et que nous appellerons le *domaine d'investigation* Ω. Les points d'observation où sont relevées les mesures sont situés sur une surface 2D et constituent le *domaine d'observation* Γ [Fig. 1.1].

Supposant connus l'objet et l'illumination, résoudre le *problème direct* consiste à calculer le champ diffusé par l'objet au niveau des points d'observation. Supposant connus l'illumination et le champ diffusé par l'objet, résoudre le *problème inverse* consiste à estimer des propriétés de l'objet à l'intérieur du domaine d'investigation.

1.2. Modélisation du problème de diffraction direct

Une expérience de tomographie consiste à illuminer successivement un objet sous différents angles et à mesurer pour chaque illumination le champ diffusé par l'objet au

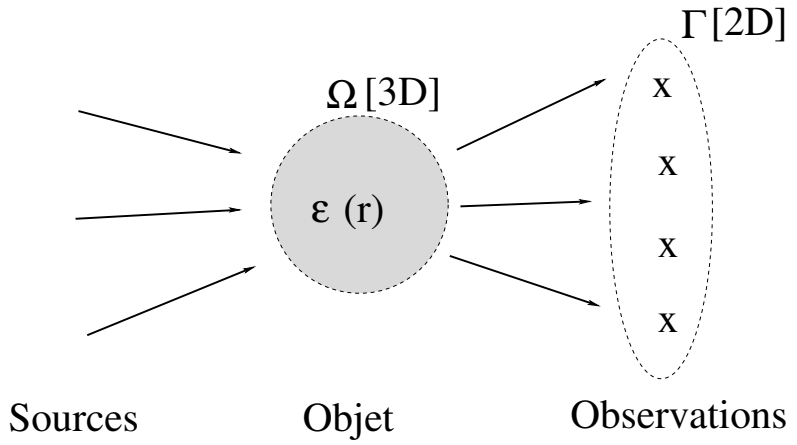

FIGURE 1.1. – Configuration d'imagerie. Une source électromagnétique éclaire un objet de distribution de permittivité $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ situé à l'intérieur du domaine d'investigation Ω. Le champ diffusé par l'objet est mesuré aux points d'observations formant un domaine Γ.

niveau de points d'observation. A partir du jeu de données tomographiques constitué des différents signaux mesurés, un algorithme de reconstruction est utilisé afin de restituer dans un volume donné une ou plusieurs propriétés intrinsèques de l'objet.

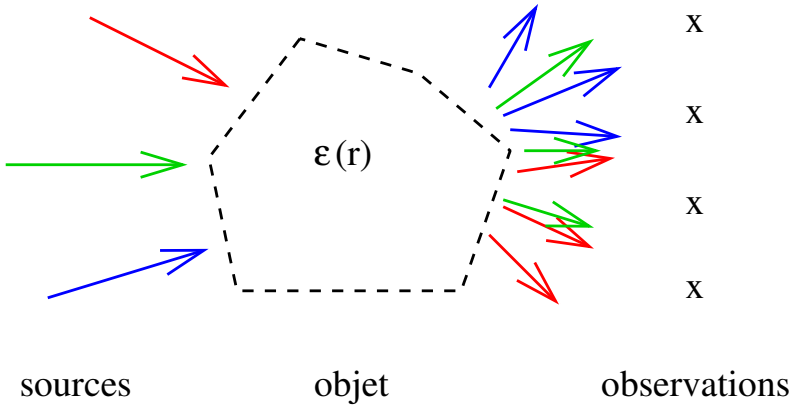

FIGURE 1.2. – Un objet est éclairé par différentes illuminations. Pour chaque illumination, le champ diffusé par l'objet est mesuré au niveau de points d'observation.

L'imagerie tomographique s'est sérieusement imposée comme technique d'imagerie à partir de l'augmentation des capacités de stockage mémoire et de calcul des processeurs, permettant de réduire considérablement le temps d'exécution des algorithmes de reconstruction. La mémoire et la capacité de calcul des ordinateurs nécessaires au stockage et au traitement des données augmente rapidement avec le nombre d'illumination et le nombre de points d'observation. L'algorithme de reconstruction doit être conçu de manière astucieuse afin de s'adapter au mieux à la configuration d'imagerie.

Il existe une vaste famille de techniques tomographiques qui diffèrent les unes des autres par le signal mesuré ou par la grandeur physique que l'on souhaite restituer : l'échographie restitue l'impédance acoustique à partir d'un signal acoustique ; l'imagerie par résonance magnétique (IRM) restitue des temps de relaxation de moments magnétiques à partir de tensions électriques...

Dans cette thèse, nous nous intéressons à un type particulier de tomographie : la tomographie de diffraction optique. La tomographie de diffraction optique est une technique d'imagerie qui associe un système imageur et un algorithme de reconstruction afin de produire des estimations 3D de la permittivité d'un objet à partir de la mesure des champs diffractés.

La formulation du problème direct de diffraction repose sur les hypothèses suivantes :

1. Convenant d'une dépendance temporelle en $\exp(-i\omega t)$ où ω est la pulsation angulaire, une grandeur physique $\underline{A}(\boldsymbol{r}, t)$ s'écrira à l'aide de son amplitude complexe $A(\boldsymbol{r})$

$$\underline{A}(\boldsymbol{r}, t) \quad = \quad \mathrm{Re}\left[A(\boldsymbol{r}) \exp(-i\omega t)\right]. \tag{1.1}$$

2. Les sources électromagnétiques excitatrices éclairant l'objet sont supposées être à l'infini, de sorte que la modélisation du champ incident (champ à l'absence du diffuseur) est une onde plane polarisée rectilignement.

3. Tous les milieux considérés dans ce tapuscript sont supposés être linéaires, isotropes [i] et non magnétiques. Ainsi, le milieu avec et sans l'objet sont décrits respectivement, par les *permittivités relatives* $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ et $\varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})$. On définit l'indice optique du milieu avec et sans l'objet respectivement, par $n(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\varepsilon(\boldsymbol{r})}$ et $n^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})}$. On définit le *contraste de permittivité* $\chi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon(\boldsymbol{r}) - \varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})$ de l'objet qui s'identifie à la *susceptibilité électrique* de l'objet lorsque $\varepsilon^{\mathrm{ref}} = \varepsilon_0$ avec ε_0 la permittivité du vide. Il est à noter que le contraste χ est non nul uniquement sur le support spatial de l'objet.

L'interaction de l'onde incidente avec le milieu est décrite par l'équation d'onde du milieu [ii], qui découle des équations de Maxwell,

$$\left[\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \cdot) - k_0^2 \varepsilon(\boldsymbol{r})\right] \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad i\omega\mu_0 \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}), \tag{1.2}$$

où μ_0 est la perméabilité du vide, $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ la distribution de courant et k_0 le nombre d'onde défini par $k_0^2 = \omega^2 \mu_0 \varepsilon^{\mathrm{ref}}$.

Cette équation peut être réécrite comme suit,

$$\left[\boldsymbol{\nabla} \times (\boldsymbol{\nabla} \times \cdot) - k_0^2 \varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})\right] \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad i\omega\mu_0 \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) + k_0^2 \chi(\boldsymbol{r}) \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}), \tag{1.3}$$

et elle est définie pour tout $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^3$ avec une condition supplémentaire d'ondes sortantes. Eq. (1.3) est la formulation forte du problème de diffraction.

i. Lorsque l'hypothèse d'isotropie des milieux n'est pas satisfaite, cela sera explicitement souligné.

ii. L'équation d'onde du milieu s'obtient en couplant les équations Maxwell-Faraday et Maxwell-Ampère.

Une formulation intégrale du champ électrique $\boldsymbol{E}$ s'obtient par l'introduction de *la fonction de Green du milieu de référence* $\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ qui s'interprète physiquement comme étant le champ électrique, observé à une position $\boldsymbol{r}$, par un dipôle localisé en $\boldsymbol{r}'$ et satisfaisant :

$$\left[\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\cdot)-k_0^2\varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})\right]\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \;=\; \overline{\boldsymbol{I}}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \tag{1.4}$$

où $\overline{\boldsymbol{I}}$ est la matrice identité et $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ est la distribution de Dirac.

En utilisant les propriétés de la fonction de Green, le champ électrique s'écrit :

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) \;=\; \boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})+k_0^2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}'), \tag{1.5}$$

où $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})$ est le champ électrique produit par la densité de courant $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')$ en l'absence de l'objet appelé *le champ de référence*. Le support de l'intégrale du membre de droite est réduit à Ω car $\chi(\boldsymbol{r}')=0$ pour tout $\boldsymbol{r}'$ en dehors de Ω.

On définit *le champ diffracté* $\boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}}(\boldsymbol{r})$ [iii] comme étant la soustraction du champ électrique total $\boldsymbol{E}$ et du champ de référence $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}}(\boldsymbol{r}) &= \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})-\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r}),\\ &= k_0^2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}').\end{aligned} \tag{1.6}$$

Le contraste $\chi(\boldsymbol{r})$ quantifie la capacité de l'objet à diffuser la lumière et le champ diffracté constitue la signature électromagnétique de l'objet. C'est pourquoi les expériences d'imagerie cherchent à mesurer le champ diffracté.

La formulation intégrale des champs (Eq. (1.5)) est ce que nous appelons le *modèle direct*. Elle constitue la description mathématique de l'interaction entre l'illumination et l'objet. Cette formulation facilite la manipulation algébrique des différents champs et permet d'interpréter l'opération de sommation en terme d'interférences d'ondes : le champ électrique $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ est l'interférence du champ de référence $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})$ et des champs rayonnés par les sources induites $\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')$ situées en chaque point $\boldsymbol{r}'$ de l'objet. Enfin, la condition de nullité du champ à l'infini est *de facto* vérifiée grâce à l'emploi de la fonction de Green.

On peut montrer que le problème direct est un problème bien posé au sens d'Hadamard, à savoir que le champ électrique existe, est unique et dépend de manière continue de la permittivité de l'objet.

1.3. Un modèle direct approché : l'approximation de Born

Nous avons établi à la section 1.2 la formulation intégrale des champs, que nous rappelons par commodité

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) \;=\; \boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})+k_0^2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}'), \tag{1.7}$$

iii. *scat* est une contraction de scattering, c'est-à-dire diffraction en anglais.

qui décrit l'interaction entre le champ de référence $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r})$ présent en l'absence de l'objet, et l'objet qui est caractérisé par son contraste de permittivité relative $\chi(\boldsymbol{r})$. Lorsque l'illumination éclaire l'objet, elle peut parvenir directement au niveau des points d'observations, mais peut également être diffusée successivement par un, deux voire une infinité de diffuseurs à l'intérieur de l'objet. Le champ électrique se présente donc comme l'interférence des champs issus de tous ces "chemins de diffusion" possibles dans l'objet. Ce phénomène de diffusion en cascade est appelé *diffusion multiple*. Résoudre l'Eq. (1.7), dite équation auto cohérente (self consistent en anglais) prend en compte rigoureusement la diffusion multiple, mais comme nous le verrons plus tard sa résolution n'est pas chose facile. Si la diffusion multiple est modérée, c'est-à-dire que l'objet n'est pas trop grand par rapport à la longueur d'onde et de faible contraste, alors cette équation peut s'écrire sous la forme d'une série, dite *série de Born*,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) &= \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}) + k_0^2 \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \; \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}') \\ &+ k_0^4 \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \; \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'' \; \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}'')\chi(\boldsymbol{r}'')\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}'') + \dots \qquad (1.8)\end{aligned}$$

Le terme d'ordre 1 en χ correspond à la diffusion simple, le terme d'ordre 2 à la diffusion double, etc. Les ordres de diffusion élevés contribuent d'autant plus au champ électrique que le contraste χ est grand devant l'unité. Il existe des critères théoriques sur la convergence de la série de Born qui reposent sur l'amplitude du contraste par rapport à la permittivité du milieu de référence [7].

Nous notons que la diffusion multiple lie de manière non linéaire le contraste de l'objet $\chi(\boldsymbol{r})$ au champ diffracté $\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o})$ mesuré aux points d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$. Dans ce cas, la résolution du problème inverse n'est pas simple et des méthodes de reconstruction itératives doivent être utilisées (chapitre 2). Toutefois, il est possible de concevoir des techniques d'imagerie simples lorsque la diffusion multiple peut être négligée.

L'*approximation de Born* consiste à assimiler le champ à l'intérieur de l'objet au champ de référence. Cela revient à ne garder que le terme d'ordre 0 en χ dans la série de Born lorsque le champ est calculé en un point $\boldsymbol{r} \in \Omega$ du domaine d'investigation et à ne garder que les termes d'ordre 0 et 1 en χ lorsque le champ est calculé à un point d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$. Cette approximation n'est valable que pour des objets faiblement diffractants et petits devant la longueur d'onde d'illumination. Son grand intérêt est d'établir une relation linéaire entre le champ diffracté et le contraste χ de l'objet, permettant d'obtenir des modèles simples et des solutions analytiques. Ces dernières sont souvent utilisées comme estimations initiales dans les algorithmes de reconstruction itératifs (chapitre 2).

1.4. Résolution approchée du problème de diffraction inverse par tomographie sous l'approximation de Born

La tomographie de diffraction optique (TDO) a récemment émergé de la microscopie par holographie numérique (MHN) comme une technique puissante pour reconstruire en 3D la carte de permittivité relative d'un objet sous test avec un grand pouvoir de résolution [6]. Comme pour la MHN, la TDO récupère à la fois l'amplitude et la phase du champ diffracté de l'objet grâce à l'usage d'un système d'interférence avec un faisceau de référence, sur un montage hors axe, voir Fig. 1.3 qui représente le schéma de la manipulation telle qu'elle est faite dans l'équipe. Tandis que pour la MHN l'objet est illuminé en incidence normale, la TDO nécessite de réaliser cette détection de manière successive sous des angles d'illumination différents, ce qui permet d'obtenir une reconstruction 3D et d'augmenter le pouvoir de résolution. La TDO est aussi connue dans la littérature sous d'autres appellations, comme la microscopie à synthèse d'ouverture, la tomographie de phase, ou la microscopie par tomographie de diffraction. Jusqu'à maintenant, cette technique a été appliquée avec succès pour des objets 3D principalement dans le cas d'objets biologiques, où le contraste de permittivité est faible et des approximations linéarisantes comme l'approximation de Born peuvent être utilisées pour calculer le champ diffracté [10, 9, 4, 8, 1, 2]. Dans ce cas, l'objet est reconstruit en appliquant un algorithme d'inversion linéaire à un jeu de données. Le gain de résolution transverse par la mesure sous plusieurs illuminations peut être quantifiée en calculant l'ouverture synthétique du microscope : l'ouverture numérique équivalente du système devient égale à la somme des ouvertures numériques utilisées pour collecter le champ diffracté et celle définie par l'étendue des angles d'illumination[3]. Des résolutions au-delà du critère classique de Rayleigh ont été obtenues en utilisant cette approche[6, 9, 1].

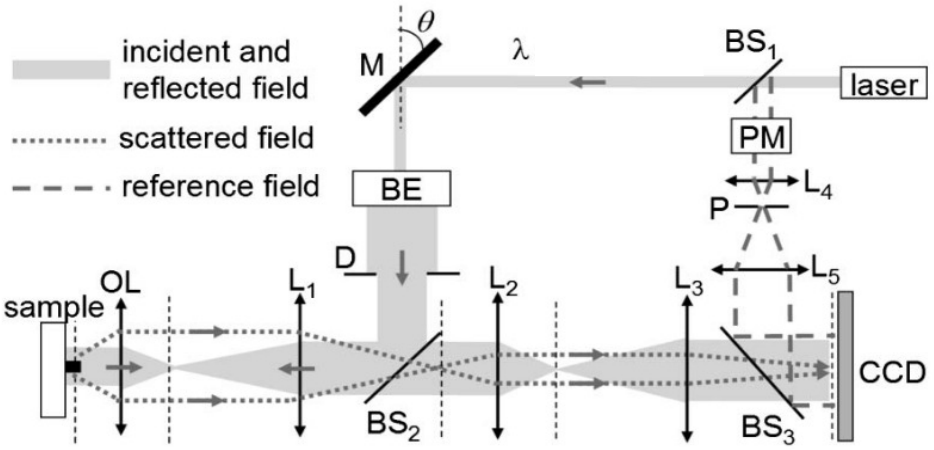

FIGURE 1.3. – Schéma du montage expérimental interférométrique hors axe : M, miroir orientable ; BE, élargisseur de faisceau ; D, diaphragme ; OL, objectif ; L_1, lentille de tube ; $L_{2...5}$, lentilles ; $BS_{1...3}$, séparateur de faisceaux ; PM, modulateur de phase ; P, sténopé.

Dans le cadre de l'approximation de Born, nous allons présenter deux techniques, l'imagerie de Fourier et la méthode de la rétropropagation, qui permettent d'estimer le contraste $\chi(\boldsymbol{r})$ en tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$ du domaine d'investigation à partir du jeu de données tomographiques.

1.4.1. Imagerie de Fourier

L'approximation de Born assimile le champ dans l'objet au champ de référence et le champ diffracté est dans ce cas linéairement relié au contraste de l'objet :

$$\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o}, \chi, \boldsymbol{E}^{\text{ref}}) = k_0^2 \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\ \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r})\chi(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}), \tag{1.9}$$

où $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ est un point d'observation. Supposons dans un premier temps que la configuration soit celle de l'espace libre. La fonction de Green associée est dans ce cas analytique (annexe B) et s'écrit en zone lointaine ($r \gg \lambda$) pour toute direction d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ et tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$:

$$\begin{aligned} \overline{\boldsymbol{G}}^{\text{libre}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}) &= e^{ik_0 \boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{r}} \overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{o}}, \\ \overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{o}} &= \left[\overline{\boldsymbol{I}} - \frac{\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}}}{|\boldsymbol{o}|^2}\right], \end{aligned} \tag{1.10}$$

où $\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{o}}$ est le projecteur orthogonal à la direction d'observation $\boldsymbol{o}$. Dans l'expression de $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{libre}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r})$, nous avons négligé le préfacteur de l'onde sphérique $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^{ik_0 R}}{R}$ qui joue le rôle d'une constante dans la suite de nos développements. En éclairant l'objet par une onde plane $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}) = e^{-i\boldsymbol{k}^{\text{inc}}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}$, le champ diffracté s'écrit :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{k}^{\text{obs}}, \chi, \boldsymbol{k}^{\text{inc}}) &= k_0^2 \left[\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r} e^{i(\boldsymbol{k}^{\text{obs}} - \boldsymbol{k}^{\text{inc}})\cdot\boldsymbol{r}}\chi(\boldsymbol{r})\right] \overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{k}^{\text{obs}}}\boldsymbol{u}, \\ &= k_0^2 \tilde{\chi}\left(\boldsymbol{k}^{\text{obs}} - \boldsymbol{k}^{\text{inc}}\right) \overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{k}^{\text{obs}}}\boldsymbol{u}, \end{aligned} \tag{1.11}$$

où $\boldsymbol{k}^{\text{obs}} = k_0\boldsymbol{o}$ et $\tilde{\chi}(\boldsymbol{k}) = \text{TF}_{3\text{D}}[\chi] = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\boldsymbol{r}\chi(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ est la transformée de Fourier 3D de $\chi(\boldsymbol{r})$ [iv]. Ainsi en éclairant l'objet sous différentes illuminations $\boldsymbol{k}^{\text{inc}}$ et en mesurant pour chaque illumination le champ diffracté en zone lointaine $\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{k}^{\text{obs}}, \chi, \boldsymbol{k}^{\text{inc}})$, l'Eq. (1.11) montre qu'il est possible de déterminer $\tilde{\chi}(\boldsymbol{k})$. L'objet $\chi(\boldsymbol{r})$ est calculé ensuite à l'aide d'une transformée de Fourier 3D inverse. Cette relation qui lie le champ diffracté en champ lointain au contraste de l'objet est centrale dans la théorie de l'optique de Fourier. Toutes les illuminations $\boldsymbol{k}^{\text{inc}}$ et toutes les directions d'observation $\boldsymbol{k}^{\text{obs}}$ ne sont pas réalisables et sont limitées à la fois par la configuration d'imagerie et par les caractéristiques du système imageur. Par exemple, un objectif de microscope ne collecte que les directions d'observation comprises dans un cône d'angle $\theta^{\max}$ et son pouvoir de collection est quantifié par son ouverture numérique $NA = n^{\text{obj}}\sin(\theta^{\max})$ où n^{obj} est l'indice optique dans lequel l'objectif est immergé.

La fonction d'étalement du point (ou PSF de l'anglais *point spread function*) est l'image fournie par le système imageur d'une source ponctuelle, et s'identifie

iv. Puisque χ est nul en dehors du domaine d'investigation Ω, l'intégrale peut être calculée sur $\mathbb{R}^3$ et correspond bien à une transformée de Fourier.

avec la fonction de Green $\overline{\boldsymbol{G}}$. Elle permet de définir le pouvoir de résolution du microscope comme étant la plus petite distance qui sépare deux sources ponctuelles de sorte que ces dernières soit séparables à partir de leur images. Le critère de Rayleigh, couramment utilisé en imagerie, stipule que deux sources ponctuelles sont séparables à partir d'une distance supérieure à la largeur à demi-hauteur de la PSF, soit approximativement $\lambda/2$. Les microscopes sont généralement invariants par translation dans des directions transverses (c'est-à-dire selon les directions orthogonales à l'axe optique) et l'image des sources secondaires par un microscope linéaire correspond à la convolution de ces dernières avec la PSF. Dans ce cadre, on définit la fonction de transfert optique (aussi appelée OTF de l'anglais *optical transfer function*) comme la transformée de Fourier 2D de la PSF selon les directions transverses. Selon l'Eq. (1.11), l'OTF est non nulle sur la région $[\boldsymbol{k}^{\text{obs}} - \boldsymbol{k}^{\text{inc}}]$ de l'espace de Fourier accessible avec le système imageur et la configuration d'imagerie. En transmission, il est possible de restituer les basses fréquences spatiales de l'objet et peu les fréquences élevées, tandis qu'en réflexion les basses fréquences spatiales ne sont pas accessibles et seulement les hautes fréquences sont restituées [Fig. 1.4]. Le support de l'OTF est contenu à l'intérieur de la sphère d'Ewald, une boule de rayon $k_0(NA^{\text{illu}} + NA^{\text{obs}})$ où NA^{illu} est l'ouverture numérique formée par les faisceaux d'illumination et NA^{obs} est l'ouverture numérique de collection de l'objectif du microscope. Par extension, on peut définir la PSF de la technique d'imagerie comme la reconstruction d'une source ponctuelle, obtenue par la collection de mesures par le système imageur et le traitement numérique de ces mesures à l'aide d'un algorithme de reconstruction.

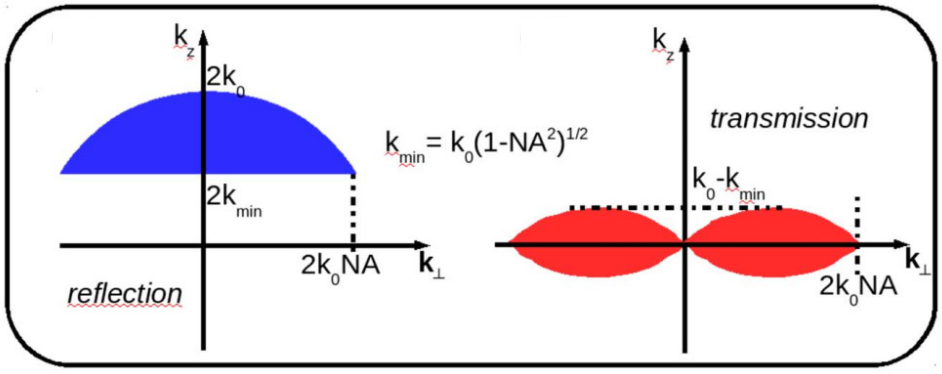

FIGURE 1.4. – Les fonctions de transfert optiques en tomographie de diffraction en transmission et en réflexion.

1.4.2. Méthode de la rétropropagation

La méthode de la rétropropagation est une procédure qui permet d'estimer la susceptibilité du milieu en faisant rétropropager les champs diffractés depuis les points d'observations Γ jusqu'aux points du domaine d'investigation Ω. Cette technique a été introduite initialement dans [5] pour générer des estimations initiales pour la résolution du problème de diffraction inverse de manière itérative. La distribution de

sources secondaires induites dans l'objet $\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ s'obtient par la conjugaison de la fonction de Green

$$\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi^{\text{retro}},l) \quad = \quad \int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ \overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o},l), \tag{1.12}$$

pour $\boldsymbol{r} \in \Omega$ et une illumination l. Le calcul de $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi^{\text{retro}},l)$ ne nécessite pas la connaissance de $\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$ et est effectué directement à partir de

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},l) = \chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi^{\text{retro}},l) \tag{1.13}$$

en résolvant Eq. (1.7),

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi^{\text{retro}},l) = \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r},l) + k_0^2 \int_{\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}',l), \tag{1.14}$$

pour tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$ et toute illumination l. Dans ce qui suit, nous supposons valide l'approximation de Born, c'est-à-dire $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi^{\text{retro}},l) \approx \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r},l)$. En formant le produit scalaire de $\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r},l)$ avec chacun des membres de l'Eq. (1.12), on obtient

$$\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r},l)\right|^2 \quad = \quad \int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(r,l)\cdot\overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o},l),$$

et puisque le contraste est indépendant de l'illumination, il peut s'écrire alors comme :

$$\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \nu\frac{1}{\sum_l |\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r},l)|^2}\sum_l \int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r},l)\cdot\overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o},l), \tag{1.15}$$

où ν est un réel tel que la fonction

$$\sum_l \left\|\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\cdot,l) - \nu\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\cdot,\chi^{\text{retro}},l)\right\|_{\Gamma}^2, \tag{1.16}$$

soit minimale. L'annulation de la dérivée première de cette fonction en ν donne

$$\nu = \frac{\sum_l \operatorname{Re}\left\langle \boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\cdot,l), \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\cdot,\chi^{\text{retro}},l)\right\rangle_{\Gamma}}{\sum_l \|\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\cdot,\chi^{\text{retro}},l)\|_{\Gamma}^2}. \tag{1.17}$$

Par ailleurs, ν est toujours positif [v].

v. Cela vient du fait que

$$\begin{aligned}
\left\langle \boldsymbol{E}^{\text{mes}}, \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\cdot,\chi^{\text{retro}})\right\rangle_{\Gamma} &= \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ \boldsymbol{E}^{\text{mes}*}(\boldsymbol{o})\cdot\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o},\chi^{\text{retro}}),\\
&= \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_{\boldsymbol{o}'\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}'\boldsymbol{E}^{\text{mes}*}(\boldsymbol{o})\ \cdot\ \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})\overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o}')\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}'),\\
&= \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_{\boldsymbol{o}'\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}'[\overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o})]^{*}\ \cdot\ \overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o}')\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}'),\\
&= \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}\ \left[\int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ \overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o})\right]^{*}\ \cdot\ \left[\int_{\boldsymbol{o}'\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}'\overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o}')\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}')\right],\\
&= \|\int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ \overline{\boldsymbol{G}}^{*}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o}')\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o})\|_{\Omega}^2,\\
&\geq 0.
\end{aligned}$$

L'équation (1.15) suppose que $\sum_l |\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)|^2 \neq 0$ en tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$ ce qui est en pratique toujours le cas - autrement, cela signifie que des régions du milieu ne sont pas éclairées et par conséquent la configuration est dans ce cas à revoir en choisissant par exemple d'autres illuminations plus adéquates. On peut montrer que le calcul pratique de $\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$ est effectué de manière simple dans les algorithmes itératifs (section 2.5.1).

1.4.3. Lien entre l'optique de Fourier et la méthode de rétropropagation

L'imagerie de Fourier et la méthode de la rétropropagation sont deux méthodes qui permettent d'estimer le contraste $\chi(\boldsymbol{r})$ de l'objet à partir de la mesure de champs diffractés. Nous nous proposons dans cette section de comparer les estimations fournies par ces deux méthodes et d'établir une équivalence entre les deux approches.

Soit $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}^{\text{inc}}) = e^{-i\boldsymbol{k}^{\text{inc}}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}$ une onde plane qui éclaire l'objet $\chi(\boldsymbol{r})$. L'estimation $\chi^{\text{Fourier}}(\boldsymbol{r})$ fournie par l'imagerie de Fourier (Eq. (1.11)) est

$$\chi^{\text{Fourier}}(\boldsymbol{r}) = \text{TF}_{3\text{D}}^{-1}\left[\frac{\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{k}^{\text{obs}} - \boldsymbol{k}^{\text{inc}}, \chi)\cdot\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{k}^{\text{obs}}}\boldsymbol{u}}{|\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{k}^{\text{obs}}}\boldsymbol{u}|^2}\right](\boldsymbol{r}), \tag{1.18}$$

où la transformée de Fourier se fait sur la variable $\boldsymbol{k}^{\text{obs}} - \boldsymbol{k}^{\text{inc}}$. Or, le champ lointain diffracté en espace libre s'écrit sous l'approximation de Born

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{k}^{\text{obs}} - \boldsymbol{k}^{\text{inc}}, \chi) &= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{libre}}(\boldsymbol{k}^{\text{obs}}, \boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{k}^{\text{inc}}),\\ &= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\left[e^{i\boldsymbol{k}^{\text{obs}}\cdot\boldsymbol{r}'}\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{k}^{\text{obs}}}\right]\chi(\boldsymbol{r}')e^{-i\boldsymbol{k}^{\text{inc}}\cdot\boldsymbol{r}'}\boldsymbol{u},\\ &= \left[\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\chi(\boldsymbol{r}')e^{i(\boldsymbol{k}^{\text{obs}}-\boldsymbol{k}^{\text{inc}})\cdot\boldsymbol{r}'}\right]\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{k}^{\text{obs}}}\boldsymbol{u}.\end{aligned} \tag{1.19}$$

En injectant Eq. (1.19) dans Eq. (1.18), on obtient

$$\begin{aligned}\chi^{\text{Fourier}}(\boldsymbol{r}) &= \text{TF}_{3\text{D}}^{-1}\left[\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\chi(\boldsymbol{r}')e^{i(\boldsymbol{k}^{\text{obs}}-\boldsymbol{k}^{\text{inc}})\cdot\boldsymbol{r}'}\right](\boldsymbol{r}),\\ &= \int \mathrm{d}\{\boldsymbol{k}^{\text{obs}} - \boldsymbol{k}^{\text{inc}}\}\left[\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\chi(\boldsymbol{r}')e^{i(\boldsymbol{k}^{\text{obs}}-\boldsymbol{k}^{\text{inc}})\cdot\boldsymbol{r}'}\right]e^{-i(\boldsymbol{k}^{\text{obs}}-\boldsymbol{k}^{\text{inc}})\cdot\boldsymbol{r}},\\ &= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}' J^{\text{libre, ondes planes}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}'),\end{aligned} \tag{1.20}$$

où l'on définit l'opérateur de l'imagerie de Fourier en espace libre pour des ondes planes

$$J^{\text{libre, ondes planes}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \sum_{\boldsymbol{k}^{\text{inc}}}\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{k}^{\text{obs}}e^{-i\boldsymbol{k}^{\text{obs}}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{i\boldsymbol{k}^{\text{inc}}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}. \tag{1.21}$$

L'expression de l'opérateur de rétropropagation est développé en annexe E. En espace libre avec des illuminations en ondes planes, les opérateurs de l'imagerie de Fourier (Eq. (1.21)) et de la rétropropagation (Eq. (E.6)) ne diffèrent sous l'intégrale

que par le terme de projection $1 - |\boldsymbol{k}^{\text{obs}} \cdot \boldsymbol{u}|^2$: les deux méthodes donnent accès aux mêmes fréquences spatiales de l'objet et fournissent donc les mêmes estimations de $\chi(\boldsymbol{r})$.

1.5. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons établi la relation rigoureuse permettant de décrire le problème direct de diffraction, c'est à dire connaissant l'éclairement et l'objet de calculer le champ dans tout l'espace. Cette relation relie non linéairement le champ diffracté au contraste de l'objet, ce qui rend le problème inverse de diffraction plus difficile à résoudre. Cependant, dans le cadre de l'approximation de Born, la relation entre champ diffracté et susceptibilité devient linéaire et le problème inverse peut être résolu soit *via* la méthode de rétropropagation ou soit l'imagerie de Fourier par l'application d'une transformation de Fourier. Nous avons démontré que les deux méthodes sont équivalentes en ce sens qu'elles donnent accès aux mêmes fréquences spatiales.

Bibliographie

[1] Y. Cotte, F. Toy, P. Jourdain et al. ■ Marker-free phase nanoscopy ■. In : *Nat. Photon.* 7 (2013), p. 113-117.

[2] N. Destouches, C. A. Guérin, M. Lequime et al. ■ Determination of the phase of the diffracted field in the optical domain. Application to the reconstruction of surface profiles ■. In : *Opt. Commun.* 198 (2001), p. 233-239.

[3] O. Haeberlé, K. Belkebir, H. Giovaninni et al. ■ Tomographic diffractive microscopy : basics, techniques and perspectives ■. In : *Journal of Modern Optics* 57.9 (2010), p. 686-699.

[4] Moonseok Kim, Youngwoon Choi, Christopher Fang-Yen et al. ■ High-speed synthetic aperture microscopy for live cell imaging ■. In : *Opt. Lett.* 36.2 (jan. 2011), p. 148-150.

[5] R. E. Kleinman et P. M. van den Berg. ■ Two-dimensional location and shape reconstruction ■. In : *Radio Sci.* 29.4 (1994), p. 1157-1169.

[6] V. Lauer. ■ New approach to optical diffraction tomography yielding a vector equation of diffraction tomography and a novel tomographic microscope ■. In : *J. Microsc.* 205 (fév. 2002), p. 165-176.

[7] Vadim A Markel et John C Schotland. ■ On the convergence of the Born series in optical tomography with diffuse light ■. In : *Inverse Problems* 23.4 (juin 2007), p. 1445-1465.

[8] M. Mir, S. D. Babacan, M. Bednarz et al. ■ Visualizing Escherichia coli sub-cellular structure using sparse deconvolution spatial light interference tomography ■. In : *PLoS ONE* (2012), e39816.

[9] Bertrand Simon, Matthieu Debailleul, Anne Beghin et al. ■ High-resolution tomographic diffractive microscopy of biological samples ■. In : *Journal of Biophotonics* 3.7 (mar. 2010), p. 462-467.

[10] Yongjin Sung, Wonshik Choi, Christopher Fang-Yen et al. ■ Optical diffraction tomography for high resolution live cell imaging ■. In : *Opt. Express* 17.1 (2009), p. 266-277.

2. Tomographie de diffraction en présence de diffusion multiple

Tout changement est mauvais.

Patrick Chaumet

Table des matières

2.1 Introduction . . . 18
2.2 Problème de la diffraction inverse et stratégie d'inversion en diffusion multiple . . . 18
2.3 Minimisation de la fonction coût . . . 19
2.4 Calcul de l'opérateur de Fréchet . . . 21
2.4.1 Définitions et notation des opérateurs . . . 21
2.4.2 Différentiation directe du modèle de diffraction . . . 21
2.4.3 Approche variationnelle . . . 22
2.4.4 Calcul du gradient par le théorème de réciprocité de Lorentz . 24
2.4.5 Équivalences des différentes expressions de l'opérateur de Fréchet 25
2.4.6 Discussion sur les différentes méthodes pour obtenir l'opérateur de Fréchet . . . 26
2.5 Étude de la minimisation de la fonction coût sous l'approximation de Born . . . 27
2.5.1 Relation entre la rétropropagation et le gradient de la fonction coût . . . 27
2.5.2 Caractérisation de la solution fournie par l'algorithme itératif sous l'approximation de Born . . . 28
2.6 Implémentation de l'algorithme . . . 30
2.6.1 Informations générales . . . 30
2.6.2 Structure du programme . . . 30
2.6.3 Définition du repère cartésien . . . 32
2.6.4 Définition du milieu de référence, calcul de sa fonction de Green et calcul du champ électrique dans le domaine d'investigation 32
2.6.5 Position et discrétisation du domaine d'investigation . . . 33
2.6.6 Calcul du champ diffracté au travers du microscope et de la fonction de Green du microscope . . . 34
2.6.7 Implémentation numérique de l'algorithme de minimisation . . 35
2.7 Reconstruction d'objets en présence de diffusion multiple . . . 36
2.8 Conclusion . . . 40
Bibliographie . . . 42

2.1. Introduction

Pour pouvoir établir une stratégie d'inversion, il est nécessaire de construire un modèle physique qui décrit aussi précisément que possible l'expérience tomographique. Lorsque de la lumière interagit avec un objet, elle est diffusée au cours de sa propagation dans toutes les directions. Ce phénomène, appelé diffusion multiple, est d'autant plus fort que la permittivité de l'objet est différente de celle du milieu de référence. Dans ce cas, le champ diffracté au niveau des points d'observation est relié de manière non linéaire à la permittivité de l'objet. Il est possible de linéariser le modèle direct pour des objets faiblement diffractants, comme c'est le cas pour des objets petits devant la longueur d'onde d'illumination ou ayant une permittivité proche de celle du milieu de référence. Il existe dans ce cas des techniques de reconstruction simples et directes (section 1.4).

Cependant, dans le cas général, il n'y a pas de techniques de reconstruction simples et il faut mettre en œuvre des algorithmes de reconstruction itératifs.

2.2. Problème de la diffraction inverse et stratégie d'inversion en diffusion multiple

Un objet dont le support est compris dans un domaine fini Ω est illuminé successivement par N illuminations. Pour chaque illumination, le champ diffracté par l'objet est mesuré à des positions d'observations situées sur une surface Γ.

Nous définissons le problème de diffraction inverse ainsi : Trouver la distribution de permittivité $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ pour tout $\boldsymbol{r} \in \Omega$ telle que pour chaque illumination l, on ait pour toute observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$

$$\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l) \quad = \quad \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o}, \varepsilon, l), \tag{2.1}$$

où $\boldsymbol{E}^{\text{mes}}$ est le champ diffracté mesuré et $\boldsymbol{E}^{\text{scat}}$ est le champ diffracté calculé par le modèle direct avec la distribution ε. Pour une illumination donnée, le champ diffracté est une fonction non linéaire de la permittivité de l'objet (Eqs. (1.5) et (1.6)) et il n'existe pas de formule mathématique générale qui permette de résoudre le problème inverse énoncé au-dessus. Pire encore, le problème inverse n'est pas bien posé au sens d'Hadamard, à savoir qu'il n'y a pas nécessairement de manière simultanée l'existence, l'unicité et la continuité de la solution par rapport aux données du problème. Il est alors utile d'avoir recours à des techniques de régularisation pour pouvoir ajouter des informations *a priori* spécifiques au problème traité.

En présence de diffusion multiple, la stratégie la plus populaire est de reconstruire l'objet itérativement. L'algorithme est conçu de sorte que l'écart entre le champ diffracté mesuré et le champ diffracté prédit par le modèle soit minimum. Le problème de la diffraction inverse décrit plus haut est ramené à un problème de minimisation d'une fonctionnelle coût $\mathcal{F}(\chi)$ (appelée plus simplement *fonction coût*) que nous choisissons égale à

$$\mathcal{F}(\chi) \quad = \quad W_\Gamma \sum_l \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o} \, \left| \boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o}, \chi, l) \right|^2, \tag{2.2}$$

avec le facteur de normalisation $W_\Gamma = \left(\sum_l \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ |\boldsymbol{E}^{\mathrm{mes}}(\boldsymbol{o},l)|^2\right)^{-1}$. Afin d'alléger les notations, on définit un produit hermitien sur $X \in \{\Omega, \Gamma\}$ de deux champs scalaires f et g (resp. de deux champs de vecteurs $\boldsymbol{f}$ et $\boldsymbol{g}$) par $\langle f, g\rangle_X = \int_{\boldsymbol{r}'\in X} \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ f(\boldsymbol{r}')^* g(\boldsymbol{r}')$ (resp. par $\langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{g}\rangle_X = \int_{\boldsymbol{r}'\in X} \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ \boldsymbol{f}(\boldsymbol{r}')^* \cdot \boldsymbol{g}(\boldsymbol{r}')$) où l'étoile * correspond au complexe conjugué. Le produit hermitien induit une norme $\|f\|_X = \sqrt{\langle f, f\rangle_X}$. La fonction coût se réécrit

$$\mathcal{F}(\chi) \quad = \quad W_\Gamma \sum_l \left\| \boldsymbol{E}^{\mathrm{mes}}(\cdot, l) - \boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}}(\cdot, \chi, l) \right\|_\Gamma^2, \tag{2.3}$$

avec $W_\Gamma = \left(\sum_l \|\boldsymbol{E}^{\mathrm{mes}}(\cdot, l)\|_\Gamma^2\right)^{-1}$. Nous définissons également *le résidu de la fonction coût* $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{o}, l)$ (appelé plus simplement résidu) égal à $\boldsymbol{E}^{\mathrm{mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}}(\boldsymbol{o}, \chi, l)$.

La détermination de la permittivité de l'objet procède par la répétition d'un cycle composé de deux étapes : le calcul de l'erreur $\mathcal{F}(\chi)$ pour une estimation donnée de la permittivité $\varepsilon(\boldsymbol{r}) = \varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r}) + \chi(\boldsymbol{r})$ et la correction de $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ de sorte que $\mathcal{F}(\chi)$ décroisse.

2.3. Minimisation de la fonction coût

Nous avons ramené la détermination de la permittivité du milieu $\varepsilon(\boldsymbol{r}) = \varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r}) + \chi(\boldsymbol{r})$ à la minimisation de la fonction coût $\mathcal{F}(\chi)$ donnée par l'Eq. (2.2). Un grand nombre d'algorithmes de minimisation existe et ces derniers procèdent lorsque le modèle direct est non-linéaire par une recherche itérative d'une solution optimale : à partir d'une estimation initiale $\chi_0(\boldsymbol{r})$, le contraste de l'objet est corrigé de manière itérative selon la relation

$$\chi_{n+1}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \chi_n(\boldsymbol{r}) + \alpha g_\chi(\boldsymbol{r}), \tag{2.4}$$

où n est le numéro de l'itération, α est un réel négatif et $g_\chi(\boldsymbol{r})$ est le gradient de $\mathcal{F}$ calculé en χ_n défini par le développement de Taylor à l'ordre 1 autour de $\chi_n(\boldsymbol{r})$,

$$\mathcal{F}(\chi_n + \delta\chi) \quad = \quad \mathcal{F}(\chi_n) + 2\mathrm{Re} \int_{\boldsymbol{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' [g_\chi(\boldsymbol{r}')]^* \delta\chi(\boldsymbol{r}') + o(\delta\chi). \tag{2.5}$$

Cette définition du gradient de la fonction coût permet une relation commode avec le gradient d'une fonction coût qui est définie avec les variables réelles $\{\chi^{\mathrm{r}} = \mathrm{Re}\chi, \chi^{\mathrm{i}} = \mathrm{Im}\chi\}$ (annexe I). La modification de l'objet $\chi_n(\boldsymbol{r})$ selon la direction donnée par le gradient $g_\chi(\boldsymbol{r})$ assure localement une variation maximale de la fonction coût. La recherche de la solution est locale et itérative et suppose que la solution optimale n'est pas trop éloignée de l'estimation initiale. Des techniques d'imagerie simples (optique de Fourier, rétropropagation, DORT...) sont souvent utilisées pour initialiser la permittivité du milieu au début de la minimisation.

Dans la suite de cette section, nous allons donner une expression analytique simple et générale du gradient en explicitant le développement de Taylor de la fonction coût à l'ordre 1. Soit $\chi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon(\boldsymbol{r}) - \varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})$ le contraste de permittivité du milieu et $\delta\chi(\boldsymbol{r})$ une petite perturbation. Nous introduisons la dérivée de Fréchet du champ diffracté par rapport au contraste (aussi appelé opérateur de Fréchet), notée $\overline{\mathbf{D}}_\chi$, définie comme l'unique opérateur linéaire qui fournit la variation linéaire du champ

due à une perturbation $\delta\chi(\boldsymbol{r})$ autour du contraste de permittivité du milieu $\chi(\boldsymbol{r})$. Par définition, pour toute position d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ et toute illumination l,

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o}, \chi + \delta\chi, l) \;=\; \boldsymbol{E}(\boldsymbol{o}, \chi, l) + \int_{\boldsymbol{r}' \in \Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}', l)\delta\chi(\boldsymbol{r}') + o(\delta\chi). \tag{2.6}$$

Ainsi la fonction coût se linéarise,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\chi + \delta\chi) &= W_\Gamma \sum_l \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \left| \boldsymbol{E}^{\mathrm{mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}}(\boldsymbol{o}, \chi + \delta\chi, l) \right|^2, \\
&= W_\Gamma \sum_l \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \left| \boldsymbol{h}(\boldsymbol{o}, \chi, l) - \int_{\boldsymbol{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}', l)\delta\chi(\boldsymbol{r}') + o(\delta\chi) \right|^2, \\
&= \mathcal{F}(\chi) + W_\Gamma \sum_l \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \int_{\boldsymbol{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' (-2)\mathrm{Re}\left[\boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{o}, \chi, l) \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}', l)\delta\chi(\boldsymbol{r}')\right] \\
&+ o(\delta\chi), \\
&= \mathcal{F}(\chi) + 2\mathrm{Re} \int_{\boldsymbol{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \left[-W_\Gamma \sum_l \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; \boldsymbol{h}(\boldsymbol{o}, \chi, l) \cdot \overline{\mathbf{D}}^*_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}', l) \right]^* \delta\chi(\boldsymbol{r}') \\
&+ o(\delta\chi),
\end{aligned}$$

où nous rappelons que $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{o}, \chi, l)$ est le résidu de la fonction coût.

En comparant ce résultat avec l'Eq. (2.5), on a pour tout $\boldsymbol{r} \in \Omega$ l'expression générale du gradient

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) \;=\; -W_\Gamma \sum_l \int_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; \boldsymbol{h}(\boldsymbol{o}, \chi, l) \cdot \overline{\mathbf{D}}^*_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}, l). \tag{2.7}$$

Le calcul de $g_\chi(\boldsymbol{r})$ nécessite d'expliciter analytiquement l'opérateur de Fréchet $\overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}, l)$. Nous allons donner dans la section suivante son expression par trois méthodes analytiques différentes : par différentiation directe, par une approche variationnelle et par l'utilisation du théorème de réciprocité de Lorentz. Par cette dernière méthode, nous montrerons que le gradient s'exprime

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) \;=\; -W_\Gamma \sum_l \left[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \chi, l) \cdot \boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s}^1, l\Big) \right]^*, \tag{2.8}$$

où $\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s}^1, l\Big)$ pour tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$ est *le champ adjoint* et qui vérifie le problème de diffraction

$$\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s}^1, l\Big) \;=\; \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o})\boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{o}, \chi, l) + \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\; \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}', \chi, \boldsymbol{s}^1, l\Big).$$

Les détails de l'implémentation numérique de l'algorithme de minimisation, notamment le calcul du coefficient α de l'Eq. (2.4), sont donnés dans la section 2.6.7.

2.4. Calcul de l'opérateur de Fréchet

L'opérateur de Fréchet est l'opérateur qui lie la variation linéaire du champ diffracté à une perturbation $\delta\chi(\boldsymbol{r})$ autour d'un contraste donné $\chi(\boldsymbol{r})$. Il exprime la sensibilité du modèle de diffraction par rapport au paramètre d'intérêt et son expression analytique est nécessaire au calcul du gradient de la fonction coût (Eq. (2.7)).

2.4.1. Définitions et notation des opérateurs

Soit une distribution de polarisation $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}) = \chi(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ définie en tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$ du domaine d'investigation. Nous définissons l'opérateur linéaire $\overline{\mathbf{B}} : \Omega \to \Omega$ qui donne le champ électrique rayonné par $\boldsymbol{P}$ en tout point d'observation $\boldsymbol{r} \in \Omega$ et est défini par la formule

$$\left[\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{P}\right](\boldsymbol{r}) = \int_{\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \; \overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}'), \tag{2.9}$$

et l'opérateur linéaire $\overline{\mathbf{A}} : \Omega \to \Gamma$ qui donne le champ électrique rayonné par $\boldsymbol{P}$ en tout point d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ et est défini par la formule

$$\left[\overline{\mathbf{A}}\boldsymbol{P}\right](\boldsymbol{o}) = \int_{\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \; \overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}'). \tag{2.10}$$

Nous nous permettrons par la suite de ne pas écrire la position à laquelle les champs sont calculés lorsqu'elle est quelconque et que que cela n'introduit pas de sources de confusion possibles. Ainsi, le modèle de diffraction constitué des Eqs. (1.5) et (1.6) s'écrit symboliquement comme :

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}} + \overline{\mathbf{B}}\chi\boldsymbol{E}, \tag{2.11}$$

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}} = \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}, \tag{2.12}$$

où $\overline{\mathbf{B}}\chi\boldsymbol{E} = \overline{\mathbf{B}}[\chi\boldsymbol{E}]$ avec $[\chi\boldsymbol{E}](\boldsymbol{r}) = \chi(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ pour tout $\boldsymbol{r} \in \Omega$. Nous notons de suite que les opérateurs $\overline{\mathbf{B}}$ et $\overline{\mathbf{A}}$ ne dépendent pas de l'onde incidente, ni de l'objet.

2.4.2. Différentiation directe du modèle de diffraction

Dans cette section, nous allons exprimer la dérivée de Fréchet $\overline{\mathbf{D}}_{\chi}$ définie par

$$\delta\boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}} = \overline{\mathbf{D}}_{\chi}\delta\chi + o(\delta\chi), \tag{2.13}$$

en linéarisant les Eqs. (2.11) et (2.12) par rapport à χ ; les grandeurs $\overline{\mathbf{A}}$, $\overline{\mathbf{B}}$ et $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}$ étant fixes dans ce processus.

En différenciant l'équation de champ proche (Eq. (2.11)), la variation du champ à l'intérieur du domaine d'investigation s'écrit

$$\delta\boldsymbol{E} = \overline{\mathbf{B}}\delta(\chi\boldsymbol{E}). \tag{2.14}$$

Ainsi, la variation de la polarisation est

$$\begin{aligned}\delta(\chi\boldsymbol{E}) &= \chi\delta\boldsymbol{E} + (\delta\chi)\boldsymbol{E},\\ &= \chi[\overline{\mathbf{B}}\delta(\chi\boldsymbol{E})] + (\delta\chi)\boldsymbol{E}.\end{aligned}$$

Nous introduisons l'opérateur $\mathbf{1} - \chi\overline{\mathbf{B}}$ qui pour toute distribution de sources $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r})$ donne la distribution de sources $\left[[\mathbf{1} - \chi\overline{\mathbf{B}}]\boldsymbol{p}\right](\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}) - \chi(\boldsymbol{r}) \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}')$. Alors, sous réserve qu'il existe, l'opérateur inverse de $\mathbf{1} - \chi\overline{\mathbf{B}}$ noté $(\mathbf{1} - \chi\overline{\mathbf{B}})^{-1}$ permet d'exprimer la variation de polarisation $\delta(\chi\boldsymbol{E})$ en fonction de $\delta\chi$

$$\delta(\chi\boldsymbol{E}) = (\mathbf{1} - \chi\overline{\mathbf{B}})^{-1}[(\delta\chi)\boldsymbol{E}]. \tag{2.15}$$

En différenciant l'équation de champ lointain (Eq. (2.12)), la variation du champ diffracté $\delta\boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}}$ dans le domaine des mesures s'obtient en faisant rayonner la variation de polarisation $\delta(\chi\boldsymbol{E})$

$$\delta\boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}} = \overline{\mathbf{A}}\delta(\chi\boldsymbol{E}), \tag{2.16}$$

$$= \overline{\mathbf{A}}(\mathbf{1} - \chi\overline{\mathbf{B}})^{-1}[(\delta\chi)\boldsymbol{E}], \tag{2.17}$$

et l'opérateur de Fréchet s'obtient par identification avec Eq. (2.13)

$$\overline{\mathbf{D}}_\chi = \overline{\mathbf{A}}(\mathbf{1} - \chi\overline{\mathbf{B}})^{-1}\boldsymbol{E}. \tag{2.18}$$

2.4.3. Approche variationnelle

Dans cette section, nous allons donner une expression de l'opérateur de Fréchet par une approche variationnelle. Cette dernière consiste à minimiser une fonctionnelle, appelée *lagrangien*, dans un espace de paramètres plus grand que celui du problème initial. Le lagrangien s'écrit comme la somme d'un terme que l'on souhaite minimiser (différence entre les mesures et le modèle) et d'un terme qui représente les contraintes physiques du problème (les lois de la diffraction). Alors qu'il n'y avait qu'un seul paramètre à optimiser (le contraste de l'objet) dans l'approche par différentiation directe (section 2.4.2), l'approche variationnelle "relaxe" symboliquement les relations algébriques entre les grandeurs physiques (le contraste et le champ deviennent indépendants), mais réintroduit les dépendances par le biais du terme de contrainte. Dans la suite, nous désignons par $\overline{\mathbf{A}}^\dagger$ l'opérateur adjoint de $\overline{\mathbf{A}}$ (annexe A.3).

Nous définissons le lagrangien suivant

$$\mathcal{L}(\chi, \chi^*, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}^*, \boldsymbol{v}^*) = \mathcal{F}(\chi, \boldsymbol{E}) - \langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{C}\rangle_\Omega\,, \tag{2.19}$$

où $\mathcal{F}\Big(\chi, \chi^*, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}^*\Big) = \left\|\boldsymbol{E}^{\mathrm{mes}} - \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}\right\|_\Gamma^2$ est la fonction coût du problème initial que l'on souhaite minimiser ; $\boldsymbol{C}(\chi, \boldsymbol{E}) = \boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}} - \overline{\mathbf{B}}\chi\boldsymbol{E}$ est une contrainte du problème ; et $\boldsymbol{v}$ est une variable arbitraire appelée *multiplicateur de Lagrange*. Pour simplifier les calculs, nous ne considérons qu'une seule illumination. Les raisonnements qui vont suivre s'étendent sans difficulté à N illuminations en introduisant dans le lagrangien $2N$ champs indépendants $\{\boldsymbol{E}(l), \boldsymbol{E}^*(l)\}_{l=1,N}$ et en écrivant la fonction coût sous la forme

$\mathcal{F}\Big(\chi, \chi^*, \boldsymbol{E}(1), \boldsymbol{E}(1)^*, \ldots, \boldsymbol{E}(N), \boldsymbol{E}(N)^*\Big) = \sum_{l=1}^{N} \Big\|\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(l) - \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}(l)\Big\|_{\Gamma}^{2}$. On rappelle que $\chi^*(\boldsymbol{r})$ (resp. $\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{r})$) est la variable complexe conjuguée de $\chi(\boldsymbol{r})$ (resp. $\boldsymbol{E}$). Les six variables du lagrangien sont toutes indépendantes entre elles. A première vue, on pourrait penser que le lagrangien est indépendant des variables χ^*, $\boldsymbol{E}^*$ et $\boldsymbol{v}^*$ mais il faut garder à l'esprit la définition du produit scalaire $\langle f, g\rangle_X = \int_X \mathrm{d}x f^*(x) g(x)$ avec $X \in \{\Omega, \Gamma\}$. Par exemple, la fonction coût

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\chi, \chi^*, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}^*) &= \Big\|\boldsymbol{E}^{\text{mes}} - \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}\Big\|_{\Gamma}^{2}, \\
&= \int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\Big[\boldsymbol{E}^{\text{mes}*}(\boldsymbol{o}) - \overline{\mathbf{A}}^*\chi^*\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{o})\Big] \cdot \Big[\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}) - \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o})\Big],
\end{aligned}$$

dépend explicitement de χ^* et $\boldsymbol{E}^*$. Les différentiations par rapport à χ, $\boldsymbol{E}$, et $\boldsymbol{v}$ s'appliquent sur les membres de droite des produits scalaires tandis que celles sur leurs variables conjuguées complexes s'appliquent sur les membres de gauche des produits scalaires.

Pour satisfaire les équations de Maxwell, nous avons

$$\boldsymbol{C}(\chi, \boldsymbol{E}) = \mathbf{0}, \tag{2.20}$$

pour tout χ et $\boldsymbol{E}$ qui est équivalent à la condition $\partial_{\boldsymbol{v}^*}\mathcal{L} = 0$.

La démarche que nous allons utiliser pour calculer le gradient g_χ de la fonction coût $\mathcal{F}$ s'apparente à la méthode des caractéristiques, habituellement utilisée pour résoudre des équations aux dérivées partielles. Dans un premier temps, nous allons calculer les dérivées partielles du lagrangien. Puis dans un second temps, nous allons nous placer le long de lignes caractéristiques sur lesquelles le lagrangien ne dépend que de χ, c'est-à-dire sur lesquelles les dérivées partielles $\partial_{\chi^*}\mathcal{L}$, $\partial_{\boldsymbol{E}}\mathcal{L}$, $\partial_{\boldsymbol{E}^*}\mathcal{L}$ sont nulles. Dans ces conditions, on aura $g_\chi = \partial_\chi\mathcal{L}$ ce qui fournira l'expression du gradient.

Par commodité, on rappelle l'expression développée du lagrangien

$$\mathcal{L}(\chi, \chi^*, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}^*, \boldsymbol{v}^*) = \Big\langle \boldsymbol{E}^{\text{mes}} - \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}^{\text{mes}} - \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}\Big\rangle + \Big\langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}^{\text{ref}} - \overline{\mathbf{B}}\chi\boldsymbol{E}\Big\rangle \tag{2.21}$$

En posant le résidu de la fonction coût $\boldsymbol{h} = \boldsymbol{E}^{\text{mes}} - \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}$, la dérivée partielle du lagrangien par rapport à χ est

$$\begin{aligned}
\langle \partial_{\boldsymbol{\chi}}\mathcal{L}, \delta\chi\rangle_\Omega &= \Big\langle \boldsymbol{h}, -\overline{\mathbf{A}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}\Big\rangle_\Gamma + \Big\langle \boldsymbol{v}, -\overline{\mathbf{B}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}\Big\rangle_\Omega, \\
&= \Big\langle \boldsymbol{h}, -\overline{\mathbf{A}}\boldsymbol{E}(\delta\chi)\Big\rangle_\Gamma + \Big\langle \boldsymbol{v}, -\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{E}(\delta\chi)\Big\rangle_\Omega, \\
&= \Big\langle -\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\boldsymbol{h}, \delta\chi\Big\rangle + \Big\langle -\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{B}}^\dagger\boldsymbol{v}, \delta\chi\Big\rangle_\Omega.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

La dérivée partielle du lagrangien par rapport à $\boldsymbol{E}$ est égale à

$$\begin{aligned}
\langle \partial_{\boldsymbol{E}}\mathcal{L}, \delta\boldsymbol{E}\rangle_\Omega &= \Big\langle \boldsymbol{h}, -\overline{\mathbf{A}}\chi\delta\boldsymbol{E}\Big\rangle_\Gamma + \Big\langle \boldsymbol{v}, \delta\boldsymbol{E} - \overline{\mathbf{B}}\chi\delta\boldsymbol{E}\Big\rangle_\Omega, \\
&= \Big\langle -\chi^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\boldsymbol{h}, \delta\boldsymbol{E}\Big\rangle_\Omega + \Big\langle (\mathbf{1} - \overline{\mathbf{B}}\chi)^\dagger\boldsymbol{v}, \delta\boldsymbol{E}\Big\rangle_\Omega,
\end{aligned}$$

et doit être nulle quelque soit la perturbation $\delta\boldsymbol{E}$. Ainsi on obtient le *problème adjoint* que doit vérifier le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{v}$: $-\chi^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\boldsymbol{h} + (\mathbf{1} - \overline{\mathbf{B}}\chi)^\dagger\boldsymbol{v} = \mathbf{0}$. On

en déduit que

$$\boldsymbol{v} \;=\; (\mathbf{1}-\chi^*\overline{\mathbf{B}}^\dagger)^{-1}\chi^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\boldsymbol{h}. \tag{2.23}$$

Sur les lignes caractéristiques telles que le lagrangien ne dépend que de χ, en utilisant les Eqs. (2.22) et (2.23), le gradient de la fonction coût est égal à

$$\begin{aligned}
g_\chi &= \partial_\chi\mathcal{L}\\
&= -\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\boldsymbol{h}-\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{B}}^\dagger\boldsymbol{v},\\
&= -\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\boldsymbol{h}-\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{B}}^\dagger\left[(\mathbf{1}-\chi^*\overline{\mathbf{B}}^\dagger)^{-1}\chi^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\boldsymbol{h}\right],\\
&= \left[-\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger-\boldsymbol{E}^*\overline{\mathbf{B}}^\dagger(\mathbf{1}-\chi^*\overline{\mathbf{B}}^\dagger)^{-1}\chi^*\overline{\mathbf{A}}^\dagger\right]\boldsymbol{h},\\
&= -\left[\overline{\mathbf{A}}\boldsymbol{E}+\overline{\mathbf{A}}\chi(\mathbf{1}-\overline{\mathbf{B}}\chi)^{-1}\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{E}\right]^\dagger\boldsymbol{h},\\
&= -\overline{\mathbf{D}}_\chi^\dagger\boldsymbol{h},
\end{aligned} \tag{2.24}$$

avec

$$\overline{\mathbf{D}}_\chi = \overline{\mathbf{A}}\boldsymbol{E}+\overline{\mathbf{A}}\chi(\mathbf{1}-\overline{\mathbf{B}}\chi)^{-1}\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{E}. \tag{2.25}$$

L'équation (2.24) correspond exactement à l'expression du gradient de la fonction coût obtenue à Eq. (2.7). Remarquons dans notre démonstration que nous n'avons pas eu à exploiter la nullité de la dérivée partielle du lagrangien par rapport à $\boldsymbol{E}^*$.

2.4.4. Calcul du gradient par le théorème de réciprocité de Lorentz

Considérons la configuration typique en tomographie où un milieu de contraste $\chi(\boldsymbol{r})$ est éclairé par une illumination l. Nous cherchons à déterminer la variation du champ électrique en un point d'observation $\boldsymbol{o}$ due à une perturbation $\delta\chi(\boldsymbol{r})$. En notant $\overline{\boldsymbol{G}}$ la fonction de Green associée au milieu en l'absence de la perturbation $\delta\chi$, on a vu que le champ électrique peut s'écrire (section 1.2)

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},\chi+\delta\chi,l) \;=\; \boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},\chi,l)+k_0^2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\delta\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\chi+\delta\chi,l).$$

Positionnons un dipôle $\boldsymbol{p}$ au point $\boldsymbol{o}$. En utilisant le théorème de réciprocité (annexe D), la variation du champ $\delta\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},\chi,l)=\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},\chi+\delta\chi,l)-\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},\chi,l)$ est égale à

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{p}\cdot\delta\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},\chi,l) &= k_0^2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\boldsymbol{p}\cdot\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\Big[\delta\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\chi+\delta\chi,l)\Big],\\
&= k_0^2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\Big[\delta\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\chi+\delta\chi,l)\Big]\cdot\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{o})\boldsymbol{p},\\
&= k_0^2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\delta\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\chi+\delta\chi,l)\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\chi,\boldsymbol{o}),
\end{aligned} \tag{2.26}$$

où $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\chi,\boldsymbol{o})=\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{o})\boldsymbol{p}$ est le champ rayonné au point $\boldsymbol{r}'$ en l'absence de la perturbation par le dipôle $\boldsymbol{p}$ placé au point $\boldsymbol{o}$.

L'identification de la variation linéaire par rapport à $\delta\chi(\boldsymbol{r})$ dans l'expression précédente donne l'expression de l'opérateur de Fréchet

$$\boldsymbol{p}\cdot\overline{\mathbf{D}}_{\chi}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r},l) \quad = \quad \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,l)\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,\boldsymbol{o}). \tag{2.27}$$

L'opérateur de Fréchet s'exprime comme le produit scalaire de deux champs : le champ $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,l)$ qui intervient naturellement dans le calcul du problème direct et du champ $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,\boldsymbol{o})$ que nous appellerons *champ adjoint* et qui est associé à un problème direct adjoint où les sources sont au niveau des observations. La démonstration que nous avons réalisée pour obtenir l'expression de l'opérateur de Fréchet s'étend sans difficulté aux milieux anisotropes[28]. Il suffit pour cela de représenter la permittivité du milieu par un tenseur $\overline{\varepsilon}(\boldsymbol{r})$. Afin que le théorème de réciprocité de Lorentz reste valide, le milieu doit être réciproque, c'est-à-dire qu'en tout point $\boldsymbol{r}$ de l'espace, la permittivité doit satisfaire la relation $\overline{\varepsilon}(\boldsymbol{r})^T = \overline{\varepsilon}(\boldsymbol{r})$, où $\cdot^T$ est l'opération de transposition. Dans ce cas, l'expression de l'opérateur de Fréchet pour un milieu anisotrope est

$$\overline{\mathbf{D}}_{\overline{\chi}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r},l)\delta\overline{\chi}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \Big[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\overline{\chi},\boldsymbol{o})\otimes\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\overline{\chi},l)\Big] : \delta\overline{\chi}(\boldsymbol{r}), \tag{2.28}$$

où $\otimes$ est le produit tensoriel entre deux vecteurs et " :" est le produit de Frobenius défini pour deux matrices a et b quelconques par $a : b = \sum_{ij} a_{ij}b_{ij}$.

2.4.5. Équivalences des différentes expressions de l'opérateur de Fréchet

Dans les sections 2.4.2, 2.4.3 et 2.4.4, nous avons obtenu trois expressions de l'opérateur de Fréchet. Par unicité de la différentielle d'un opérateur en un point, on peut affirmer qu'elles sont toutes égales. Toutefois, leur expressions étant très différentes, nous allons établir explicitement leur égalité.

Dans la démonstration par différentiation directe (section 2.4.2), l'Eq. (2.14) fournit $\delta\boldsymbol{E} = \overline{\mathbf{B}}\,(\delta\chi)\,\boldsymbol{E}+\overline{\mathbf{B}}\chi\,(\delta\boldsymbol{E})$ d'où $\delta\boldsymbol{E} = \left(\mathbf{1}-\overline{\mathbf{B}}\chi\right)^{-1}\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{E}\delta\chi$. La variation linéaire du champ diffracté (Eq. (2.16)) est $\delta\boldsymbol{E}^{\text{scat}} = \overline{\mathbf{A}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}+\overline{\mathbf{A}}\chi(\delta\boldsymbol{E}) = \left[\overline{\mathbf{A}}\boldsymbol{E}+\overline{\mathbf{A}}\chi\left(\mathbf{1}-\overline{\mathbf{B}}\chi\right)^{-1}\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{E}\right]\delta\chi$. Ainsi, la méthode par différentiation directe retrouve Eq. (2.25) et on a

$$\overline{\mathbf{D}}_{\chi} = \overline{\mathbf{A}}\boldsymbol{E}+\overline{\mathbf{A}}\chi\left(\mathbf{1}-\overline{\mathbf{B}}\chi\right)^{-1}\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{E} = \overline{\mathbf{A}}(\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}})^{-1}\boldsymbol{E}. \tag{2.29}$$

Par ailleurs, on a (Eq (2.7)) $g_{\chi} = -\overline{\mathbf{D}}_{\chi}^{\dagger}\boldsymbol{h}$. En injectant l'expression de l'opérateur de Fréchet obtenu par différentiation directe (Eq. (2.18)), on a $g_{\chi} = -\left[\overline{\mathbf{A}}(\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}})^{-1}\boldsymbol{E}\right]^{\dagger}\boldsymbol{h} = -\boldsymbol{E}^{*}\cdot\left(\left[\left(\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}}\right)^{-1}\overline{\mathbf{A}}^{t}\right]\boldsymbol{h}^{*}\right)^{*}$ [i ii]. La séquence de calcul $\boldsymbol{h}^{*}\rightarrow\overline{\mathbf{A}}^{t}\boldsymbol{h}^{*}\rightarrow\left[\left(\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}}\right)^{-1}\right](\overline{\mathbf{A}}^{t}\boldsymbol{h}^{*})$

i. Il faut se souvenir que calculer $X^{\dagger}$ est équivalent à complexe conjuguer et transposer X (annexe A.3).

ii. A cause du théorème de réciprocité de Lorentz, $\overline{\mathbf{B}}^{t} = \overline{\mathbf{B}}$. Cette relation est également vraie pour le noyau de $\overline{\mathbf{A}}$ mais la transposition est laissée pour insister sur le fait que $\overline{\mathbf{A}}^{t} : \Gamma\rightarrow\Omega$ prend des sources dans le domaine des observations et rayonne un champ dans le domaine d'investigation.

correspond à calculer à partir de sources $\boldsymbol{h}^*$ placées au niveau des observations un champ incident adjoint $\overline{\mathbf{A}}^t\boldsymbol{h}^*$, puis à résoudre un problème direct par application de l'opérateur $\left(\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}}\right)^{-1}$ [iii]. Ainsi $\left[\left(\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}}\right)^{-1}\overline{\mathbf{A}}^t\right]\boldsymbol{h}^*$ s'identifie avec le champ adjoint de l'Eq. (2.27) et les expressions de l'opérateur de Fréchet données par différentiation directe et par le théorème de réciprocité (Eqs (2.18) et (2.27)) sont équivalentes.

2.4.6. Discussion sur les différentes méthodes pour obtenir l'opérateur de Fréchet

Le choix de l'expression de l'opérateur de Fréchet influe sur le calcul pratique du gradient dans les algorithmes itératifs. Nous rappelons que seul le gradient est calculé en pratique dans les algorithmes itératifs (Eq. (2.7)) ; le calcul et le stockage du noyau de l'opérateur de Fréchet étant trop coûteux.

Une expression de l'opérateur de Fréchet a été explicitée pour un problème de diffraction en acoustique en 1999 dans un article de S. J. Norton[23]. Ce dernier a utilisé la méthode de l'adjoint et une approche variationnelle pour une formulation forte de l'équation d'onde et une méthode intégrale pour une formulation faible de l'équation d'onde. Cependant, Norton obtient à chaque fois la même expression de l'opérateur de Fréchet par les trois méthodes citées, à savoir l'expression fournie par le théorème de réciprocité (Eq. 2.27). L'obtention de différentes expressions de l'opérateur de Fréchet (sections 2.4.2, 2.4.3 et 2.4.4) et la démonstration de leur équivalence (section 2.4.5) permet d'apporter une unification dans les différentes techniques itératives rencontrées dans la littérature. Pour calculer le gradient, certains utilisent l'expression de l'opérateur de Fréchet donnée par Eq. (2.18)[13], d'autres utilisent Eq. (2.25) [27, 25], et d'autres utilisent Eq. (2.27)[3].

La méthode par différentiation directe est simple à comprendre et fournit une méthode directe pour calculer le gradient par résolutions successives de systèmes linéaires. L'approche variationnelle est puissante car elle permet d'obtenir systématiquement le problème adjoint vérifié par le multiplicateur de Lagrange, où les sources sont placées au niveau des observations. En adaptant le terme de contrainte, l'approche variationnelle est par ailleurs facilement transposable à des phénomènes physiques différents. La démonstration utilisant le théorème de réciprocité est la seule qui fournit la variation totale du champ par rapport à une perturbation de la permittivité du milieu (Eq. (2.26)) et peut ainsi donner les variations du champ à des ordres supérieurs. Par ailleurs, elle ne fait intervenir que des grandeurs physiques et n'impose pas une formulation faible du problème direct. Ainsi, le calcul du gradient peut être effectué avec n'importe quel solveur des équations de Maxwell[15] (intégral volumique, éléments finis...) ou bien par des techniques de diffraction approchées (approximation de Born, méthode de la beam-propagation[20]...).

iii. L'Eq. (2.11) s'écrit aussi $\boldsymbol{E}=\left[\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}}\right]^{-1}\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}$. L'opérateur $\left[\mathbf{1}-\chi\overline{\mathbf{B}}\right]^{-1}$ transforme $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}$ en $\boldsymbol{E}$ et correspond bien à la résolution d'un problème direct.

2.5. Étude de la minimisation de la fonction coût sous l'approximation de Born

2.5.1. Relation entre la rétropropagation et le gradient de la fonction coût

Dans ce chapitre, nous allons montrer qu'en initialisant à zéro le contraste de l'objet χ dans le domaine d'investigation, l'itération suivante donne une permittivité proportionnelle à celle donnée par la rétropropagation (section 1.4.2), aux variations près de l'intensité du champ de référence.

En initialisant le contraste du milieu à zéro, l'itération 1 donne le contraste

$$\chi_1(\boldsymbol{r}) = 0 + \alpha g_\chi|_{\chi=0}(\boldsymbol{r}),$$

avec α réel et $g_\chi|_{\chi=0}$ est le gradient de la fonctionnelle $\mathcal{F}(\chi) = W_\Gamma \left\| \boldsymbol{E}^{\text{mes}} - \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\chi) \right\|_\Gamma^2$ au point $\chi = 0$. Le gradient en χ s'écrit (section 2.3)

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) \;=\; W_\Gamma \sum_l \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; \boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{r}, l) \cdot \Big[\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{o}, \chi, l)\Big)\Big]^*, \tag{2.30}$$

où $\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{o}, \chi, l)\Big)$ est le champ généré par une source $\boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{o}, \chi, l) = \Big[\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o}, \chi, l)\Big]$ située au point $\boldsymbol{o}$. Sous l'approximation de Born et en prenant $\chi = 0$, $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, l) = \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)$ et $\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{h}^*(\boldsymbol{o}, 0, l)\Big) = \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o})\,[[\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l)]^* - \boldsymbol{0}]$, d'où le résultat

$$g_\chi|_{\chi=0}(\boldsymbol{r}) \;=\; W_\Gamma \sum_l \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l) \cdot \overline{\boldsymbol{G}}^*(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o}) \boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l). \tag{2.31}$$

En tomographie, les illuminations seront des ondes planes dont les amplitudes peuvent être choisies de sorte que $|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)|^2 = 1$ pour tout $\boldsymbol{r} \in \Omega$ et toute illumination l. En comparant $g_\chi|_{\chi=0}(\boldsymbol{r})$ avec l'Eq. (1.15), on a

$$\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r}) \;=\; \frac{\gamma}{W_\Gamma} g_\chi|_{\chi=0}(\boldsymbol{r}), \tag{2.32}$$

qui montre que l'estimation fournie par la rétropropagation est proportionnelle au gradient calculé pour une initialisation nulle du contraste de l'objet. Outre son intérêt pratique pour obtenir une estimation initiale de $\chi(\boldsymbol{r})$ lors de l'initialisation des algorithmes itératifs, ce résultat permet inversement d'interpréter le gradient de la fonctionnelle coût sur champs diffractés à l'aide de la rétropropagation. Puisque $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{o}, \chi, l) = \boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o}, \chi, l)$, on a sous l'approximation de Born pour une estimation arbitraire $\chi(\boldsymbol{r})$,

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) = \frac{W_\Gamma}{\gamma} \Big[\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r}) - \tilde{\chi}^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})\Big], \tag{2.33}$$

où $\tilde{\chi}^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$ est le contraste donné par la rétropropagation des champs diffractés

estimés $\left\{\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o},\chi,l)\right\}_l$. L'équation (2.33) montre que sous l'approximation de Born, les fréquences spatiales acquises au cours des estimations successives du gradient sont bornées par l'OTF de la rétropropagation. Ainsi, les hautes fréquences spatiales reconstruites uniquement en présence de diffusion multiple sont dues au calcul rigoureux des champs qui interviennent dans l'Eq. (2.30).

2.5.2. Caractérisation de la solution fournie par l'algorithme itératif sous l'approximation de Born

Dans cette section, nous allons complètement caractériser la solution fournie par l'algorithme itératif qui consiste à minimiser la fonction coût sur les champs diffractés à partir d'une estimation nulle du contraste de l'objet. Nous verrons qu'elle est intimement reliée à l'opérateur de rétropropagation K introduit dans l'annexe E.

Nous utilisons l'approche utilisée par Landweber[18]. Pour résoudre une intégrale de Fredholm de première espèce, cette méthode consiste à exprimer la solution du problème comme une décomposition sur des fonctions propres de l'opérateur associé (ici l'opérateur de rétropropagation).

Premièrement, le champ diffracté sous l'approximation de Born est linéaire par rapport au contraste donc l'algorithme de descentes de gradient, conçu pour des systèmes linéaires, converge. Nous allons écrire la relation de récurrence qui lie deux estimations successives de la susceptibilité et en déduire la limite de cette suite.

Dans le cas le plus simple d'un algorithme de gradient simple à pas constant $\alpha = 1$, deux estimations successives du contraste $\chi_{n+1}(\boldsymbol{r})$ et $\chi_n(\boldsymbol{r})$ sont liées par la relation de récurrence,

$$\chi_{n+1}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \chi_n(\boldsymbol{r}) + g_{\chi,n}(\boldsymbol{r}), \tag{2.34}$$

où $g_{\chi,n}(\boldsymbol{r})$ est le gradient de la fonction coût donnée par l'Eq. (2.2) à l'estimation $\chi_n(\boldsymbol{r})$. Or, nous avons vu dans la section 2.5.1 que sous l'approximation de Born, le gradient est égal à

$$g_{\chi,n}(\boldsymbol{r}) = \frac{W_\Gamma}{\gamma} K\Big[\chi - \chi_n\Big](\boldsymbol{r}), \tag{2.35}$$

où K est l'opérateur de rétropropagation défini dans l'annexe E, $\chi(\boldsymbol{r})$ est le contraste exacte et W_Γ et γ sont deux réels strictement positifs. Soit la suite $(u_n)_{n\geq 1}$ définie par $u_n = \chi_n - \chi_{n-1}$, en écrivant Eq. (2.34) à l'itération n et $n+1$ puis en soustrayant ces deux équations membre à membre, nous obtenons

$$\begin{aligned} u_{n+1}(\boldsymbol{r}) &= u_n(\boldsymbol{r}) + g_{\chi,n}(\boldsymbol{r}) - g_{\chi,n-1}(\boldsymbol{r}), \\ &= \left[1 - \frac{W_\Gamma}{\gamma} K\right] u_n(\boldsymbol{r}). \end{aligned} \tag{2.36}$$

L'expression de l'opérateur K donnée par l'Eq. (E.2) montre qu'il est auto-adjoint, c'est à dire qu'il vérifie $K(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) = K^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ pour tout couple de points $\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}' \in \Omega$.

Ainsi d'après le théorème spectral [iv], K est diagonalisable dans une base orthonormée et toutes ses valeurs propres sont réelles. On suppose que $u_n(\boldsymbol{r})$ est une fonction propre de l'opérateur K associée à la valeur propre v (autrement, il suffit de décomposer $u_n(\boldsymbol{r})$ sur la base orthonormée qui diagonalise K et d'appliquer le raisonnement qui va suivre sur chacune des composantes de $u_n(\boldsymbol{r})$). Alors, la suite $(\{u_n\})_{n\geq 1}$ est une suite géométrique de raison réelle $\left(1-\frac{W_\Gamma}{\gamma}v\right)$ et $u_n(\boldsymbol{r}) = \left(1-\frac{W_\Gamma}{\gamma}v\right)^{n-1} u_1(\boldsymbol{r})$. La n-ième estimation du contraste est égal à

$$\begin{aligned}\chi_n(\boldsymbol{r}) &= \chi_0(\boldsymbol{r}) + \sum_{k=1}^{n} u_k(\boldsymbol{r}),\\ &= \chi_0(\boldsymbol{r}) + \frac{1-\left(1-\frac{W_\Gamma}{\gamma}v\right)^{n-1}}{1-\left(1-\frac{W_\Gamma}{\gamma}v\right)} u_1(\boldsymbol{r}). \end{aligned} \tag{2.37}$$

On sait que l'algorithme converge sous l'approximation de Born donc la raison de la suite géométrique $(\{u_n\})_{n\geq 1}$ est inférieure à 1 en valeur absolue, d'où la condition $0 < v < \frac{2\gamma}{W_\Gamma}$. En faisant tendre n vers l'infini dans l'Eq. (2.37), on en déduit que l'estimation fournie par l'algorithme itératif est $\chi_\infty(\boldsymbol{r}) = \chi_0(\boldsymbol{r}) + \frac{\gamma}{vW_\Gamma} u_1(\boldsymbol{r})$. Choisissons d'initialiser l'algorithme avec un contraste nul. Ainsi $\chi_0(\boldsymbol{r}) = 0$ et $u_1(\boldsymbol{r}) = \chi_1(\boldsymbol{r}) - 0 = 0 + g_{\chi,1}(\boldsymbol{r}) = \frac{W_\Gamma}{\gamma}\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$. Dans le cas général où $u_1(\boldsymbol{r})$ n'est pas une fonction propre de K, si $\{e_i(\boldsymbol{r})\}_{i\in I}$ est une base orthonormée de vecteurs propres de K et si l'on note v_i la valeur propre positive associée à la fonction propre $e_i(\boldsymbol{r})$, alors $\chi_\infty(\boldsymbol{r}) = \int_{i\in I} v_i^{-1} \langle e_i, \chi^{\text{retro}}\rangle_\Omega e_i(\boldsymbol{r})$. Puisque K est auto-adjoint, on a $\langle e_i, \chi^{\text{retro}}\rangle_\Omega = \langle e_i, K\chi\rangle_\Omega = \langle Ke_i, \chi\rangle_\Omega = v_i \langle e_i, \chi\rangle_\Omega$. Ainsi $\chi_\infty(\boldsymbol{r}) = \int_{i\in I} \langle e_i, \chi\rangle_\Omega e_i(\boldsymbol{r})$.

Introduisons l'opérateur de reconstruction associé à l'algorithme itératif, que l'on note Q, qui au contraste de l'objet exact $\chi(\boldsymbol{r})$ associe le contraste reconstruit $\chi_\infty(\boldsymbol{r})$. On a

$$\chi_\infty(\boldsymbol{r}) = \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\, Q(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}'),$$

avec le noyau

$$Q(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \int_{i\in I} \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\, e_i(\boldsymbol{r}) e_i^*(\boldsymbol{r}'). \tag{2.38}$$

Nous avons complètement caractérisé la solution fournie par l'algorithme itératif. On note que le noyau de l'opérateur de reconstruction Q est principalement défini par les valeurs propres et les fonctions propres de l'opérateur de rétropropagation K. L'étude de ce dernier est donc cruciale afin de trouver des conditions d'imagerie favorables pour la reconstruction de l'objet.

iv. Le théorème spectral est directement applicable dans le cas de la dimension finie (quand Ω est discrétisé). Dans le cas de la dimension infinie, il faut vérifier que $K : \mathcal{L}^2(\Omega) \to \mathcal{L}^2(\Omega)$ est un opérateur compact, ce que nous supposons.

2.6. Implémentation de l'algorithme

Le schéma de l'algorithme de reconstruction (sections 2.2 et 2.3) estime itérativement une distribution de permittivité dans un domaine d'investigation donné de manière à minimiser l'erreur entre les mesures et le modèle direct. Dans cette section, je vais détailler l'implémentation de l'algorithme que j'ai programmé pour reconstruire des objets.

2.6.1. Informations générales

L'algorithme itératif a été programmé en FORTRAN. FORTRAN est un langage compilé très adapté pour manipuler des matrices de grandes dimensions. Il dispose de compilateurs très performants (intel, gcc...) pour produire à partir des fichiers sources des exécutables optimisés. De plus, un grand nombre de bibliothèques numériques de qualité, de licences commerciales ou libres, existent pour manipuler des matrices de grandes dimensions. Le compilateur utilisé est GCC. Les nombreuses boucles pour parcourir des matrices ou réaliser des sommations sont parallélisées avec OPENMP, permettant de distribuer le travail sur les différents processeurs de l'ordinateur. Les transformées de Fourier sont calculées avec la bibliothèque FFTW et sont également parallélisées.

Le microscope est modélisé par la juxtaposition de deux lentilles : un objectif d'ouverture numérique NA^{obs} qui forme l'image à l'infini d'un objet dans le plan focal de l'objectif, et une lentille de tube qui rapporte l'image fournie par l'objectif dans le plan image du microscope. On place dans ce dernier une caméra qui est donc conjugué optiquement avec le plan focal objet du microscope. Le demi-espace partant de l'entrée de l'objectif vers l'extérieur au microscope est *l'espace objet*. Le demi-espace partant de la sortie de la lentille de tube vers l'extérieur du microscope est *l'espace image* [Fig. 2.1], voir Ref. [16] pour plus de détails et pour disposer du code voir Ref. [6].

Le problème inverse fait intervenir principalement deux domaines : le domaine d'investigation Ω et le domaine des observations Γ. Le choix de la discrétisation de ces domaines conditionne la taille des matrices à déclarer. Dans le cas d'une matrice, j'indiquerai également son dimensionnement entre crochets.

2.6.2. Structure du programme

Au début du programme, le programme récupère dans un fichier texte les paramètres fournis par l'utilisateur qui définissent la configuration d'imagerie et les paramètres pour l'inversion.

Ensuite, le programme calcule et stocke des quantités qui resteront constantes jusqu'à la fin de son exécution :

— la définition du milieu de référence,
— la discrétisation du domaine d'investigation et le calcul de la permittivité exacte de l'objet dans le cas de mesures synthétiques,
— le calcul de la fonction de Green du milieu de référence dans les domaines d'investigation et d'observation,

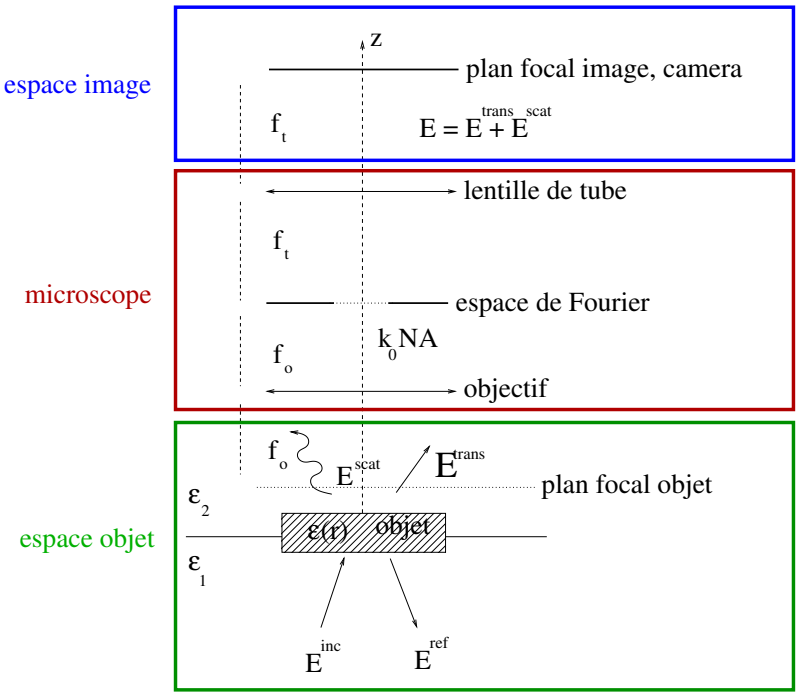

FIGURE 2.1. – Schéma du microscope implémenté dans le problème direct. Un champ incident $\boldsymbol{E}^{\text{inc}}$ éclaire un objet posé sur un substrat. La différence de permittivité entre les milieux ε_1 et ε_2 donne naissance à des champs spéculaires réfléchi $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}$ et transmis $\boldsymbol{E}^{\text{trans}}$. Sous illumination, l'objet rayonne un champ diffracté $\boldsymbol{E}^{\text{scat}}$. Le microscope est constitué d'un objectif de focale f_o et d'ouverture numérique NA, et d'une lentille de tube de focale f_t. Le microscope, ici en transmission, forme une image de l'objet dans le plan focal image du microscope, au niveau d'une caméra.

— le calcul du champ électrique de référence, c'est-à-dire du champ qui existe en l'absence de l'objet,
— l'initialisation du contraste dans le domaine d'investigation.

Le programme s'arrête après avoir effectué un nombre prédéfini d'itérations. Chaque itération peut être décomposée en deux grandes étapes : a) estimer la valeur de la fonction coût pour l'estimation courante du contraste et b) calculer la correction à appliquer à l'estimation courante pour diminuer la valeur de la fonction coût.

Le calcul de la valeur de la fonction coût consiste à résoudre le problème direct et nécessite dans cet ordre :

— le calcul du champ électrique en chaque point du domaine d'investigation,
— le calcul du champ diffracté lointain,
— le filtrage des fréquences spatiales par l'ouverture numérique de l'objectif,
— la prise en compte du grossissement du microscope,
— le calcul du champ électrique total dans le plan focal image du microscope.

Pour calculer la correction à appliquer à l'estimation courante, le programme effectue dans cet ordre :

— le calcul du gradient de la fonction coût pour l'estimation courante du contraste,

— la mise à jour des directions de descente pour la méthode du gradient conjugué,
— le calcul du coefficient de minimisation qui pondère la direction de descente,
— la mise à jour du contraste.

Des mesures synthétiques peuvent être générées en effectuant les étapes de calcul nécessaires au calcul de la fonction coût avec pour estimation courante le contraste de l'objet à reconstruire. Le champ électrique obtenu au niveau des observations peut être éventuellement bruité. Le coefficient de normalisation de la fonction coût est calculé à partir des mesures obtenues.

2.6.3. Définition du repère cartésien

Les grandeurs physiques qui dépendent de l'espace sont définies à partir d'un repère cartésien $(\mathrm{O}, \hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}, \hat{\boldsymbol{z}})$. L'origine du repère O est choisie sur l'axe optique du microscope et définit l'origine des phases, c'est-à-dire que l'amplitude complexe d'une onde plane incidente y vaut 1. Je supposerai par la suite que le plan focal objet du microscope passe par O et je préciserai systématiquement sa position lorsque cela ne sera pas le cas.

2.6.4. Définition du milieu de référence, calcul de sa fonction de Green et calcul du champ électrique dans le domaine d'investigation

Le programme est conçu pour traiter un milieu de référence stratifié, dont les couches sont orthogonales à l'axe optique du microscope. Le calcul de la fonction de Green d'un milieu stratifié est complexe [24] et est réalisé par une routine personnelle de P. Chaumet. Le calcul du champ électrique en chaque point du domaine d'investigation est donné par l'Eq. (1.5) que nous rappelons

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, l) \quad = \quad \boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r}, l) + k_0^2 \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \; \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}', l), \tag{2.39}$$

De nombreuses méthodes numériques existent pour calculer le champ diffracté par un objet[15]. Le calcul de l'Eq. (2.39) est effectué par la méthode *discrete dipole approximation* (DDA)[7, 8], équivalente à *la méthode des moments*[17]), introduite en 1973 par Purcell et Pennypacker pour le calcul de la diffusion de la lumière par les poussières des milieux interstellaires[26]. Cette méthode consiste à assimiler le rayonnement de la matière à celui d'un ensemble de dipôles. Le domaine englobant l'objet est subdivisé en cubes suffisamment petits pour supposer les grandeurs intervenant dans les intégrales des Eqs. (2.40) constantes à l'intérieur de chacun des cubes. Le calcul du champ électrique est obtenu en résolvant le système d'équations linéaires par rapport aux $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_i, l)$ au niveau du centre de chaque cube $\boldsymbol{r}_i \in \Omega$ et pour chaque illumination l

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_i, l) \quad = \quad \boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r}_i, l) + k_0^2 V \sum_{\boldsymbol{r}_j \in \Omega} \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j)\chi(\boldsymbol{r}_j)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_j, l),$$

où $\boldsymbol{r}_j \in \Omega$ sont les positions des centres des cubes, V est le volume d'un cube

élémentaire. Dans le cas $\boldsymbol{r}_j = \boldsymbol{r}_i$, la singularité de la fonction de Green est intégrable sur le cube de centre $\boldsymbol{r}_i$ et l'on prend $\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_i) = \frac{1}{V}\int_{\boldsymbol{r}'} \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}')$ égal en tenant compte de la réaction de rayonnement à $-\frac{1}{3\varepsilon(\boldsymbol{r}_i)} + \frac{2}{3}i\frac{k_0^3(\boldsymbol{r}_i)V}{4\pi}$ avec $\varepsilon(\boldsymbol{r}_i)$ la permittivité du milieu en l'absence de l'objet et $k(\boldsymbol{r}_i)$ le nombre d'onde dans le milieu de référence au point $\boldsymbol{r}_i$ [5, 17]. Par ailleurs, le milieu de référence $\varepsilon^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r})$ qui décrit le système d'imagerie en l'absence de l'objet est généralement invariant par translation selon des directions orthogonales à l'axe optique et la fonction de Green a une structure de convolution pour ses variables transverses. Cela a deux conséquences importantes : a) le nombre de valeurs de la fonction de Green à stocker est considérablement réduit et b) les intégrales présentes dans l'Eq. (2.39) sont des convolutions selon les directions transverses à l'axe optique et se calculent rapidement à l'aide de transformée de Fourier discrète[12].

De nombreuses méthodes numériques sont dédiées à la résolution de systèmes linéaires (pivot de Gauss, décomposition LU...). Nous utilisons une méthode de gradient biconjuguée [4] particulièrement adaptée pour des systèmes linéaires ayant un grand nombre d'inconnues.

2.6.5. Position et discrétisation du domaine d'investigation

Le domaine d'investigation est le volume dans lequel l'algorithme itératif va estimer la permittivité du milieu. Il est défini de manière à contenir entièrement l'objet à reconstruire. Il s'agit d'une information *a priori* qui contraint la recherche d'une solution optimale par l'algorithme itératif. Dans le cas de la microscopie, les images de l'objet par le microscope permettent de déterminer avec une bonne précision la position et l'extension du support de l'objet. La définition de la position et des dimensions du domaine d'investigation ne présente pas en pratique de difficultés.

Le domaine d'investigation Ω est un pavé discrétisé en petits cubes élémentaires d'arête $\mathtt{a}$. Le nombre de cubes selon les axes $\hat{\boldsymbol{x}}$, $\hat{\boldsymbol{y}}$, $\hat{\boldsymbol{z}}$ est respectivement $\mathtt{nx}$, $\mathtt{ny}$, $\mathtt{nz}$, soit un total de $\mathtt{nx} \times \mathtt{ny} \times \mathtt{nz}$ éléments de discrétisation. Le choix du pas de discrétisation doit être choisi en fonction de la résolution que l'on peut espérer de la technique d'imagerie. En tomographie de diffraction, le pouvoir de résolution est de l'ordre de $\frac{\lambda}{2(NA^{\mathrm{illu}}+NA^{\mathrm{obs}})}$ où NA^{illu} et NA^{obs} sont respectivement les ouvertures numériques à l'illumination et à la détection. La possibilité d'injecter des informations *a priori* dans le processus de reconstruction permet d'envisager une résolution plus haute que la limite précédemment citée.

Le pas de discrétisation doit être suffisamment petit. En effet, la discrétisation du domaine d'investigation agit comme un filtre passe-bas sur les variations spatiales de l'objet et les fréquences spatiales reconstruites sont inférieures à $\frac{1}{\mathtt{a}}$. Par ailleurs, le pas de discrétisation doit être suffisamment petit pour décrire correctement les variations spatiales du champ électrique et on impose en pratique $\mathtt{a} < \frac{\lambda}{10n}$ où λ est la longueur d'onde d'illumination, et n est la valeur maximale de l'indice optique dans le milieu à imager.

Le pas de discrétisation ne doit cependant pas être choisi trop petit. Le temps de calcul du problème direct dépend du nombre de cubes élémentaires. La diminution du pas de discrétisation induit une augmentation cubique du nombre d'inconnues tandis que le nombre de mesures reste constant, ce qui peut rendre le problème inverse sousdéterminé. L'espace des solutions admissibles, défini comme l'ensemble

des solutions possibles du problème inverse, est agrandi ce qui rend la recherche d'une estimation optimale de la permittivité par l'algorithme itératif plus complexe.

2.6.6. Calcul du champ diffracté au travers du microscope et de la fonction de Green du microscope

Le champ électrique diffracté dans le plan focal image du microscope est donné en tout point d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ par l'Eq. (1.6) que nous rappelons

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o}, l) &= k_0^2 \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \, \overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}') \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}', l), \\ \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}', l) &= \chi(\boldsymbol{r}') \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}', l), \end{aligned} \tag{2.40}$$

où $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}', l)$ est la densité de polarisation induite dans l'objet par l'illumination l, et $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}$ est la fonction de Green du microscope.

Il est calculé en faisant rayonner la distribution de polarisation induite $\boldsymbol{P}$ en zone lointaine, dans l'espace de Fourier de l'objectif. L'objectif a une ouverture numérique NA qui coupe les fréquences spatiales dont le module est supérieure à $k_0 NA$. Le champ diffracté est décomposé sur une base d'ondes planes avant son entrée de l'objectif. Chaque onde plane intervenant dans sa décomposition subit une rotation $\overline{\boldsymbol{R}}$ de son vecteur d'onde à la traversée de l'objectif et de la lentille de tube[16]. En prenant la transformée de Fourier du champ filtré obtenu, on obtient le champ dans le plan focal image. Mathématiquement, on a

$$\begin{aligned} \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \, \overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}') \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}', l) &= \int_z \mathrm{d}z \mathrm{TF}_{2\mathrm{D}}^{-1} \Bigg[\overline{\boldsymbol{R}} \, \tilde{h}(\boldsymbol{k}_\parallel) \\ &\quad \frac{-1}{2i\pi\sqrt{k_0^2 - \left|\boldsymbol{k}_\parallel\right|^2}} \mathrm{TF}_{2\mathrm{D}} \Big[\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}'_\parallel + z\hat{\boldsymbol{z}}, l) \Big] (\boldsymbol{k}_\parallel + z\hat{\boldsymbol{z}}) \Bigg] (\boldsymbol{o}, l), \end{aligned}$$

où $\tilde{h}(\boldsymbol{k}_\parallel)$ est une fonction de coupure qui permet uniquement la transmission si le signal est dans l'ouverture numérique (NA) de la lentille objectif, c'est à dire $\tilde{h}(\boldsymbol{k}_\parallel) = 1$ pour $\mid \boldsymbol{k}_\parallel \mid < k_0 \mathrm{NA}$ et 0 sinon, et avec $\overline{\boldsymbol{R}}$ la matrice de rotation d'axe $\boldsymbol{u} = \frac{\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{z}}{|\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{z}|}$ et d'angle orienté $\theta = 2(\boldsymbol{k}, \hat{\boldsymbol{z}})$

Le champ diffracté est éventuellement bruité dans le plan focal image pour les simulations sur données synthétiques. A chaque fois, lorsque nous bruitons les données, une variable aléatoire réelle est ajoutée à la partie réelle et à la partie imaginaire de chaque composante du champ diffracté et pour chaque illumination. La statistique de la variable aléatoire est uniforme, de moyenne nulle et d'écart-type la différence entre la valeur maximale et la valeur minimale prise par la partie réelle ou imaginaire de la composante considérée du champ.

Pour calculer le champ diffracté au travers du microscope, il faut connaître la fonction de Green du microscope $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}$ qui correspond au champ électrique dans le plan focal image du microscope rayonné par une source ponctuelle. $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r})$ s'obtient à partir de l'Eq. (2.40) en posant $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}') = \frac{1}{k_0^2} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$. Le système imageur est invariant par translation dans les directions transverses et il suffit de calculer la

fonction de Green du microscope pour un seul dipôle $\boldsymbol{r}_{\parallel}^{0} + z\hat{\boldsymbol{z}}$ pour chaque cote z du domaine d'investigation. En effet pour tout point $\boldsymbol{r}_{\parallel} + z\hat{\boldsymbol{z}}$, on a $\overline{\boldsymbol{G}}\Big(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}_{\parallel} + z\hat{\boldsymbol{z}}\Big) = \overline{\boldsymbol{G}}\Big(\boldsymbol{o} - \boldsymbol{r}_{\parallel} + \boldsymbol{r}_{\parallel}^{0}, \boldsymbol{r}_{\parallel}^{0} + z\hat{\boldsymbol{z}}\Big)$. Cette astuce réduit considérablement le nombre de valeurs de la fonction de Green à stocker.

2.6.7. Implémentation numérique de l'algorithme de minimisation

Dans cette section, nous allons donner des précisions techniques sur l'implémentation de l'algorithme de minimisation dont le schéma itératif a été présenté à la section 2.3.

L'expression du gradient donnée par l'Eq. (2.7) est calculée en utilisant l'expression de l'opérateur de Fréchet donnée par l'Eq. (2.27), c'est-à-dire,

$$g_{\chi}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad -W_{\Gamma} \sum_{l} \left[\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, l\Big) \cdot \boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s}\Big) \right]^{*}, \tag{2.41}$$

où le champ $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s})$ vérifie le problème de diffraction adjoint

$$\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s}\Big) \quad = \quad \int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o}\, \overline{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{mic}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o}) \boldsymbol{h}^{*}\Big(\boldsymbol{o}, \chi, l\Big) + \int_{\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\, \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \chi(\boldsymbol{r}') \boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s}\Big), \tag{2.42}$$

avec $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{o}, \chi, l)$ le résidu de la fonction coût. Le calcul du champ adjoint $\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{s}\Big)$ est effectué en deux étapes. Dans un premier temps, nous calculons *un champ incident adjoint* égal à $\int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \overline{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{mic}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o}) \boldsymbol{h}^{*}(\boldsymbol{o}, \chi, l)$ en faisant rayonner le résidu de la fonction coût à l'aide de la fonction de Green du microscope. Puis dans un deuxième temps, nous calculons dans le domaine d'investigation le champ total associé au champ incident adjoint pour l'estimation courante du contraste χ à l'aide de Eq. (2.42) (voir section 2.6.4). L'astuce qui consiste à constituer un champ incident global en sommant les rayonnements des sources placées au niveau des observations permet de résoudre un unique problème direct pour chaque illumination au lieu d'en effectuer autant qu'il y a de récepteurs. En imagerie optique, le nombre de récepteurs peut atteindre plusieurs milliers et le gain de temps de calcul est très grand. Dans le cas contraire où le nombre d'illuminations est beaucoup plus grand que celui de récepteurs, l'inversion du rôle des sources et des observations grâce au théorème de réciprocité permet de retomber dans le cas précédent.

Le rayonnement des récepteurs pour le calcul du champ adjoint semble suggérer que la fonction de Green du microscope doit être calculée en plaçant la source au niveau de chacun des récepteurs, et pour chacune des positions du domaine d'investigation. Heureusement, il est possible de réutiliser la fonction de Green du microscope du problème direct et $\overline{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{mic}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o})$ se déduit de $\overline{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{mic}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r})$: pour un dipôle $\boldsymbol{p}$ placé à un point d'observation $\boldsymbol{o}$, $\boldsymbol{n} \cdot \Big[\overline{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{mic}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o})\boldsymbol{p}\Big] = \boldsymbol{p} \cdot \Big[\overline{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{mic}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r})\boldsymbol{n}\Big]$ pour $\boldsymbol{n} = \hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}, \hat{\boldsymbol{z}}$ en appliquant le théorème de réciprocité (annexe D).

Afin d'accélérer la convergence de la fonction coût, nous utilisons un algorithme

de gradient conjugué qui consiste à remplacer la relation de mise à jour de l'objet (Eq. (2.4)) par

$$\chi_{n+1}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \chi_n(\boldsymbol{r}) + \alpha_n d_n(\boldsymbol{r}), \tag{2.43}$$

avec

$$d_n(\boldsymbol{r}) \quad = \quad g_{\chi,n}(\boldsymbol{r}) + a_n d_{n-1}(\boldsymbol{r}). \tag{2.44}$$

où a_n est un nombre complexe calculé à partir des estimations courante et précédente du gradient. Nous utilisons la formule de Polak-Ribière[22] pour calculer a_n,

$$a_n = \frac{\langle g_{\chi,n}, g_{\chi,n} - g_{\chi,n-1} \rangle_\Omega}{\left\| g_{\chi,n-1} \right\|_\Omega^2}. \tag{2.45}$$

Le réel α_n de Eq. (2.43) est calculé de façon à minimiser dans la direction de descente une fonction coût approximée $\hat{\mathcal{F}}$ obtenue en faisant l'hypothèse que le champ électrique dans le domaine d'investigation Ω n'est pas modifié entre les itérations n et $n+1$. En injectant Eq. (2.43) dans $\hat{\mathcal{F}}(\chi_{n+1})$, on obtient un polynôme de minimisation en α_n que l'on peut minimiser numériquement, voire analytiquement dans certains cas (annexe H). Cette méthode de calcul de α_n ne fournit pas de garanties de convergence vers un minimum local, mais fournit en pratique de bons résultats. Par ailleurs, une recherche non linéaire qui consisterait à minimiser rigoureusement la fonction coût $\mathcal{F}$ dans la direction de descente est coûteuse en temps de calcul car elle nécessiterait de réaliser autant de problèmes directs que de valeurs de α_n explorées.

La minimisation de la fonction coût est enclenchée à partir d'une estimation initiale de l'objet en chaque point du domaine d'investigation. Cette dernière est obtenue par une technique d'imagerie directe qui fournie une estimation de l'objet approchée mais rapide (chapitre 1). Généralement, nous utilisons la méthode de la rétropropagation (section 1.4.2) ou nous initialisons parfois l'objet simplement avec une constante.

2.7. Reconstruction d'objets en présence de diffusion multiple

Dans cette section, nous allons illustrer l'importance de calculer correctement le gradient de la fonction coût donné par l'Eq. (2.8) lorsque la diffusion multiple n'est pas négligeable dans l'objet. Pour ce faire, nous allons évaluer le gradient de trois manières différentes.

La première approximation, appelée Born-Born consiste à supposer que $\chi(\boldsymbol{r})$ est suffisamment petit pour que $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \chi, l)$ soit proche du champ en l'absence de l'objet, *i.e.* $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \chi, l) \approx \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)$. Cette approximation, appelée approximation de Born (section 1.3), revient à négliger la perturbation induite par l'objet et donc la diffusion multiple dans l'opérateur de Fréchet. L'expression de $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)$ étant analytique, le calcul du gradient est quasiment instantané. La deuxième approximation, appelée Born-Rig, prend en compte partiellement la diffusion multiple en remplaçant le champ adjoint $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \chi, \boldsymbol{o})$ par le champ de référence $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{o})$ mais en conservant le

calcul rigoureux de $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \chi, l)$. Ce choix est motivé par le fait que le calcul rigoureux de $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o}, \chi, l)$ est de toute façon nécessaire pour estimer le résidu de la fonction coût ; le calcul du champ proche $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \chi, l)$ dans le domaine d'investigation Ω est naturellement calculé à cette occasion. Ceci est particulièrement vrai si l'on utilise la méthode intégrale volumique [15]. Cette approximation peut être trouvée dans plusieurs études [3]. La troisième évaluation du gradient, appelée Rig-Rig, correspond au calcul rigoureux du gradient.

Pour étudier l'influence des différentes approximations possible sur le calcul du gradient par rapport au calcul rigoureux, nous allons nous placer dans une configuration très simple, c'est à dire sans lentille et le champ lointain est alors mesuré directement en module et en phase. Ceci est possible dans le domaine des micro ondes et nous allons donc utiliser la base de données de l'Institut Fresnel qui a été faite par Jean-Michel Geffrin et Pierre Sabouroux[14]. L'avantage est que cette base de données présente peu de bruit (par rapport à des mesures dans le domaine optique) et a déjà été utilisée par de nombreuses personnes. En effet, cette base de données a été exploitée dans de nombreux articles [19, 2, 3, 29, 11, 21, 1] et permet donc de tester nos algorithmes avec des objets et des éclairements parfaitement calibrés. La base de données fournit des champs diffractés expérimentaux associés à différents objets présentant peu, modérément et beaucoup de diffusion multiple. La configuration d'imagerie a été décrite de manière exhaustive dans plusieurs études [14, 10, 9]. Chaque objet de la base de données est illuminé par 81 antennes polarisées et l'amplitude complexe du champ diffracté est collectée par 36 antennes. Les antennes sont réparties sur une sphère de rayon 1.796 m avec l'objet au centre. La position précise des antennes sources et des antennes réceptrices sont décrites dans les sections "2.3 Sources locations" et "2.4 receiver locations" dans la référence [14]. Les champs diffractés ont été mesurés à différentes fréquences d'illumination de 3 GHz à 8 GHz. Les mesures ont été effectuées dans une chambre anéchoïque et la position de l'objet était loin de tout dioptre diélectrique. La configuration de l'espace libre peut être supposée.

Parmi les différents objets disponibles, nous avons choisi d'étudier trois objets particuliers permettant d'étudier l'effet de la diffusion multiple sur nos différentes approximations. Le premier objet est constitué de deux cubes identiques (chacun de côté 2.5 cm, de permittivité 2.4) séparés l'un de l'autre de 2.5 cm selon l'axe $\hat{\boldsymbol{z}}$. Le second objet est composé de deux boules identiques (chacune de rayon 2.5 cm, de permittivité 2.6) en contact selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$. Le troisième objet est un cylindre avec une base circulaire (de hauteur 8 cm, de rayon 4 cm, et de permittivité relative 3.05) orienté selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$. Aux fréquences étudiées, le bicube, le bisphère et le cylindre présentent des capacités croissantes à induire de la diffusion multiple. Puisque les objets étudiés ont été bien caractérisés, nous estimons l'erreur relative sur la susceptibilité par l'écart entre la susceptibilité reconstruite finale par rapport à la susceptibilité exacte de l'objet : $\mathrm{Err}(\chi) = \frac{\|\chi - \chi^{\mathrm{exact}}\|_\Omega^2}{\|\chi^{\mathrm{exact}}\|_\Omega^2}$ [Fig. 2.2]. On peut observer que les erreurs sur les données et sur l'objet sont les plus faibles lorsque le gradient est calculé rigoureusement. Par ailleurs, plus le gradient est calculé de manière rigoureuse, plus la convergence des courbes d'erreur reste stable lorsque la diffusion multiple augmente.

Le tableau 2.1 rassemble les erreurs quadratiques finales sur les objets pour les

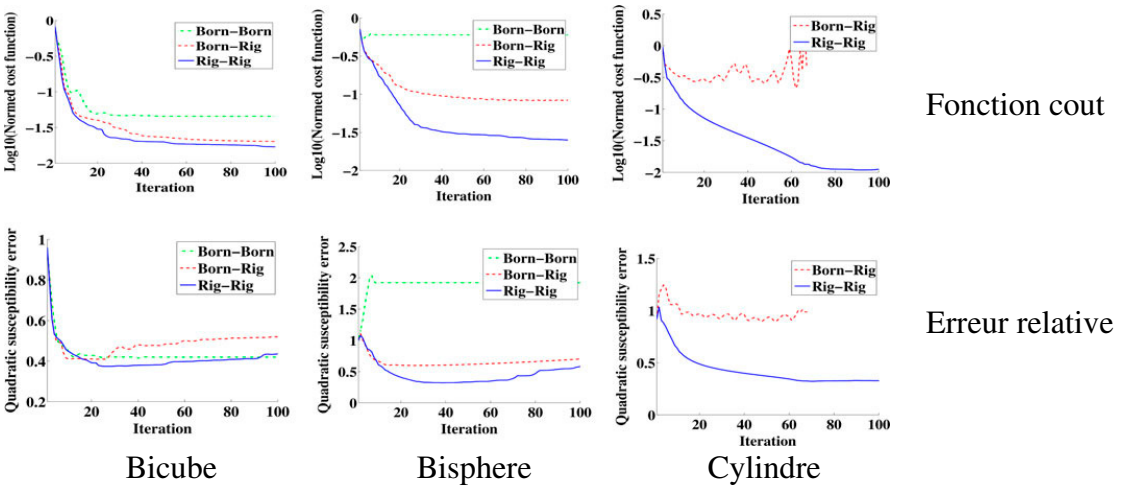

FIGURE 2.2. – Evolution de la fonction coût $\mathcal{F}(\chi)$ (*première ligne*) et de l'erreur relative sur le contraste $\mathrm{Err}(\chi) = \frac{\|\chi-\chi^{\mathrm{exact}}\|_\Omega^2}{\|\chi^{\mathrm{exact}}\|_\Omega^2}$ (*deuxième ligne*) en fonction des itérations en utilisant trois expressions différentes du gradient. *colonne de gauche* : deux cubes identiques (chacun de côté 2.5 cm, de permittivité 2.4) séparés l'un de l'autre de 2.5 cm selon l'axe $\hat{\boldsymbol{z}}$ éclairés à 8 GHz ($\lambda = 3.75$ cm). *colonne au centre* : deux boules identiques (chacune de rayon 2.5 cm, de permittivité 2.6) en contact selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminées à 5 GHz ($\lambda = 6$ cm). *colonne de droite* : un cylindre avec une base circulaire (de hauteur 8 cm, de rayon 4 cm, et de permittivité relative 3.05) orienté selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminé à 3 GHz ($\lambda = 10$ cm).

différents algorithmes. Lorsque l'objet présente peu de diffusion multiple [Fig. 2.3, colonne de gauche], la reconstruction obtenue avec Born-Rig ($\mathrm{Err}(\chi) = 52\%$ à 8GHz), voire Born-Born ($\mathrm{Err}(\chi) = 42\%$ à 8GHz) est satisfaisante ($\mathrm{Err}(\chi) \approx 40\%$ à 8GHz). Quand l'objet présente de la diffusion multiple de manière modérée, [Fig. 2.3, colonne au centre], l'influence des différentes approximations sur le gradient devient visible : Born-Rig ($\mathrm{Err}(\chi) = 70\%$ à 5GHz) et Rig-Rig ($\mathrm{Err}(\chi) = 58\%$ à 5GHz) estiment mieux les hautes fréquences spatiales du bisphère, plus particulièrement au point de contact, que Born-Born ($\mathrm{Err}(\chi) = 192\%$). Quand l'objet présente beaucoup de diffusion multiple [Fig. 2.3, colonne de droite], la reconstruction Rig-Rig ($\mathrm{Err}(\chi) = 33\%$ à 3GHz) est significativement meilleure que celle fournie par l'approximation Born-Rig ($\mathrm{Err}(\chi) = 99\%$ à 3GHz) tandis que l'algorithme diverge après la première itération sous l'approximation Born-Born.

Le tableau 2.1 rassemble les temps de calcul moyens par itération des différents algorithmes. Au cours d'une itération, la résolution des problèmes de diffraction directs et adjoints sont les opérations les plus coûteuses en temps de calcul. L'algorithme Born-Born ne résolvant aucun problème de diffraction, le temps de calcul moyen par itération reste sensiblement le même quelque soit l'objet considéré et la fréquence d'illumination (environ 25s par itération, Table 2.1). Par ailleurs, on constate pour les algorithmes Rig-Born et Rig-Rig que le temps de calcul moyen par itération augmente avec la fréquence d'illumination. Cela est dû à l'augmentation du temps de calcul du

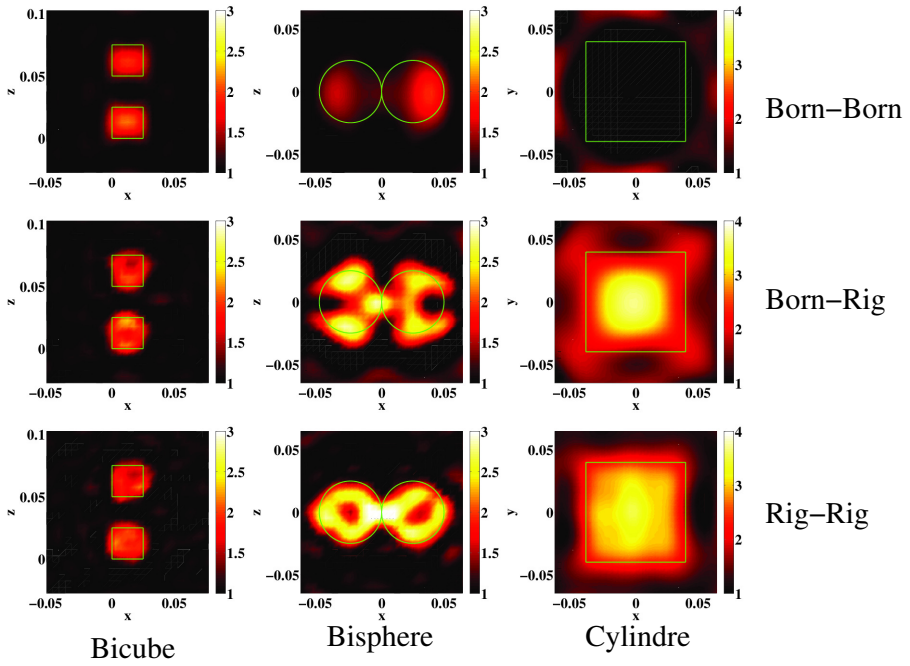

FIGURE 2.3. – Reconstructions d'objet utilisant trois expressions différentes du gradient. *colonne de gauche* : deux cubes identiques (chacun de côté 2.5 cm, de permittivité 2.4) séparés l'un de l'autre de 2.5 cm selon l'axe $\hat{\boldsymbol{z}}$ éclairés à 8 GHz ($\lambda = 3.75$ cm). *colonne au centre* : deux boules identiques (chacune de rayon 2.5 cm, de permittivité 2.6) en contact selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminées à 5 GHz ($\lambda = 6$ cm). *colonne de droite* : un cylindre avec une base circulaire (de hauteur 8 cm, de rayon 4 cm, et de permittivité relative 3.05) orienté selon l'axe $\hat{\boldsymbol{x}}$ illuminé à 3 GHz ($\lambda = 10$ cm). La *première ligne*, la *deuxième ligne*, et la *troisième ligne* correspondent respectivement aux reconstructions avec les gradients Born-Born, Born-Rig et Rig-Rig. La ligne en trait plein indique le contour exact de l'objet. Les unités de la figure sont le centimètre. A chaque fois mis à part les cas Born-Born/Cylindre et Born-Rig/Cylindre, la 100 e itération est montrée à partir de laquelle la fonction coût atteint un plateau. Pour le cylindre cependant, la diffusion multiple est si forte à l'intérieur de l'objet que la fonction coût présente une évolution chaotique sous l'approximation Born-Rig. La 5 e itération sous l'approximation Born-Born est montrée. La 63 e itération sous l'approximation Born-Rig à laquelle la fonction coût atteint sa valeur la plus basse est montrée.

champ électrique à l'intérieur du domaine d'investigation lorsque la diffusion multiple est plus importante. Mis-à-part pour le cylindre pour lequel l'algorithme Rig-Born ne converge pas (et ainsi le temps de calcul moyen par itération n'a pas de sens), le temps de calcul moyen par itération de l'algorithme Rig-Rig est approximativement le double de celui pour l'algorithme Rig-Born, car il est nécessaire de résoudre en plus du problème de diffraction direct, le problème de diffraction adjoint.

Bicube	Err(χ)			temps moyen par itération [s]		
f [GHz]	Born-Born	Rig-Born	Rig-Rig	Born-Born	Rig-Born	Rig-Rig
3	0.752	0.738	0.835	23.1	20.5	35.2
4	0.622	0.627	0.628	23.2	21.1	41.3
5	0.480	0.483	0.483	28.5	25.2	44.6
6	0.372	0.469	0.427	31.7	81.4	55.4
7	0.370	0.485	0.394	28.1	39.6	60.2
8	0.419	0.520	0.435	23.7	46.7	67.9
Bisphère	Err(χ)			temps moyen par itération [s]		
f [GHz]	Born-Born	Rig-Born	Rig-Rig	Born-Born	Rig-Born	Rig-Rig
3	0.398	0.398	0.587	32.2	33.0	63.2
4	0.672	0.467	0.433	24.3	53.0	96.5
5	1.922	0.701	0.58	22.6	76.0	129.5
6	-	-	0.39	-	-	110.9
Cylindre	Err(χ)			temps moyen par itération [s]		
f [GHz]	Born-Born	Rig-Born	Rig-Rig	Born-Born	Rig-Born	Rig-Rig
3	-	0.986	0.328	-	253.7	146.8
4	-	-	1.361	-	-	360.8

TABLE 2.1. – Erreur quadratique sur l'objet finale et temps CPU moyen par itération.

2.8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé un algorithme itératif qui estime dans un volume d'investigation la permittivité d'un objet à partir de mesures de champs en minimisant une fonction coût. Dans l'approximation de Born, la convergence et la reconstruction finale fournie par l'algorithme a été complètement caractérisée. Notons que les grandeurs qui interviennent dans l'algorithme sont indépendantes du modèle de diffraction et prennent en compte rigoureusement la diffusion multiple. Pour calculer le gradient de la fonction coût, nous avons déterminé de trois manières différentes l'expression analytique de l'opérateur de Fréchet qui décrit la variation linéaire du champ par rapport à une perturbation de la permittivité du milieu. La démonstration obtenue à partir du théorème de réciprocité de Lorentz permet une interprétation physique simple du gradient et s'étend sans difficulté au cas des milieux anisotropes. Dans le cas où il y a peu de diffusion multiple, un calcul approché du gradient peut être envisagé afin de réduire les temps de calcul.

Bibliographie

[1] M. Yuan C. YU et Q. H. LIU. ■ Reconstruction of 3D objects from multi-frequency experimental data with a fast DBIM-BCGS method ■. In : *Inverse Probl.* 25 (2009), p. 024007-24.

[2] Ilaria CATAPANO, Lorenzo CROCCO, Michele D' URSO et al. ■ 3D microwave imaging via preliminary support reconstruction : testing on the Fresnel 2008 database ■. In : *Inverse Problems* 25.2 (2009), p. 024002.

[3] P. C. Chaumet et K. Belkebir. ■ Three-dimensional reconstruction from real data using a conjugate gradient-coupled dipole method ■. In : *Inverse Probl.* 25 (2009), p. 024003-17.

[4] P. C. Chaumet et A. Rahmani. ■ Efficient iterative solution of the discrete dipole approximation for magneto-dielectric scatterers ■. In : *Opt. Lett.* 34 (2009), p. 917-919.

[5] P. C. Chaumet, A. Sentenac et A. Rahmani. ■ Coupled dipole method for scatterers with large permittivity ■. In : *Phys. Rev. E* 70 (2004), p. 036606-6.

[6] P. C. Chaumet, A. Sentenac et D. Sentenac. The computations were done using the free software IFDDA : https ://github.com/pchaumet/IF-DDA.

[7] B. T. Draine. ■ The discrete-dipole approximation and its application to interstellar graphite grains ■. In : *Astrophys. J.* 333 (1988), p. 848-872.

[8] B. T. Draine et P. J. Flatau. ■ Discrete-dipole approximation for scattering calculations ■. In : *J. Opt. Soc. Am. A* 11 (1994), p. 1491-1499.

[9] C. Eyraud, J.-M. Geffrin, P. Sabouroux et al. ■ Validation of 3D bistatic microwave scattering measurement setup ■. In : *Radio Science* 43 (2008), RS4018.

[10] C. Eyraud, J.-M geffrin, A. Litman et al. ■ Drift correction for scattering measurements ■. In : *Appl. Phys. Lett.* 89 (2006), p. 244104.

[11] C. Eyraud, A. Litman, A. Hérique et al. ■ Microwave imaging from experimental data within a Bayesian framework with realistic random noise ■. In : *Inverse Problems* 25.2 (2009), p. 024005.

[12] P. J. Flatau. ■ Improvements in the discrete-dipole approximation method of computing scattering and absorption ■. In : *Opt. Lett.* 22 (1997), p. 1205-1207.

[13] Corentin Friedrich, Sébastien Bourguignon, Jérôme Idier et al. ■ Reconstruction of 3-D Microwave Images based on a Block-BiCGStab Algorithm ■. In : *Journal of Physics : Conference Series* 657 (nov. 2015), p. 012014.

[14] J. M. Geffrin et P. Sabouroux. ■ Continuing with the Fresnel database : experimental setup and improvements in 3D scattering measurements ■. In : *Inverse Probl.* 25.2 (2009), p. 024001.

[15] F. M. Kahnert. ■ Numerical methods in electromagnetic scattering theory ■. In : *J. Quant. Spect. Rad. Transf.* 79-80 (2003), p. 775-824.

[16] Samira Khadir, Patrick C. Chaumet, Guillaume Baffou et al. ■ Quantitative model of the image of a radiating dipole through a microscope ■. EN. In : *JOSA A* 36.4 (avr. 2019), p. 478-484. issn : 1520-8532.

[17] A. Lakhtakia. ■ Strong and weak forms of the method of moments and the coupled dipole method for scattering of time-harmonic electromagnetics fields ■. In : *Int. J. Mod. Phys. C* 3 (1992), p. 583-603.

[18] L. Landweber. ■ An Iteration Formula for Fredholm Integral Equations of the First Kind ■. In : *American Journal of Mathematics* 73.3 (juil. 1951), p. 615.

[19] A. Litman et L. Crocco. ■ Testing inversion algorithms against experimental data : 3D targets ■. In : *Inverse Probl.* 25 (2009), p. 020201-5.

[20] J. M. Liu et L. Gomelsky. ■ Vectorial beam propagation method ■. In : *Journal of the Optical Society of America A* 9.9 (sept. 1992), p. 1574. issn : 1520-8532.

[21] A. Abubakar M. Li et P. M. van den Berg. ■ Application of the multiplicative regularized contrast source inversion method on 3D experimental Fresnel data ■. In : *Inverse Probl.* 25 (2009), p. 024006-23.

[22] Jorge Nocedal et Stephen J. Wright. *Numerical Optimization.* second. New York, NY, USA : Springer, 2006.

[23] Stephen J. Norton. ■ Iterative inverse scattering algorithms : Methods of computing Fréchet derivatives ■. In : *The Journal of the Acoustical Society of America* 106.5 (1999), p. 2653-2660.

[24] M. Paulus, P. Gay-Balmaz et O. J. F. Martin. ■ Accurate and efficient computation of the Green's tensor for stratified media ■. In : *Phys. Rev. E* 62.4 (2000), p. 5797-5807.

[25] Thanh-An Pham, Emmanuel Soubies, Alexandre Goy et al. ■ Versatile reconstruction framework for diffraction tomography with intensity measurements and multiple scattering ■. In : *Opt. Express* 26.3 (fév. 2018), p. 2749-2763.

[26] E. M. Purcell et C. R. Pennypacker. ■ Scattering and absorption of light by nonspherical dielectric grains ■. In : *Astrophys. J.* 186 (1973), p. 705-714.

[27] Emmanuel Soubies, Thanh-An Pham et Michael Unser. ■ Efficient inversion of multiple-scattering model for optical diffraction tomography ■. In : *Optics Express* 25.18 (août 2017), p. 21786. issn : 1094-4087.

[28] Kevin Unger, Ting Zhang, Patrick C. Chaumet et al. ■ Linearized inversion methods for three-dimensional electromagnetic imaging in the multiple scattering regime ■. In : *Journal of Modern Optics* 65.15 (juin 2018), p. 1787-1792. issn : 1362-3044.

[29] Jürgen De Zaeytijd et Ann Franchois. ■ Three-dimensional quantitative microwave imaging from measured data with multiplicative smoothing and value picking regularization ■. In : *Inverse Problems* 25.2 (2009), p. 024004.

3. Tomographie de diffraction sans mesure de phase

> Les gobelins kyrènes ne parlent qu'en questions et ne tolèrent pas de mauvaises réponses.
>
> Négociations kyrènes

Table des matières

3.1 Introduction 43
3.2 Positionnement du problème 44
3.3 Algorithme de reconstruction 46
3.4 Rôle du champ spéculaire dans la reconstruction d'objets par les intensités 47
3.5 Étude sur données synthétiques de la résolution transverse 49
3.6 Capacité de reconstruction selon l'axe optique 50
3.7 Discrimination entre des objets de phase et des objets absorbants . . 52
3.8 Reconstruction d'objets en régime de diffusion multiple 54
3.9 Application à la microscopie par tomographie CARS 55
3.10 Conclusion 55
Bibliographie 57

3.1. Introduction

En optique la mesure de la phase n'a été possible qu'au début des années 2000 [14] et les techniques permettant de mesurer la phase d'un champ reposent essentiellement sur des systèmes interférentiels complexes. Dans ce chapitre, nous présentons un algorithme de reconstruction pour la tomographie de diffraction optique qui ne nécessite que la mesure de l'intensité. Nous rappelons que l'intensité du champ est définit comme le module au carré du champ électrique. Nous verrons que nous obtenons des qualités de reconstruction sensiblement proches de celles obtenues avec la mesure de l'amplitude complexe du champ. La mesure des intensités permet de simplifier de manière drastique le montage expérimental, en s'affranchissant de la présence de la voie de référence qui nous permet de mesurer la phase et en évitant des post-traitements numériques. Les algorithmes de reconstruction sans mesure de phase (en anglais, phaseless algorithms) sont classés généralement en deux catégories : ceux qui restituent en premier lieu la phase du champ et réalisent ensuite une

inversion standard sur le champ complexe ; et ceux qui effectuent la reconstruction directement à partir des intensités mesurées. Le chapitre 8 du livre de Z. Chen fait l'état de l'art des techniques des reconstructions obtenues à partir de mesures des intensités[5]. L'algorithme que nous présentons reconstruit la permittivité dans un volume directement à partir des intensités mesurées. Les résultats que je vais rapporter constituent le contenu de l'article que j'ai publié dans J.Opt. Soc. Am. A[26] (voir annexe J)

3.2. Positionnement du problème

On considère un microscope constitué d'un objectif et d'une lentille de tube dans un montage $4f$ avec une ouverture numérique NA, un grossissement G, et dont l'axe optique est orienté de l'objectif vers la lentille de tube. La modélisation du microscope a été gardée simple[13] mais un modèle plus sophistiqué de la fonction d'étalement du point du microscope (*point spread function* ou PSF en anglais) prenant en compte par exemple des sources d'aberrations[19, 11] peut être facilement implémenté en modifiant le modèle direct. On définit l'espace objet comme le milieu devant l'objectif. Afin de prendre en compte un grand nombre de configurations, l'échantillon sous test dans l'espace objet est placé sur un substrat plan (habituellement une lame de verre) avec l'interface placée à la cote $z = 0$. L'espace objet est décrit par sa permittivité $\varepsilon^{\text{ref}}(z) = \varepsilon_1$ pour $z > 0$ et $\varepsilon^{\text{ref}}(z) = \varepsilon_2$ pour $z < 0$. L'égalité entre ε_1 et ε_2 correspond typiquement au cas ou l'objet est plongé dans une solution dont la permittivité s'accorde avec celle de la lame de verre et est imagé avec un objectif à immersion à huile.

L'objet est illuminé par un faisceau collimaté monochromatique sous différents angles. Ce dernier est assimilé à une onde plane polarisée rectilignement avec un vecteur d'onde transverse $\boldsymbol{k}_{\parallel}^{\text{inc}}$ qui varie. Dans la configuration en réflexion, le faisceau incident est généré par une source placée en $z < 0$ et se propageant vers les z négatifs tandis que dans la configuration en transmission il est généré par une source en $z < 0$ et se propageant vers les z positifs.

Dans les exemples de reconstruction qui vont suivre, on simule le champ qui existe au niveau de 256×256 points d'observation (qui représentent les pixels d'une caméra) placés dans le plan focal image du microscope en supposant le grossissement égal à 1 et l'ouverture numérique égale à $0.95 n_{\text{obj}}$ où n_{obj} est l'indice optique du milieu dans lequel l'objectif est immergé. Les simulations sont effectuées avec un solveur rigoureux des équations de Maxwell (section 2.6.4) basé sur la discrete-dipole approximation (souvent appelé DDA) et sur la modélisation rigoureuse du microscope [20, 21] pour estimer le champ dans le plan focal. L'outil de simulation (incluant le solveur des équations de Maxwell et le microscope) est librement accessible [4]. Les données synthétiques sont dégradées avec un bruit blanc sur la partie réelle et sur la partie imaginaire du champ diffracté. L'amplitude du bruit ajouté à la partie réelle (resp. à la partie imaginaire) du champ diffracté est choisie égale à 15% de la différence entre le maximum et le minimum des valeurs prises par la partie réelle (resp. par la partie imaginaire) du champ diffracté, selon la formule

$$X^{\text{bruit}}(\boldsymbol{o}) \quad = \quad X(\boldsymbol{o}) + 0.15\Big[\max_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} X - \min_{\boldsymbol{o}\in\Gamma} X\Big]\alpha \tag{3.1}$$

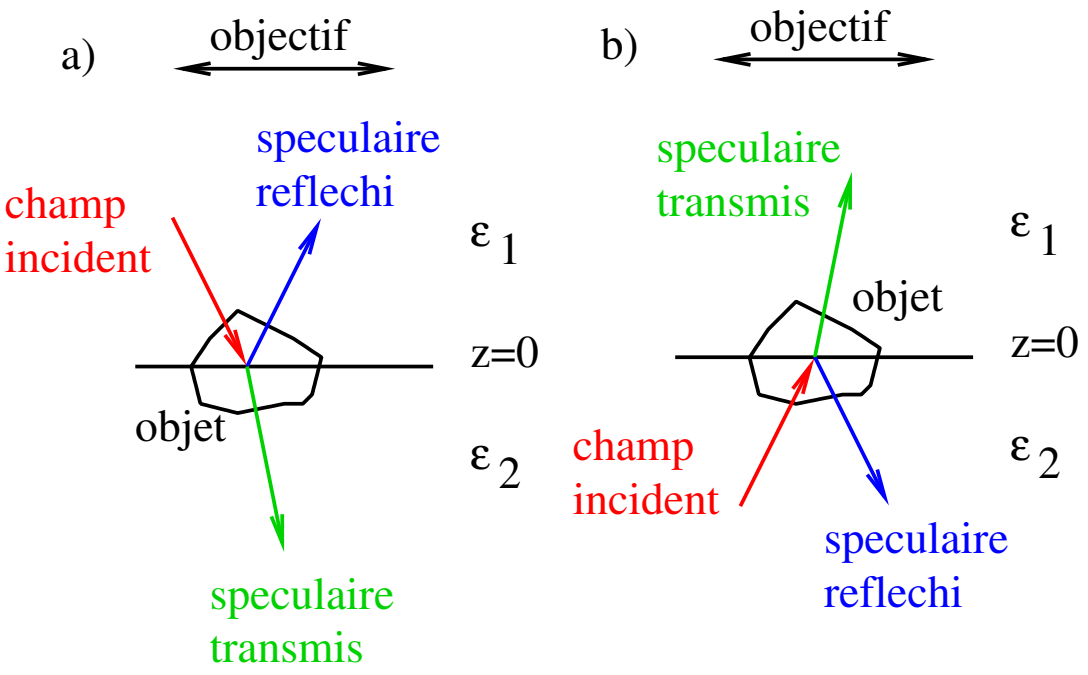

FIGURE 3.1. – a) Configuration d'imagerie en réflexion. b) Configuration d'imagerie en transmission.

où X correspond à la partie réelle ou la partie imaginaire d'une des composantes du champ diffracté, $X^{\texttt{bruit}}$ la grandeur bruitée correspondante, $\boldsymbol{o}$ un point d'observation, et α une variable aléatoire de statistique uniforme et comprise dans l'intervalle $[-0.5, 0.5]$.

Dans les études qui vont suivre, nous comparerons parfois les reconstructions données par l'algorithme itératif (section 3.3) avec les techniques de microscopie conventionnelles que sont l'imagerie plein champ et l'imagerie champ sombre. L'imagerie plein champ, aussi appelé *brightfield*, consiste à éclairer l'objet par une source spatialement incohérente et à enregistrer l'intensité obtenue au niveau de la caméra. L'image plein champ peut se déduire des données tomographiques en calculant au niveau de chaque pixel de la caméra la somme pour toutes les illuminations des intensités mesurées (Fig. 3.2(a)). L'imagerie champ sombre, aussi appelé *darkfield*, procède de la même manière que l'imagerie plein champ mais élimine le champ spéculaire (c'est-à-dire le champ sur la caméra en l'absence de l'objet) du champ détecté avant d'enregistrer l'image. L'image champ sombre peut être calculée à partir des données tomographiques, mais il faut supprimer préalablement le champ spéculaire du champ détecté.

3.3. Algorithme de reconstruction

L'algorithme que nous proposons détermine le contraste $\chi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon(\boldsymbol{r}) - \varepsilon^{\text{ref}}(\boldsymbol{r})$ en tout point $\boldsymbol{r}$ d'un domaine d'investigation Ω de telle sorte que la fonction

$$\mathcal{F}(\chi) = \frac{\sum_l \left\| I^{\text{mes}}(\cdot, l) - \left| \boldsymbol{E}(\cdot, \chi, l) \right|^2 \right\|_\Gamma^2}{\sum_l \left\| I^{\text{mes}}(\cdot, l) \right\|_\Gamma^2}, \tag{3.2}$$

soit minimale, où $I^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l)$ représente l'intensité mesurée à une position d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ pour la l-ième illumination. Nous rappelons que la dépendance du champ par rapport au contraste χ est donnée par l'Eq. (1.5) et que l'opérateur de Fréchet $\overline{\mathbf{D}}_\chi$ qui donne la variation linéaire du champ électrique en n'importe quel point par rapport à une perturbation du contraste du milieu est connu (section 2.4). La minimisation de la fonction coût est effectuée de la manière décrite dans la section 2.3 à savoir

— par le calcul de l'erreur $\mathcal{F}(\chi)$ pour une estimation donnée de la permittivité $\varepsilon(\boldsymbol{r}) = \varepsilon^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}) + \chi(\boldsymbol{r})$,
— par la correction de $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ de sorte que $\mathcal{F}(\chi)$ décroisse.

La fonction coût sur les intensités (Eq. (3.2)) étant différente de celle sur les champs complexes (Eq. (2.3)), nous allons détailler le calcul du gradient associé.

Un développement de Taylor de $\mathcal{F}$ par rapport à χ jusqu'à l'ordre 1, donne

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\chi + \delta\chi) &= W_\Gamma \sum_l \left\| I^{\text{ mes}}(l) - \left[\boldsymbol{E}(l) + \overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right]^* \cdot \left[\boldsymbol{E}(l) + \overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right] \right\|_\Gamma^2, \\
&= W_\Gamma \sum_l \left\| h(l) - 2\text{Re}\Big(\boldsymbol{E}^*(l) \cdot \left[\overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right]\Big) + \text{o}\big(\delta\chi\big) \right\|_\Gamma^2, \\
&= \mathcal{F}(\chi) - 2W_\Gamma \sum_l \text{Re}\Big\langle h(l)\ , 2\text{Re}\Big(\boldsymbol{E}^*(l) \cdot \left[\overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right]\Big)\Big\rangle_\Gamma + \text{o}\big(\delta\chi\big),
\end{aligned}$$

où $h(\boldsymbol{o}, \chi, l) = I^{\text{mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \left|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o}, \chi, l)\right|^2$ est le résidu de la fonction coût. Puisque h est réel, on obtient

$$\mathcal{F}(\chi + \delta\chi) = \mathcal{F}(\chi) - 4W_\Gamma \sum_l \text{Re}\Big\langle h(l),\ \boldsymbol{E}^*(l) \cdot \left[\overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right]\Big\rangle_\Gamma + \text{o}\big(\delta\chi\big). \tag{3.3}$$

La variation linéaire de $\mathcal{F}$ est

$$\begin{aligned}
\Big\langle h(l)\boldsymbol{E}^*(l) \cdot \left[\overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right]\Big\rangle_\Gamma &= \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ h(\boldsymbol{o}, l)\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{o}, l) \cdot \left[\overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right](\boldsymbol{o}), \\
&= \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o} \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\ h(\boldsymbol{o}, l)\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{o}, l) \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}, l)\delta\chi(\boldsymbol{r}), \\
&= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\ \delta\chi(\boldsymbol{r}) \left[\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\ h(\boldsymbol{o}, l)\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{o}, l) \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}, l)\right].
\end{aligned}$$

Finalement par identification, le gradient de la fonction coût est

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) \;=\; -4W_\Gamma \sum_l \left[\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; h(\boldsymbol{o},l)\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{o},\chi,l)\cdot\overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r},l)\right]^*. \tag{3.4}$$

L'expression de l'opérateur de Fréchet $\overline{\mathbf{D}}_\chi$ par le théorème de réciprocité (voir section 2.4.4) permet d'écrire le gradient sous la forme

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) \;=\; -4W_\Gamma \sum_l \left[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,l)\cdot\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r},\chi,\boldsymbol{s}^1,l\Big)\right]^*, \tag{3.5}$$

où le champ adjoint $\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r},\chi,\boldsymbol{s}^1,l\Big)$ en tout point $\boldsymbol{r}\in\Omega$ vérifie le problème de diffraction

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,\boldsymbol{s}^1,l) \;=\; \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})h(\boldsymbol{o},l)\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{o},\chi,l) + \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\chi,l).$$

On constate que l'expression du gradient de la fonction coût sur les intensités est très similaire à celle associée à la fonction coût sur les champs donnée par l'Eq. (2.7). Comme pour la fonction coût sur champ, le calcul du gradient peut être également obtenu par une approche variationnelle (annexe F).

Afin d'accélérer la convergence de la fonction coût, l'algorithme utilise un gradient conjugué avec les directions de descentes de Polak-Ribière (section 2.6.7). Le coefficient de minimisation α intervenant dans l'Eq. (2.4) est calculé en minimisant un polynôme (annexe H.2).

A chaque fois, l'algorithme utilisé lors des reconstructions est initialisé avec un contraste $\chi = 0.001$ constant dans l'ensemble du domaine d'investigation Ω et est arrêté lorsque la fonction coût atteint un plateau. Afin de quantifier l'efficacité de la reconstruction à la dernière itération, on introduit $\mathrm{Err}(\chi)$ l'erreur relative $\frac{\|\chi-\chi^{\mathrm{exact}}\|_\Omega^2}{\|\chi^{\mathrm{exact}}\|_\Omega^2}$ où χ^{exact} est la susceptibilité exacte de l'objet.

3.4. Rôle du champ spéculaire dans la reconstruction d'objets par les intensités

Nous allons montrer dans cette section que le champ spéculaire joue un rôle important sur la qualité des reconstructions à partir des intensités. On peut espérer dans le meilleur des cas reconstruire un objet aussi bien à partir de données d'intensité qu'à partir de données de champs complets (module, phase, polarisation). Pour un même objet d'étude, une même configuration d'imagerie et une même initialisation du contraste, les algorithmes sur les intensités et sur les champs fournissent des reconstructions identiques si les gradients des fonctions coût associées sont égaux à chaque itération. Les données en intensité contiennent les mêmes informations que les données sur amplitude. Ainsi, nous allons comparer le gradient de la fonction

coût sur le champ (Eq. (2.8))

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) \;=\; -W_\Gamma \sum_l \left[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,l)\cdot\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r},\chi,\boldsymbol{h},l\Big)\right]^*, \tag{3.6}$$

où $\boldsymbol{q}(\boldsymbol{o},\chi,l) = \boldsymbol{E}^{\text{scat, mes}}(\boldsymbol{o},l) - \boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o},\chi,l)$ est le résidu sur les données champs, avec le gradient de la fonction coût sur amplitude (annexe G et Eq. (G.3))

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) \;=\; -W_\Gamma \sum_l \left[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,l)\cdot\boldsymbol{E}\Big(\boldsymbol{r},\chi,\frac{\boldsymbol{E}^{\text{d}}}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{d}}\right|}h,l\Big)\right]^*, \tag{3.7}$$

où $h(\boldsymbol{o},\chi,l) = \left|\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o},l)\right| - \left|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},\chi,l)\right|$ est le résidu sur données amplitude. Les gradients des Eqs. (3.6) et (3.7) ne diffèrent que par les expressions des sources du champ adjoint. Écrivons la source du champ adjoint pour la fonction coût en amplitude en négligeant le champ diffracté devant le champ spéculaire,

$$\frac{\boldsymbol{E}^{\text{d}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{d}}(\boldsymbol{o},l)\right|}h(\boldsymbol{o},l) \;=\; \frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)\right|}\left[\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)+\boldsymbol{E}^{\text{scat,mes}}(\boldsymbol{o},l)\right| - \left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)+\boldsymbol{E}^{\text{scat}}(\boldsymbol{o},l)\right|\right],$$

or

$$\begin{aligned}
\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}+\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\right| &= \sqrt{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}+\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\right|^2},\\
&= \sqrt{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}\right|^2 + 2\text{Re}\left[\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}\cdot\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\right] + \left|\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\right|^2},\\
&= \left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}\right|\sqrt{1+2\text{Re}\left[\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}\right|^2}\cdot\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\right]} + o\big(\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\big),\\
&= \left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}\right|\left(1+\text{Re}\left[\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}\right|^2}\cdot\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\right]\right) + o\big(\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\big),\\
&= \left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}\right| + \text{Re}\left[\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}\right|}\cdot\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\right] + o\big(\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\big),
\end{aligned}$$

donc

$$\frac{\boldsymbol{E}^{\text{d}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{d}}(\boldsymbol{o},l)\right|}h(\boldsymbol{o},l) \;=\; \frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)\right|}\text{Re}\left[\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)\right|}\cdot\boldsymbol{q}(\boldsymbol{o},l)\right] + o\Big(\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\Big), \tag{3.8}$$

Eq. (3.8) s'interprète comme un terme d'interférence analogue à celui qui intervient dans des techniques d'holographie. En utilisant le fait que pour tout nombre complexe z, on a $\text{Re}(z) = \frac{1}{2}z + \frac{1}{2}z^*$, on a

$$\begin{aligned}
\frac{\boldsymbol{E}^{\text{d}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{d}}(\boldsymbol{o},l)\right|}h(\boldsymbol{o},l) &= \frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)\right|}\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)\right|}\cdot\boldsymbol{q}(\boldsymbol{o},l)\\
&+ \frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)\right|}\frac{\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{o},l)\right|}\cdot\boldsymbol{q}^*(\boldsymbol{o},l) + o\Big(\boldsymbol{E}^{\text{scat}}\Big).
\end{aligned}$$

Le champ spéculaire est souvent en tomographie une onde plane. En posant $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{o},l) = e^{i\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}\cdot\boldsymbol{o}}\boldsymbol{u}$, l'équation précédente devient

$$\frac{\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\boldsymbol{o},l)}{\left|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\boldsymbol{o},l)\right|}h(\boldsymbol{o},l) = \frac{1}{2}\Big[\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}(\boldsymbol{o},l)\Big]\boldsymbol{u} + \frac{1}{2}e^{i2\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}\cdot\boldsymbol{r}}\Big[\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}^*(\boldsymbol{o},l)\Big]\boldsymbol{u} + o\Big(\boldsymbol{E}^{\mathrm{scat}}\Big). \quad (3.9)$$

Les coefficients de Fourier de $e^{i2\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}^*(\boldsymbol{o},l)$ s'obtiennent en translatant les coefficients de Fourier de $\boldsymbol{q}^*(\boldsymbol{o},l)$ d'un vecteur $2\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}$ dans l'espace de Fourier. Or, les supports de $\boldsymbol{q}$ et $\boldsymbol{q}^*$ dans l'espace de Fourier sont contenus dans la boule de rayon k_0NA où NA est l'ouverture numérique du système d'imagerie. Ainsi l'intersection des supports de $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}(\boldsymbol{o},l)$ et de $e^{i2\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}^*(\boldsymbol{o},l)$ est d'autant plus petite dans l'espace de Fourier que la composante transverse de $\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}$ est importante, c'est-à-dire que l'angle d'incidence de l'onde plane est grand avec l'axe optique. Le calcul du champ adjoint nécessite le rayonnement des sources décrites par Eq. (3.9) placées aux points d'observation $\boldsymbol{o}\in\Gamma$ jusqu'aux points $\boldsymbol{r}\in\Omega$ du domaine de reconstruction. Cela a pour conséquence que les sources dont les fréquences spatiales sont en dehors de la boule k_0NA ne joueront pas de rôle dans le calcul du champ adjoint, et pour un $\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}$ relativement incliné par rapport à l'axe optique le terme $e^{i2\boldsymbol{k}_l^{\mathrm{inc}}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}^*(\boldsymbol{o},l)$ aura peu d'influence. Dans ce cas, le seul terme prépondérant dans le calcul du champ adjoint pour la fonction coût sur amplitude est la source $[\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{q}(\boldsymbol{o},l)]\,\boldsymbol{u}$ qui n'est qu'une simple projection selon la polarisation du champ spéculaire $\boldsymbol{u}$ de la source du champ adjoint de la fonction coût sur champs $\boldsymbol{q}$. Dans ce cas, les gradients des fonctions coût sur champs et sur amplitude sont semblables à l'incertitude due à la projection près. Ainsi, nous prévoyons qu'en présence du champ spéculaire et pour des illuminations ayant des angles d'incidence suffisamment inclinés, les reconstructions sur intensités et sur champs seront très semblables.

3.5. Étude sur données synthétiques de la résolution transverse

Dans ce paragraphe, nous allons illustrer l'intérêt de reconstruire un objet par tomographie en mesurant les intensités (l'algorithme de reconstruction a été introduit à la section 3.3) par rapport à l'imagerie plein-champ et à l'imagerie champ-sombre ; ces dernières techniques d'imagerie étant couramment utilisées en microscopie conventionnelle.

Un échantillon en résine est constitué de 12 branches identiques [Fig. 3.2(a)], chaque branche ayant une permittivité de 2.0, une hauteur de 160 nm, une longueur de 400 nm, une largeur de 100 nm. Cet échantillon est placé sur un substrat de verre (permittivité 2.25). L'étoile est illuminée par le substrat en réflexion totale par 6 ondes planes polarisées p à la longueur d'onde de 475 nm et avec des vecteurs d'onde incidents régulièrement répartis dans un cône d'angle 60 ° par rapport à l'axe optique. Le plan focal du microscope est placé au niveau de l'interface air-verre. Le domaine d'investigation Ω choisi pour les reconstructions est un parallélépipède de longueur et de largeur 1900 nm, de hauteur 300 nm, posé sur l'interface de verre et discrétisé avec un pas de 50 nm. Pour chaque illumination, l'intensité est mesurée en réflexion totale interne dans le verre (n=1.5) à l'aide d'un objectif à immersion.

Dans un premier temps, nous étudions la configuration plein champ dans laquelle la réflexion spéculaire du champ incident à l'interface air-verre atteint le plan image. L'intensité mesurée est égale à $\left|\boldsymbol{E}_l^{\text{ref}} + \boldsymbol{E}_l^{\text{scat}}\right|^2$. On compare l'image analogique plein champ [Fig. 3.2(b)], obtenue en sommant dans le plan image les intensités pour toutes les illuminations, à la reconstruction numérique [Fig. 3.2(e)], obtenue avec l'algorithme de reconstruction sur les intensités (section 3.3) en prenant en compte la réflexion spéculaire. Comme prévu, la résolution obtenue par l'algorithme est bien meilleure que celle de l'image plein champ ; le jeu d'images d'intensités contient plus d'informations sur l'objet que l'image issue de la somme de ces intensités.

On effectue une analyse similaire dans la configuration champ sombre dans laquelle la réflexion spéculaire du champ incident est supprimée et n'atteint pas le plan image. L'intensité mesurée est égale à $\left|\boldsymbol{E}_l^{\text{scat}}\right|^2$. L'image champ sombre [Fig. 3.2(c)], obtenue en sommant les intensités est comparée à la reconstruction numérique [Fig. 3.2(f)], obtenue avec l'algorithme de reconstruction sur les intensités en ayant supprimé la réflexion spéculaire. La reconstruction champ sombre (erreur relative finale Err(χ) =79%) [Fig. 3.2(f)] reste meilleure que l'image champ sombre analogique [Fig. 3.2(c)], mais n'est pas aussi bonne que la reconstruction plein champ (erreur relative finale Err(χ) =62%) [Fig. 3.2(e)]. Ce résultat n'est pas surprenant puisque l'interférence entre le champ de référence et le champ diffracté apporte des informations importantes dans des problèmes de récupération de phase (*phase retrieval* en anglais), par exemple en holographie en ligne.

Bien entendu, la meilleure reconstruction est obtenue lorsque le champ est connu en amplitude et phase pour les deux polarisations fondamentales s et p (erreur relative finale Err(χ) =57%) [Fig. 3.2(d)]. Cependant, la différence entre les reconstructions étant relativement faible, la tomographie sur intensités apparaît comme une option intéressante dans la mesure où le dispositif expérimental est grandement allégé.

3.6. Capacité de reconstruction selon l'axe optique

Un point clé de la tomographie est sa capacité à fournir une reconstruction 3D d'un objet à partir d'images 2D qui ont été enregistrées dans un plan fixe pour différentes illuminations. Sous l'approximation de Born, on peut montrer qu'il y a une bijection entre le jeu de données 2D constitué des champs complexes et la transformée de Fourier 3D de l'objet restreinte au support de la fonction de transfert optique du microscope (qui dépend de la configuration d'imagerie, réflexion ou transmission et de l'ouverture numérique, section 1.4.1) [10]. Il est important de vérifier si cette propriété est conservée lorsque seule l'intensité est mesurée.

On considère un objet situé dans de l'air composé de 2 parallélépipèdes identiques (chaque parallélépipède a une largeur et une longueur de 250 nm, une hauteur selon l'axe optique de 1 μm, et a une permittivité 1.05) séparés par 2 μm selon l'axe optique. Les parallélépipèdes sont centrés à 3.5 μm et à 6.5 μm du plan focal objet du microscope [Fig. 3.3(a)]. L'objet est éclairé par 9 ondes planes polarisées p à la longueur d'onde $\lambda = 500$ nm selon des vecteurs d'onde incidents répartis de façon régulière dans un cône d'angle 30 ° par rapport à l'axe optique. Le pas de discrétisation dans le plan image est de 50 nm, soit $\lambda/10$.

En transmission, le faisceau spéculaire transmis interfère avec le champ diffracté

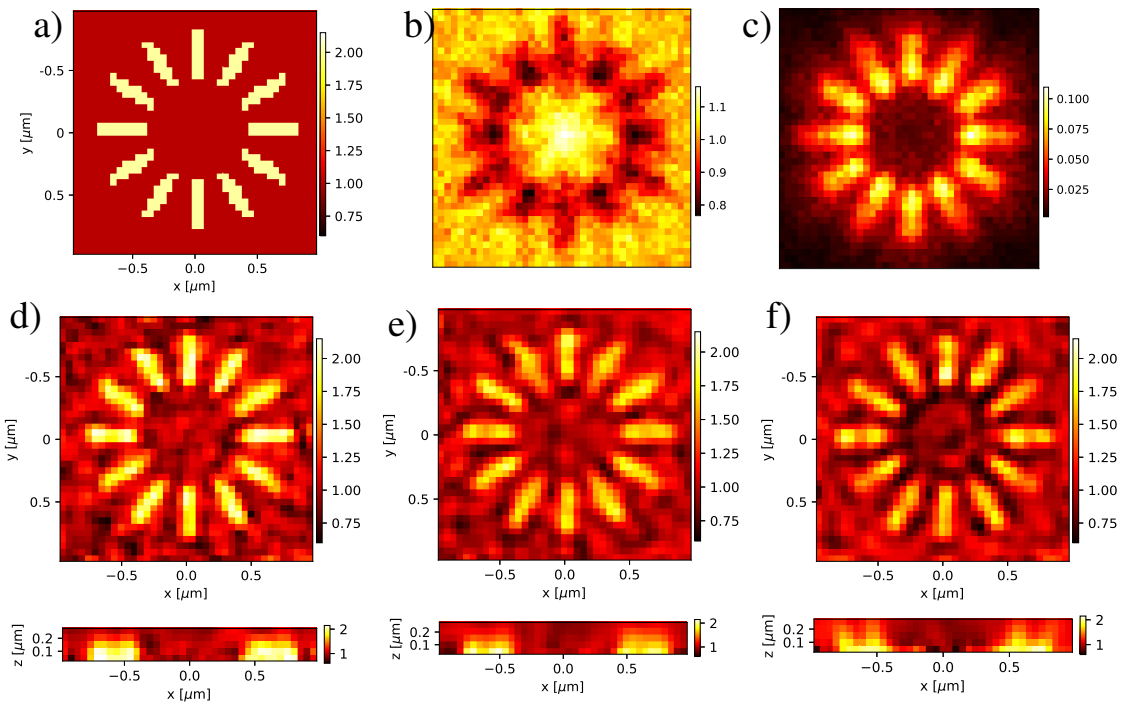

FIGURE 3.2. – a) Une étoile en résine constituée de 12 branches identiques (chaque branche a une permittivité 2.0, une hauteur 160 nm, une longueur 400 nm, une largeur 100 nm) est placée sur un substrat de verre (permittivité 2.25). L'étoile est illuminée par le substrat en réflexion totale par 6 ondes planes polarisées p à la longueur d'onde 475 nm et avec des vecteurs d'onde incidents régulièrement répartis dans un cône d'angle 60 ° par rapport à l'axe optique. b) L'image plein-champ (dite *brightfield*) obtenue en faisant la moyenne sur les illuminations des intensités mesurées sur la caméra. c) L'image champ sombre (dite *darkfield*) construite de la même manière que l'image brightfield mais en ayant supprimé préalablement la réflexion spéculaire du champ détecté. d) Permittivité estimée de l'étoile à partir de la mesure du champ. e) Permittivité estimée de l'étoile à partir de la mesure de l'intensité. f) Pareil que e) mais en ayant préalablement supprimé la réflexion spéculaire du champ détecté. Les images d), e) et f) correspondent à l'itération finale de la minimisation de la fonction coût.

et nous observons que la reconstruction 3D obtenue à partir de données d'intensités [Fig. 3.3(c)] est très similaire à celle obtenue à partir de données de champs [Fig. 3.3(b)]. Si l'on filtre artificiellement le faisceau spéculaire transmis de façon à ce que seul le champ diffracté ne parvienne au plan image (configuration champ sombre), la reconstruction n'est pas aussi bonne [Fig. 3.3(d)] mais reste correcte. Comme nous l'avons vu précédemment [Fig. 3.2], l'interférence avec le champ spéculaire est utile mais son absence ne dégrade pas totalement la reconstruction.

En réflexion, les reconstructions obtenues à partir de données sur champs [Fig. 3.3(e)]

et sur données d'intensités [Fig. 3.3(f)] sont semblables. Les parallélépipèdes sont mal restitués et seulement leurs interfaces peuvent être distinguées. Ce résultat décevant ne vient pas d'un échec de l'algorithme de reconstruction mais est une illustration directe du filtrage passe-bas du système d'imagerie en réflexion qui coupe les fréquence spatiales basses de l'objet [23]. Sans régularisation, on ne peut espérer une meilleure reconstruction.

Afin d'améliorer l'imagerie des parallélépipèdes, un miroir est placé au niveau du plan focal objet du microscope, combinant ainsi les illuminations en transmission et en réflexion. En réfléchissant l'illumination et le champ diffracté, le miroir envoie à la fois les champs transmis et réfléchi vers le plan image [18]. Comme prévu, la reconstruction des parallélépipèdes [Fig. 3.3(g)] est améliorée de manière significative comparée à celle obtenue en transmission [Fig. 3.3(c)], ou en réflexion [Fig. 3.3(f)]. Ce résultat est en accord avec le support augmenté de la fonction de transfert optique [18]. Afin d'améliorer la résolution selon l'axe optique, d'autres configurations ont été proposées [27, 1, 24] et qui pourraient être simulées avec l'algorithme de reconstruction.

3.7. Discrimination entre des objets de phase et des objets absorbants

Une importante limitation des microscopes conventionnels à plein champ[25] est que les objets transparents, c'est-à-dire sans pertes, ne sont pas visibles, tandis qu'en configuration champ sombre, ils ne peuvent pas être discriminés parmi des objets à pertes [3, 7]. Afin d'être sensible à ces différents contrastes, plusieurs techniques d'imagerie, telles que des microscopes à contraste de phase ou à contraste interférentiel différentiel (DIC de l'anglais *differential interference contrast*) ont été développées. Si l'enregistrement des images d'intensités sous différents angles est suffisant pour simuler un microscope standard, la simulation d'un microscope à contraste de phase ou d'un microscope DIC requiert *a priori* la connaissance du champ complexe dans le plan image. Ce champ est obtenu à l'aide d'un montage interférométrique couplé à un microscope par tomographie de diffraction, ce qui confère à la microscopie par tomographie de diffraction l'intérêt de pouvoir simuler un grand nombre de modalités d'imagerie avec un même système optique [15, 16, 2, 9]. Toutefois, nous imposons la contrainte de ne pas avoir à disposition la phase du champ et la capacité d'obtenir des informations quantitatives sur la permittivité complexe de l'échantillon à partir de données d'intensité est ainsi une question importante.

On considère un objet composé de quatre cubes (chacun d'arête 150 nm et de permittivité 1.1+i0.1, 1.0+i1.0, 2.0+i0.5 et 1.5) centrés aux coins d'un carré de coté 450 nm et qui sont placés dans l'air au plan focal du microscope. Les cubes sont éclairés à la longueur d'onde 700 nm par 9 ondes planes polarisées p dont les vecteur d'onde incidents sont répartis de façon régulière dans un cône d'angle 60 ° par rapport à l'axe optique. Le pas de discrétisation dans le plan image est 75 nm= $\lambda/9$. La reconstruction en transmission est donnée dans les Figs. 3.4(c) et 3.4(d). On observe que la variation des valeurs de la permittivité des cubes sur la partie réelle et sur la partie imaginaire est restituée avec précision. En revanche, la reconstruction en réflexion [Figs. 3.4(e) et 3.4(f)], ne permet pas de distinguer les objets absorbants des

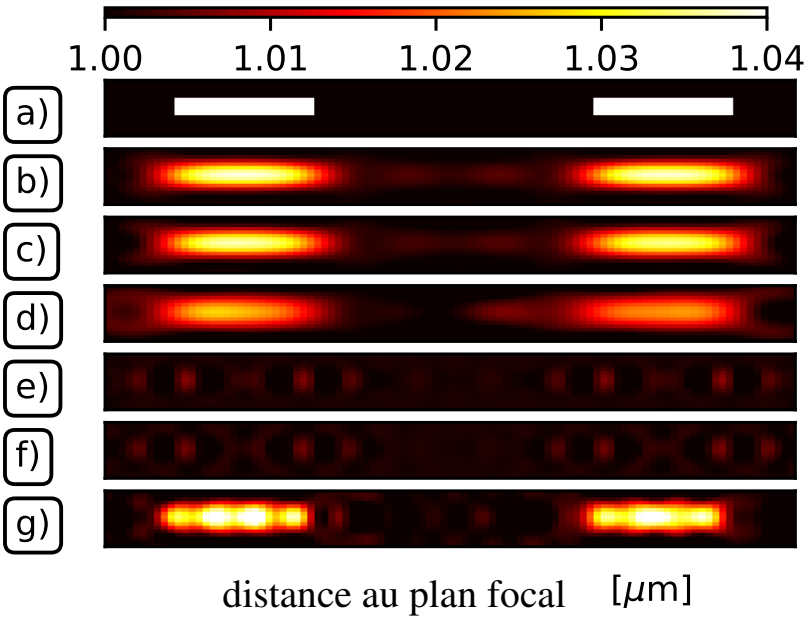

FIGURE 3.3. – Un objet composé de 2 parallélépipèdes identiques (chaque parallélépipède a une largeur et une longueur de 250 nm, une hauteur selon l'axe optique de 1 μm, et a une permittivité 1.05) séparés par 2 μm selon l'axe optique sont éclairés à la longueur d'onde 500 nm par 9 ondes planes polarisées p selon des vecteurs d'onde incidents répartis de façon régulière dans un cône d'angle 30 ° par rapport à l'axe optique. Les parallélépipèdes sont centrés à 3.5 μm et à 6.5 μm du plan focal du microscope. a) Permittivité théorique des parallélépipèdes. Permittivité estimée en *transmission* : b) à partir de données de champs complexes vectoriels, c) à partir de données d'intensités, d) à partir de données d'intensités où la réflexion spéculaire du champ incident a été supprimée. Permittivité estimée en *réflexion* : e) à partir de données de champs complexes vectoriels, f) à partir de données d'intensités, g) à partir de données d'intensités en présence d'un miroir. A chaque fois, la reconstruction de l'itération finale est montrée.

objets de phase. Ce phénomène était à prévoir car en l'absence d'une interférence avec un champ spéculaire, un cube de contraste imaginaire et un cube de même contraste réel diffractent la même intensité. Ces expériences montrent qu'il est possible de restituer la nature des objets (de phase, absorbant ou un mélange des deux) en mesurant l'intensité tant que le champ diffracté interfère avec un champ de référence.

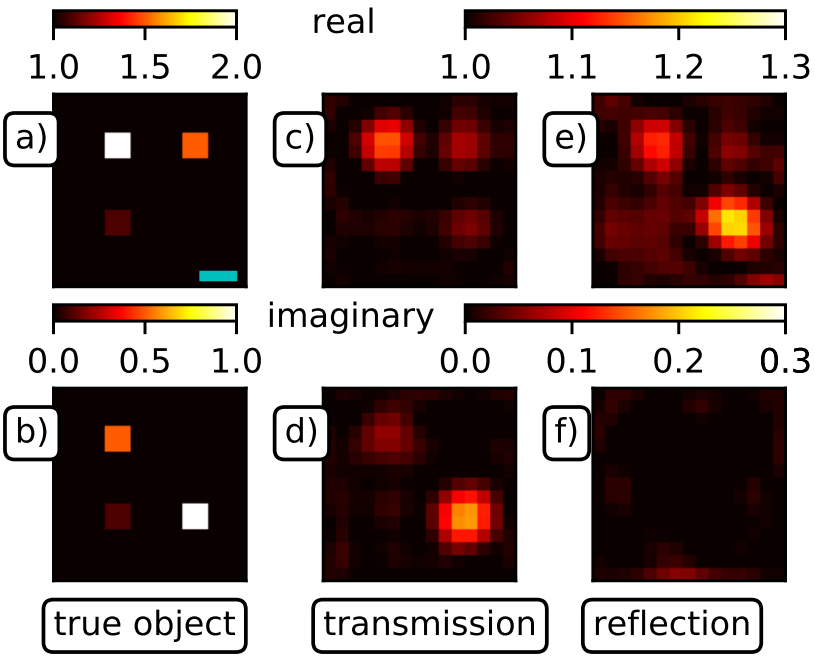

FIGURE 3.4. – Quatre cubes (chacun d'arête 150 nm et de permittivité 1.1+i0.1, 1.0+i1.0, 2.0+i0.5 et 1.5) centrés aux coins d'un carré de coté 450 nm sont placés dans l'air au plan focal du microscope. Les cubes sont éclairés à la longueur d'onde 700 nm par 9 ondes planes polarisées p dont les vecteur d'onde incidents sont répartis de façon régulière dans un cône d'angle 60 ° par rapport à l'axe optique. Permittivité théorique : (a) partie réelle, (b) partie imaginaire. Permittivité estimée en transmission : (c) partie réelle, (d) partie imaginaire. Permittivité estimée en réflexion : (e) partie réelle, (f) partie imaginaire. La barre verte mesure 200 nm.

3.8. Reconstruction d'objets en régime de diffusion multiple

Jusqu'à présent, nous avons considéré des objets petits devant la longueur d'onde d'illumination ou avec un faible contraste pour lesquels l'approximation de diffusion simple (ou approximation de Born, section 1.3) est valide. Dans cette section, nous étudions les performances de l'algorithme de reconstruction sur les intensités pour un objet qui présente de la diffusion multiple.

On considère deux boules identiques (de diamètre 250 nm, de permittivité 2.05) placées dans l'air en contact dans le plan focal objet du microscope. Les boules sont illuminées à la longueur d'onde 450 nm par 9 ondes planes polarisées p dont les vecteurs d'onde incidents sont choisis de façon régulière dans un cône d'angle 60 ° par rapport l'axe optique. L'intensité est mesurée en transmission dans le plan image avec un pas de discrétisation de 25 nm, soit $\lambda/18$. Les reconstructions obtenues à partir d'intensités et de champs en résolvant rigoureusement les équations de Maxwell ou bien

en utilisant l'approximation de Born sont rassemblées dans la Fig. 3.5. Comme prévu, une reconstruction précise est obtenue lorsque les gradients sont estimés de manière rigoureuse tandis que sous l'approximation de Born l'algorithme ne parvient pas à restituer les deux boules [Figs.3.5(e)-(h)]. Avec une résolution rigoureuse des équations de Maxwell, les deux boules sont correctement reconstruites. Les reconstructions obtenues à partir des intensités et des champs avec un calcul rigoureux des champs sont proches avec des erreurs relatives finales Err(χ) respectivement égales à 45% et 41% [Fig. 3.1].

Err(χ)	born	rigoureux
champ	1.328	0.414
intensité	0.768	0.459

TABLE 3.1. – Erreurs relatives finales sur l'objet reconstruit Err(χ) associées au bisphère pour les reconstructions sur données champ complexe et intensité, sous l'approximation de Born ou avec calcul rigoureux de la diffusion multiple. A chaque fois, 50 itérations ont été effectuées.

3.9. Application à la microscopie par tomographie CARS

Dans cet section, nous allons brièvement présenter une application à la tomographie CARS de l'algorithme itératif sans mesure de phase développé dans la section 3.3. L'article de recherche associé fournissant plus de détails[12] est adjoint en annexe J.

La microscopie Coherent anti-Stokes Raman (CARS) est une technique d'imagerie sans marquage dans laquelle l'échantillon sous test est illuminé simultanément par deux faisceaux intenses à des longueurs d'onde pompe et Stokes différentes. L'échantillon émet alors une radiation anti-Stokes résultant d'une interaction non linéaire[28, 6, 22]. Cette technique permet d'estimer la susceptibilité du 3e ordre qui est fortement dépendante de la composition chimique du matériau. Ainsi, la microscopie CARS est capable de fournir des cartes chimiques d'échantillons biologiques[17, 8].

Nous n'allons pas nous étendre sur les conditions d'émission du signal utile qui est l'intensité anti-Stokes. On peut montrer que le champ anti-Stokes vérifie une équation d'onde similaire à l'Eq. 1.3 avec pour termes source uniquement les sources induites de diffraction[12]. Ainsi, S. Heuke a implémenté l'algorithme itératif de la section 3.3 pour reconstruire une carte de la répartition de l'élément $\chi^{(3)}_{1111}$ du tenseur de susceptibilité du 3e ordre $\chi^{(3)}$.

3.10. Conclusion

Nous avons présenté un algorithme de reconstruction capable d'estimer la permittivité complexe d'un objet à partir des images d'intensité obtenues sous différents angles d'illumination. L'algorithme peut être adapté à n'importe quel modèle de diffraction permettant de simuler les images et à n'importe quelle configuration de

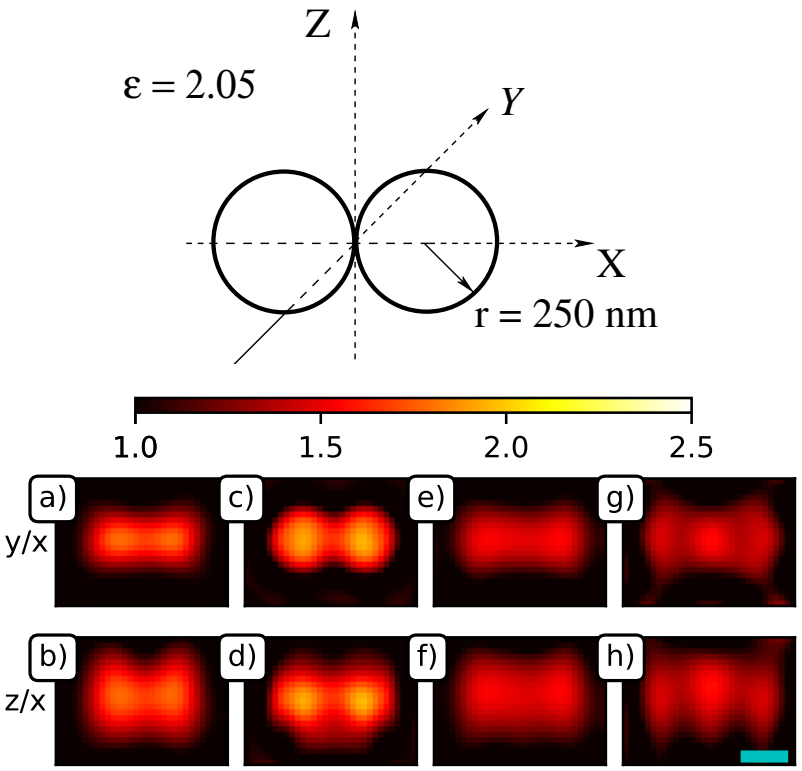

FIGURE 3.5. – Deux boules identiques (de diamètre 250 nm, de permittivité 2.05) placées dans l'air sont en contact dans le plan focal du microscope. Les boules sont illuminées à la longueur d'onde 450 nm par 9 ondes planes polarisées p dont les vecteurs d'onde incidents sont choisis de façon régulière dans un cône d'angle 60 ° par rapport l'axe optique. L'intensité est mesurée en transmission. Permittivité estimée à partir de données de champ et avec un calcul rigoureux des champs : (a) plan transversal, (b) plan axial. Permittivité estimée à partir de données d'intensités et avec un calcul rigoureux des champs : (c) plan transversal, (d) plan axial. Permittivité estimée à partir de données de champ sous l'approximation de Born : (e) plan transversal, (f) plan axial. Permittivité estimée à partir de données d'intensités sous l'approximation de Born : (g) plan transversal, (h) plan axial. A chaque fois l'itération finale est montrée. La barre verte mesure 200 nm.

microscopie (en réflexion ou en transmission, avec une faible ou grande ouverture numérique). Nous avons étudié les performances de la tomographie de diffraction à partir d'intensités autour de quatre principales questions que sont la super-résolution transverse, la reconstruction tridimensionnelle (en réflexion et en transmission), la détection de contraste et la reconstruction en présence de diffusion multiple ; en comparant à chaque fois aux reconstructions que l'on peut obtenir si l'on a accès au champ complexe. Nous avons trouvé que dans le plupart des situations, la tomogra-

phie à partir d'intensités fournissait des résultats aussi satisfaisants en résolution et en contraste que la tomographie à partir de champs. Elle représente ainsi une option très intéressante afin de populariser la microscopie computationnelle car elle ne requiert que des adaptations mineures dans les montages expérimentaux de microscopie.

Bibliographie

[1] Vinoth B., Xin-Ji Lai, Yu-Chih Lin et al. ■ Integrated dual-tomography for refractive index analysis of free-floating single living cell with isotropic superresolution ■. In : *Scientific Reports* 8.1 (avr. 2018).

[2] Jonathan Bailleul, Bertrand Simon, Matthieu Debailleul et al. ■ An Introduction to Tomographic Diffractive Microscopy : Toward High-Speed Quantitative Imaging Beyond the Abbe Limit ■. In : *Micro-and Nanophotonic Technologies* (2017).

[3] M. Born et E. Wolf. *Principles of Optics*. Pergamon, 1959.

[4] P. C. Chaumet, A. Sentenac et D. Sentenac. The computations were done using the free software IFDDA : https ://github.com/pchaumet/IF-DDA.

[5] Xudong Chen. *Computational Methods for Electromagnetic Inverse Scattering*. John Wiley & Sons Singapore Pte. Ltd, mai 2018.

[6] Ji-Xin Cheng. *Coherent Raman Scattering Microscopy*. CRC Press, avr. 2016.

[7] Michael W. Davidson et Mortimer Abramowitz. ■ Optical Microscopy ■. In : *Encyclopedia of Imaging Science and Technology*. American Cancer Society, 2002. isbn : 9780471443391.

[8] James P. R. Day, Katrin F. Domke, Gianluca Rago et al. ■ Quantitative Coherent Anti-Stokes Raman Scattering (CARS) Microscopy ■. In : *The Journal of Physical Chemistry B* 115.24 (juin 2011), p. 7713-7725.

[9] Xin Fan, John J. Healy, Kevin O'Dwyer et al. ■ Label-free color staining of quantitative phase images of biological cells by simulated Rheinberg illumination ■. EN. In : *Applied Optics* 58.12 (avr. 2019), p. 3104-3114. issn : 2155-3165.

[10] O. Haeberlé, K. Belkebir, H. Giovaninni et al. ■ Tomographic diffractive microscopy : basics, techniques and perspectives ■. In : *Journal of Modern Optics* 57.9 (2010), p. 686-699.

[11] Olivier Haeberlé. ■ Focusing of light through a stratified medium : a practical approach for computing microscope point spread functions : Part II : confocal and multiphoton microscopy ■. In : *Optics Communications* 235.1 (2004), p. 1-10. issn : 0030-4018.

[12] Sandro Heuke, Kevin Unger, Samira Khadir et al. ■ Coherent anti-Stokes Raman Fourier ptychography ■. In : *Opt. Express* 27.16 (août 2019), p. 23497-23514.

[13] Samira Khadir, Patrick C. Chaumet, Guillaume Baffou et al. ■ Quantitative model of the image of a radiating dipole through a microscope ■. EN. In : *JOSA A* 36.4 (avr. 2019), p. 478-484. issn : 1520-8532.

[14] V. Lauer. ■ New approach to optical diffraction tomography yielding a vector equation of diffraction tomography and a novel tomographic microscope ■. In : *J. Microsc.* 205 (fév. 2002), p. 165-176.

[15] J. Lobera et J. M. Coupland. ■ Contrast enhancing techniques in digital holographic microscopy ■. en. In : *Measurement Science and Technology* 19.2 (jan. 2008), p. 025501. issn : 0957-0233.

[16] Lisa Miccio, Andrea Finizio, Roberto Puglisi et al. ■ Dynamic DIC by digital holography microscopy for enhancing phase-contrast visualization ■. EN. In : *Biomedical Optics Express* 2.2 (fév. 2011), p. 331-344. issn : 2156-7085.

[17] Wei Min, Christian W. Freudiger, Sijia Lu et al. ■ Coherent Nonlinear Optical Imaging : Beyond Fluorescence Microscopy ■. In : *Annual Review of Physical Chemistry* 62.1 (2011). PMID : 21453061, p. 507-530.

[18] E. Mudry, P. C. Chaumet, K. Belkebir et al. ■ Mirror-assisted tomographic diffractive microscopy with isotropic reso lution ■. In : *Opt. Lett.* 35.11 (juin 2010), p. 1857-1859.

[19] Michael J. Nasse et Jörg C. Woehl. ■ Realistic modeling of the illumination point spread function in confocal scanning optical microscopy ■. In : *J. Opt. Soc. Am. A* 27.2 (fév. 2010), p. 295-302.

[20] L. Novotny, D. W. Pohl et P. Regli. ■ Light propagation through nanometer-sized structures : the two-dimensional-aperture scanning near-field optical microscope ■. In : *J. Opt. Soc. Am. A* 11.6 (juin 1994), p. 1768-1779.

[21] B. Richards, E. Wolf et Dennis Gabor. ■ Electromagnetic diffraction in optical systems, II. Structure of the image field in an aplanatic system ■. In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 253.1274 (1959), p. 358-379.

[22] Hervé Rigneault et Pascal Berto. ■ Tutorial : Coherent Raman light matter interaction processes ■. In : *APL Photonics* 3.9 (sept. 2018), p. 091101.

[23] Anne Sentenac et Jerome Mertz. ■ Unified description of three-dimensional optical diffraction microscopy : from transmission microscopy to optical coherence tomography : tutorial ■. In : *J. Opt. Soc. Am. A* 35.5 (mai 2018), p. 748-754.

[24] Bertrand Simon, Matthieu Debailleul, Mounir Houkal et al. ■ Tomographic diffractive microscopy with isotropic resolution ■. In : *Optica* 4.4 (avr. 2017), p. 460.

[25] N. Streibl. ■ Three-dimensional imaging by a microscope ■. In : *J. Opt. Soc. Am. A* 2.2 (1985), p. 121-127.

[26] Kevin D. Unger, Patrick C. Chaumet, Guillaume Maire et al. ■ Versatile inversion tool for phaseless optical diffraction : tomography ■. EN. In : *JOSA A* 36.11 (nov. 2019), p. C1-C8. issn : 1520-8532.

[27] S. Vertu, J.-J. Delaunay, I. Yamada et al. ■ Diffraction microtomography with sample rotation : influence of a missing apple core in the recorded frequency space ■. In : *Centr. Eur. J. of Phys.* 7 (2009), p. 22-31.

[28] Andreas Zumbusch, Gary R. Holtom et X. Sunney Xie. ■ Three-Dimensional Vibrational Imaging by Coherent Anti-Stokes Raman Scattering ■. In : *Physical Review Letters* 82.20 (mai 1999), p. 4142-4145.

4. Le microscope bimodal

Il a neigé dans l'aube rose
Si doucement neigé,
Que les choses
Semblent avoir changé.

Maurice Carême

Table des matières

4.1 Introduction 61
4.2 Tomographie de diffraction sans mesure de phase en configuration TIRF avec illumination structurée 62
4.3 Microscopie de fluorescence à illumination structurée en configuration TIRF 64
4.4 Modélisation de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores à l'aide de la tomographie de diffraction sans mesure de phase 66
4.5 Reconstruction conjointe des fluorophores et du milieu qui les entoure 69
4.5.1 Le modèle direct 69
4.5.2 L'algorithme de reconstruction 71
4.6 Conclusion 74
Bibliographie 75

4.1. Introduction

Les techniques d'imagerie résolues en dessous de la limite de diffraction ont joué un rôle important en biologie en permettant d'étudier l'organisation des tissus à des échelles de l'ordre de la centaine de nanomètres. Les techniques d'imagerie cohérentes permettent de résoudre la structure des cellules. Les techniques d'imagerie par fluorescence permettent de réaliser des cartes d'un certain type de protéines ; les fluorophores étant greffés sur des groupements chimiques spécifiques. La détermination de la structure des cellules et la cartographie de protéines présentent un intérêt en biologie mais les techniques d'imagerie de diffraction et de fluorescence ne sont généralement pas appliquées simultanément à cause de difficultés pratiques. En effet, les techniques d'imagerie de diffraction requièrent la connaissance de l'intensité et de la phase du champ dans le plan focal image du microscope à l'aide d'un montage interférométrique. L'imagerie des fluorophores est quant à elle classiquement réalisée par la microscopie TIRF (TIRF vient de l'anglais Total Internal Reflection Fluorescence) en déposant des cellules sur un substrat de verre et en éclairant

la membrane de ces dernières par un champ électrique évanescent en réflexion totale interne dans le verre. Des premiers montages expérimentaux ont été proposés afin d'effectuer l'imagerie de diffraction et l'imagerie de fluorescence sur un même montage optique[2] mais ce dernier reste toutefois relativement complexe, ce qui tempère l'adoption de l'imagerie multimodale pour des systèmes d'imagerie plus conventionnels.

Nous proposons d'utiliser la méthode d'imagerie tomographique sans mesure de phase présentée dans le chapitre 3 dans la configuration d'imagerie de la microscopie TIRF. On s'affranchit ainsi de l'utilisation d'un montage interférométrique, permettant une configuration d'imagerie commune pour l'imagerie de diffraction et l'imagerie de fluorescence. L'algorithme de reconstruction sera adapté afin de reconstruire également la distribution de fluorophores à partir de l'intensité de fluorescence. Enfin, nous présenterons des premiers résultats sur l'importance de la prise en compte de la diffusion multiple dans la reconstruction des fluorophores.

4.2. Tomographie de diffraction sans mesure de phase en configuration TIRF avec illumination structurée

Dans cette section, nous allons étudier la reconstruction de la permittivité d'un objet donnée par la tomographie de diffraction sans mesure de phase dans des conditions d'imagerie imposées par la microscopie de fluorescence.

L'imagerie de diffraction en configuration d'imagerie TIRF a été réalisée expérimentalement avec des illuminations en ondes planes et le champ en intensité et en phase est restitué avec des techniques similaires à celle utilisées en holographie hors-axe [7]. Ici, cependant, nous souhaitons utiliser des illuminations structurées afin d'obtenir des images super-résolues des fluorophores.

On considère un pavé dans l'air posé sur un substrat de verre, éclairé par un champ évanescent obtenu en éclairant en réflexion totale interne dans le verre à la longueur d'onde $\lambda = 500$ nm. Le pavé est de permittivité 1.7 et de dimensions 450 nm $\times$ 450 nm $\times$ 100nm respectivement selon les axes $\hat{\boldsymbol{x}}$, $\hat{\boldsymbol{y}}$ et $\hat{\boldsymbol{z}}$. Les illuminations sont 9 grilles de lumière d'orientation et de décalage variables [Fig. 4.1 a)] qui sont les illuminations typiquement utilisées en microscopie à illumination structurée. Chaque grille est obtenue en éclairant par deux ondes planes polarisées s formant un angle de 70° avec l'axe optique et dont les composantes transverses du vecteur d'onde incident sont opposées [Fig. 4.1 b)]. L'image plein-champ, de sens inversé à cause de l'objectif et de la lentille de tube, est obtenue en sommant au niveau de chaque pixel de la caméra les intensités mesurées sur toutes les illuminations [Fig. 4.2 c)]. Le pavé est très bien reconstruit par l'algorithme de tomographie de diffraction sans mesure de phase [Fig. 4.2 d)] avec une erreur relative finale sur la reconstruction égale à $\mathrm{Err}(\chi) = 0.206$. Outre la qualité de la reconstruction, ce résultat est remarquable par le fait que la restitution de l'intensité et de la phase du champ diffracté à partir de l'intensité mesurée sur la caméra n'est pas possible par une méthode analytique similaire à celle employée en holographie hors-axe. En effet, pour chaque illumination, les deux ondes planes qui forment la grille de lumière présentent des composantes

transverses du vecteur d'onde incident rigoureusement opposées, de sorte que les ordres de diffraction obtenus pour chacune des deux ondes planes se superposent dans l'espace de Fourier.

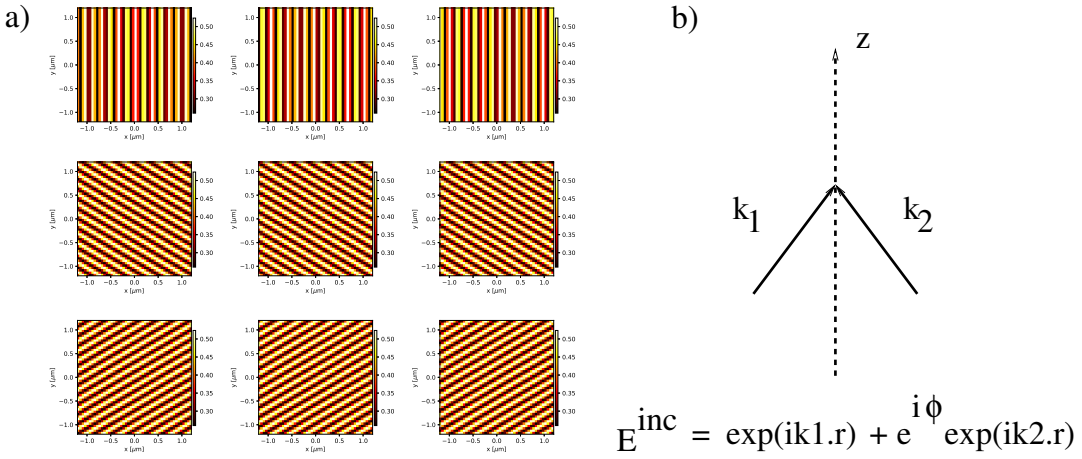

FIGURE 4.1. – a) Les fluorophores sont éclairés successivement par 9 grilles de lumière. b) Chaque grille de lumière est obtenue en faisant interférer deux ondes planes de même polarisation linéaire ayant des vecteurs d'onde aux composantes axiales égales et aux composantes transverses opposées.

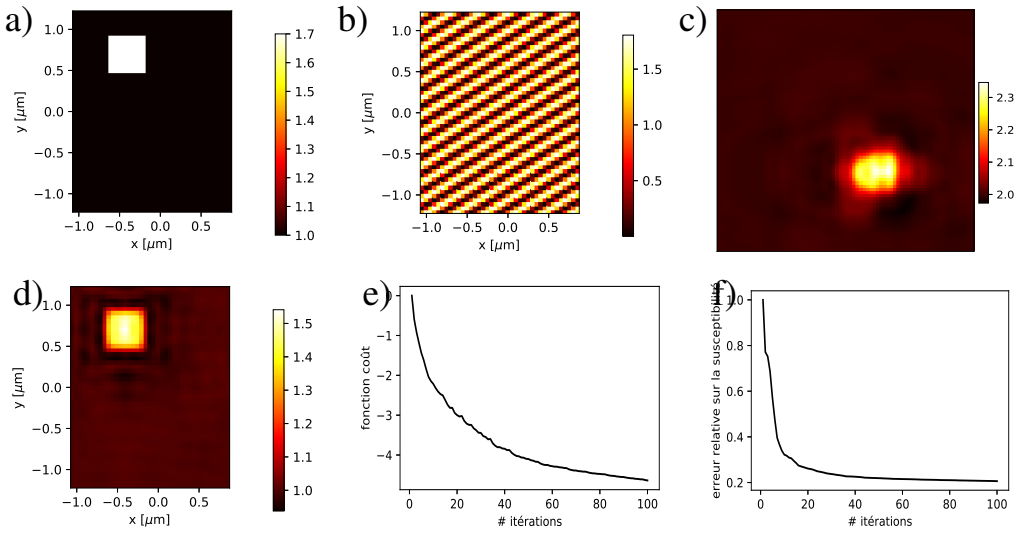

FIGURE 4.2. – a) Un pavé de permittivité 1.7 est posé sur un substrat de verre. b) Le pavé est éclairé en réflection totale interne dans le verre par une grille de lumière à la longueur d'onde $\lambda = 500$ nm. c) L'image plein-champ est obtenue en sommant les intensités mesurées sur les différentes illuminations. d) Le pavé est reconstruit par l'algorithme de tomographie de diffraction sans mesure de phase après 100 itérations. e) Évolution de la fonction coût en fonction des itérations. f) Évolution de l'erreur relative sur la reconstruction en fonction des itérations.

4.3. Microscopie de fluorescence à illumination structurée en configuration TIRF

La microscopie de fluorescence est une technique d'imagerie largement utilisée en biologie pour étudier des tissus à l'échelle des cellules jusqu'aux molécules uniques[12, 9, 8]. Malheureusement, la résolution de cette technique d'imagerie en zone lointaine est fondamentalement limitée par le processus de diffraction. Les microscopes confocaux fonctionnant en déplaçant le point de focalisation obtiennent une résolution latérale (perpendiculaire l'axe optique) au mieux égale à $\lambda/3$, où λ est la longueur d'onde d'illumination, c'est-à-dire plusieurs centaines de nanomètres[3]. Ainsi, l'amélioration de la résolution spatiale des microscopes de fluorescence en zone lointaine en dessous de 100 nm représente un défi majeur de la dernière décennie et a suscité l'émergence de nombreuses techniques innovantes[6]. La microscopie à illumination structurée a montré son potentiel pour améliorer la résolution à la fois pour les directions latérales (perpendiculaires à l'axe optique) et les directions axiales (le long de l'axe optique) tout en conservant une configuration plein-champ[11]. Dans cette approche, l'échantillon est illuminé par une grille de lumière périodique venant de l'interférence de deux ou trois faisceaux cohérents. Les images de l'échantillon sont enregistrées pour différentes positions de la grille, et la densité de fluorophores est estimée numériquement en utilisant un algorithme d'inversion[5]. Plus la période de la grille de lumière est petite, meilleure est la résolution.

L'image de fluorescence $I^{\text{fluo}}(\boldsymbol{o})$ en tout point d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ donnée par un système imageur linéaire se modélise classiquement par

$$I^{\text{fluo}}(\boldsymbol{o}) \quad = \quad \int \mathrm{d}z \overline{\mathbf{H}}(\cdot, z) \circledast_{x,y} [\rho I](\cdot, z), \tag{4.1}$$

où $\overline{\mathbf{H}}$ est la PSF du système imageur, $\rho(\boldsymbol{r} \in \Omega)$ est la distribution de fluorophores, $I(\boldsymbol{r} \in \Omega)$ est l'intensité du champ excitant les fluorophores et $\circledast_{x,y}$ est le produit de convolution 2D dans les directions orthogonales à l'axe optique. La configuration d'imagerie TIRF consiste à éclairer l'échantillon à imager par un champ évanescent avec des angles d'incidence supérieurs à l'angle de réfraction critique de l'interface verre/air. La décroissance rapide de l'intensité d'excitation lorsque l'on s'éloigne de l'interface permet d'exciter les fluorophores uniquement dans une couche de faible épaisseur et proche du substrat. L'intégrale selon l'axe optique du signal de fluorescence (Eq. (4.1)) disparaît et la détermination de la distribution de fluorophores est réduite à un problème de déconvolution.

A la configuration d'imagerie de diffraction décrite à la section 4.2, on ajoute une couche de fluorophores homogène située au dessus du pavé de permittivité, à 150 nm du substrat de verre. La couche de fluorescence a pour dimensions 350 nm $\times$ 1950 nm $\times$ 50 nm, respectivement selon les axes $\hat{\boldsymbol{x}}$, $\hat{\boldsymbol{y}}$ et $\hat{\boldsymbol{z}}$ [Fig.4.3 d)]. Pour chacune des grilles de lumière, l'image d'intensité de fluorescence est mesurée sur une caméra qui est placée dans le plan focal image d'un microscope. L'image de fluorescence plein-champ peut-être calculée en sommant les images d'intensités pour chacune des illuminations [Fig.4.3 e)]. Elle est inversée à cause du grandissement négatif associé au système formé par l'objectif du microscope et la lentille de tube. Un algorithme de reconstruction standard estime la distribution de fluorophores à partir des intensités

de fluorescence mesurées [Fig.4.3 f)]. Les contours de la bande de fluorophores est relativement bien reconstruite, comparé à l'image de fluorescence plein-champ que l'on observerait de manière analogique dans le plan focal image du microscope [Fig.4.3 e)]. L'homogénéité de la bande de fluorophores n'est pas restituée dans la zone proche du pavé de permittivité. Cela est dû au fait que le milieu qui entoure les fluorophores et la diffusion multiple qui en résulte ne sont pas pris en compte dans le processus de reconstruction. La déconvolution du signal de fluorescence permet d'obtenir la distribution de source de fluorescence ρI. Dans la zone où l'intensité qui éclaire les fluorophores est exaltée, l'illumination incidente [Fig.4.3 b)] sous-estime l'intensité effectivement présente dans le milieu [Fig.4.3 c)] et induit ainsi une surestimation de la densité de fluorophores ρ.

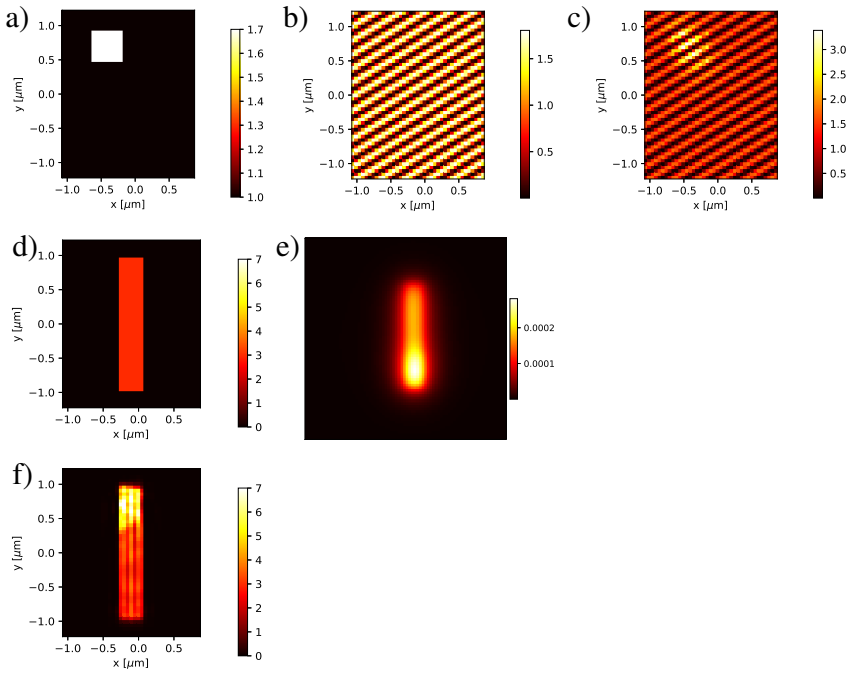

FIGURE 4.3. – Un pavé de permittivité 1.7 (a) est éclairé par des grilles de lumière ($\lambda = 500$ nm) (b). Ces dernières sont modifiées lors de leur propagation dans le milieu dû à la diffusion multiple (c). Une bande de fluorophores est placée au-dessus du pavé de permittivité, à une hauteur de 150 nm du substrat de verre (d). L'image plein-champ de fluorescence est obtenue en sommant les intensités sur la caméra pour chaque illumination (e). Cette dernière est de sens inversé par rapport à l'objet de fluorescence à cause du grandissement négatif du microscope. Un algorithme de reconstruction standard estime la distribution de fluorophores à partir des intensités de fluorescence mesurées (f).

4.4. Modélisation de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores à l'aide de la tomographie de diffraction sans mesure de phase

Nous avons montré aux sections 4.2 et 4.3 qu'il est possible de reconstruire en configuration d'imagerie TIRF à la fois la densité de fluorophores à partir des intensités de fluorescence et le milieu qui entoure ces fluorophores à partir de l'intensité de diffraction. À la section précédente, nous avons mis en avant le fait que ne pas modéliser correctement l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores induit une moins bonne estimation de la densité de fluorescence.

Nous proposons dans cette section d'utiliser l'estimation du milieu obtenue en appliquant la tomographie de diffraction sans mesure de phase afin de modéliser plus fidèlement l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores. Cette dernière peut ainsi être estimée en résolvant le problème de diffraction

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l) \quad = \quad \boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}(\boldsymbol{r},l) + \int_{\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \; \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\tilde{\chi}(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',l), \tag{4.2}$$

où $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref}}$ est le champ en l'absence du milieu qui environnent les fluorophores, $\tilde{\chi}$ est le contraste du milieu estimé à partir des intensités de diffraction ; puis en calculant l'intensité associée $I(\boldsymbol{r},l) = \left|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\right|^2$.

Pour illustrer cette approche, nous reprenons la configuration d'imagerie présentée dans les sections 4.2 et 4.3. La tomographie de diffraction sans mesure de phase permet d'estimer l'objet de permittivité à partir des intensités diffractées [Fig. 4.4 g)]. À partir de cette estimation du milieu et de la grille de lumière, la résolution d'un problème de diffraction (Eq. (4.2)) permet d'estimer l'intensité excitatrice au niveau des fluorophores [Fig. 4.4 i)], avec une relativement bonne précision en comparant avec l'intensité exacte [Fig. 4.4 c)]. La densité de fluorophores peut être reconstruite à partir des intensités de fluorescence et de l'intensité excitatrice estimée [Fig. 4.4 j)]. On note que la région d'inhomogénéité a été considérablement réduite par rapport à la reconstruction sans connaissance du milieu [Fig. 4.4 k)].

La présence de la diffusion multiple est classiquement considérée comme un frein important à l'application des techniques de super-résolution en microscopie de fluorescence. Ces dernières nécessitent la connaissance précise de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores pour estimer correctement la densité de fluorophores. Cette hypothèse est vérifiée dans des milieux peu diffusants où l'approximation de Born (voir chapitre 1) est valide. La prise en compte de la diffusion dans le milieu grâce à la tomographie de diffraction sans mesure de phase devrait améliorer les techniques d'imagerie existantes et étendre l'application de ces techniques à des milieux où la diffusion multiple n'est plus négligeable.

Le gain en résolution obtenu par les techniques de microscopie par illuminations structurées par rapport à la microscopie de fluorescence plein-champ conventionnelle est basé sur la capacité à récupérer les hautes fréquences spatiales de $\rho(\boldsymbol{r})$ en éclairant les fluorophores avec des illuminations contenant de hautes fréquences spatiales (typiquement des grilles de lumière). Il a été montré numériquement[1] et expérimentalement[10, 4] que la diffusion multiple enrichit le contenu spectral

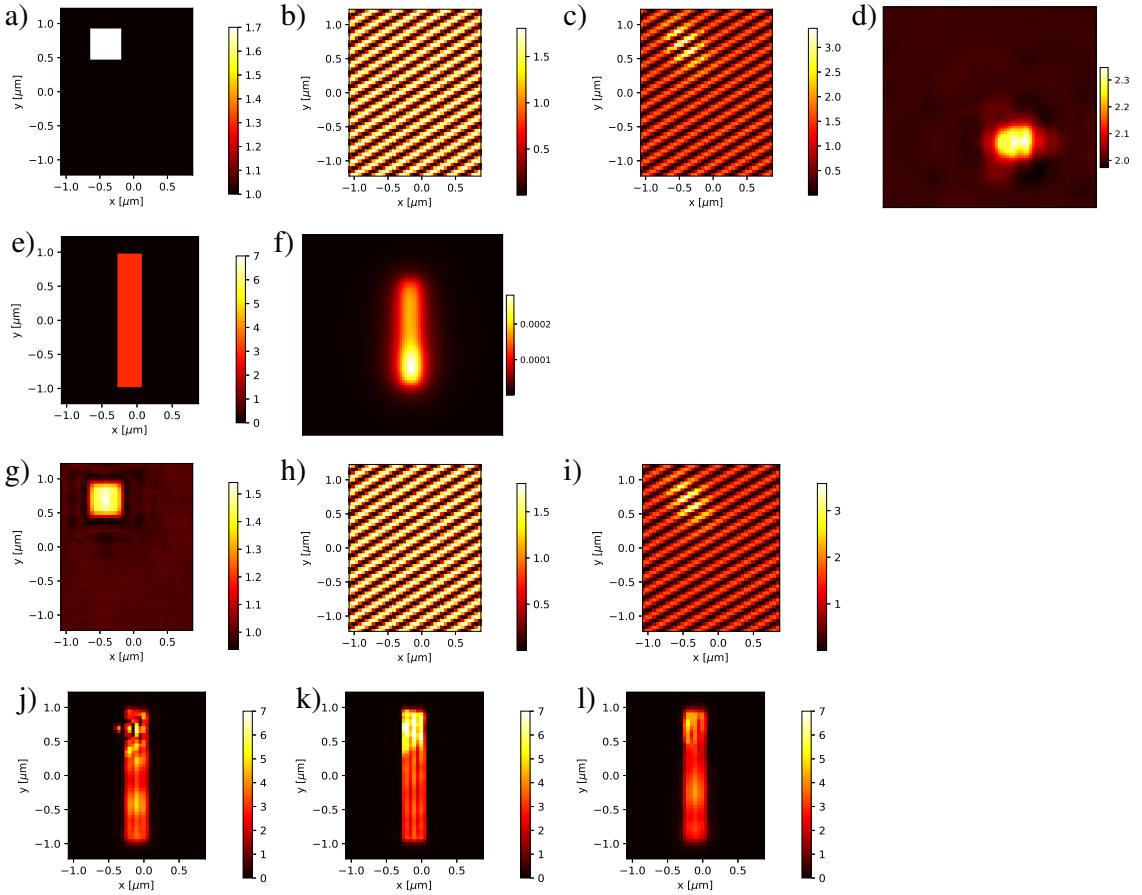

FIGURE 4.4. – Un pavé de permittivité posé sur un substrat de verre (a) est illuminé en configuration TIRF avec un grille de lumière ($\lambda = 500$ nm) (b). L'illumination incidente est altérée lors de sa propagation à cause de la diffusion multiple (c). L'image de diffraction plein-champ est obtenue en sommant les intensités diffractées pour chaque illumination (d). Une bande de fluorophores est placée au-dessus de l'objet de permittivité, à 150 nm du substrat (e). L'image de fluorescence plein-champ est obtenue en sommant les intensités de fluorescence pour chaque illumination (f). Les images de diffraction et de fluorescence plein-champ sont de sens inversé par rapport aux objets à cause du grandissement négatif du microscope. La tomographie de diffraction sans mesure de phase permet d'estimer l'objet de permittivité (g). Ce dernier, éclairé par la grille de lumière (h), permet d'estimer l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores (i). La densité de fluorophores est reconstruite (j) à partir de l'estimation de l'illumination (i) et des intensités de fluorescence (f). Ce résultat est à comparer aux reconstructions sans connaissance du milieu (k) et à celle en connaissant exactement l'illumination au niveau des fluorophores (l).

de l'illumination avec des fréquences spatiales élevées et augmente le pouvoir de résolution des systèmes imageurs. La prise en compte de la diffusion multiple dans

la modélisation de l'illumination devrait ainsi permettre d'accéder à des fréquences spatiales de $\rho(\boldsymbol{r})$ encore plus grandes que celles accessibles par la microscopie par illumination structurée classique. Nous illustrons ce propos avec l'exemple suivant. Une mire de permittivité posée sur un substrat de verre [Fig. 4.5 a)], est éclairée en configuration TIRF par des grilles de lumière [Fig. 4.5 b)]. A cause de la diffusion multiple, la grille de lumière est perturbée [Fig. 4.5 c)] et éclaire une mire de fluorescence [Fig. 4.5 d)]. La reconstruction de la mire de fluorescence avec l'illumination excitatrice exacte [Fig. 4.5 g)] est significativement plus résolue que celle obtenue par la microscopie de fluorescence à illumination structurée classique qui ne tient pas compte du milieu environnant les fluorophores [Fig. 4.5 f)].

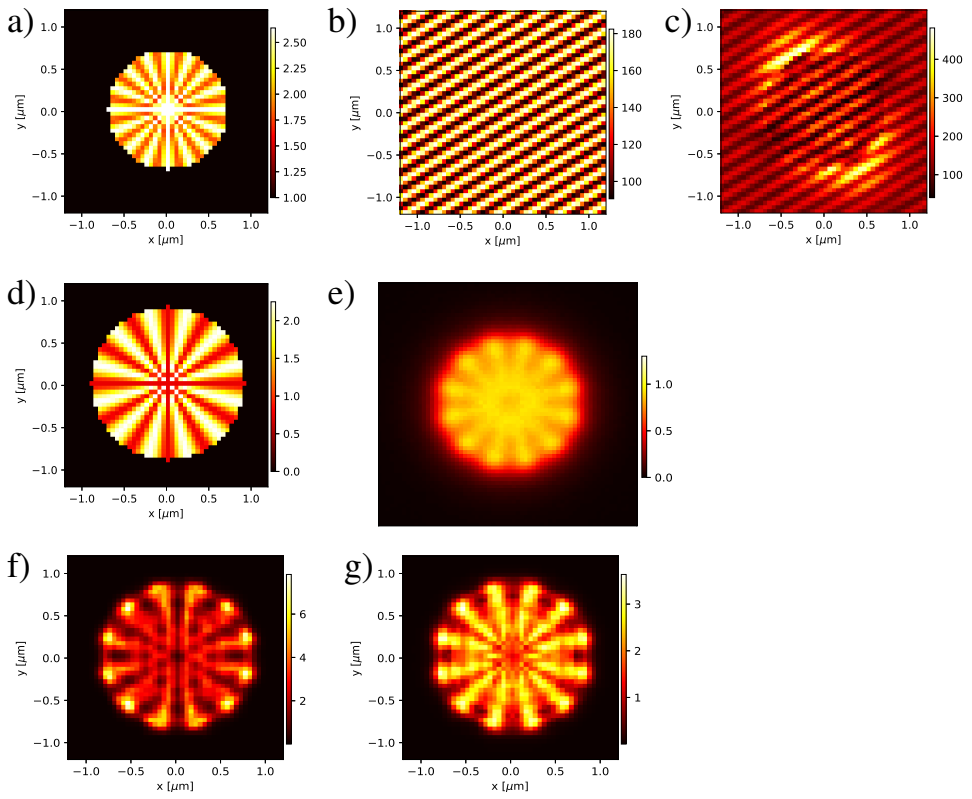

FIGURE 4.5. – a) Une mire de permittivité posée sur un substrat de verre. b) Exemple d'une grille de lumière c) Même grille de lumière qu'en b) modifiée par la présence de la mire de permittivité. d) Une mire de fluorophores à reconstruire. e) Image de fluorescence mesurée dans le plan focal image du microscope récoltée en réflexion dans le verre. f) Estimation des fluorophores sous l'approximation de Born. g) Estimation des fluorophores en calculant rigoureusement la diffusion multiple. Le niveau de bruit sur les mesures est de 15%. La distribution de fluorophores a été initialisée constante égale à 0.0001.

4.5. Reconstruction conjointe des fluorophores et du milieu qui les entoure

Dans la section 4.4, nous avons montré qu'il est possible de construire un microscope bimodal qui à partir des intensités de diffraction et de fluorescence estime la densité de fluorescence et le milieu qui les entoure. La permittivité du milieu a été dans un premier temps estimée, puis a contribué à la reconstruction des fluorophores en permettant la prise en compte de la diffusion multiple dans la modélisation de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores. Nous remarquons que les deux problèmes de reconstruction, celui de diffraction et celui de fluorescence, sont liés par une grandeur physique commune qui est l'intensité excitatrice au niveau des fluorophores. En effet, l'intensité de fluorescence dépend de l'intensité excitatrice au niveau des fluorophores, qui dépend par la diffusion multiple de la permittivité du milieu.

Dans cette section, je propose un algorithme de reconstruction qui estime itérativement et de manière conjointe le milieu et les fluorophores à partir de la mesure des intensités de diffraction et de fluorescence. L'implémentation de l'algorithme n'est pour l'heure pas encore figée et les recherches menées sur cette idée sont encore exploratoires. Pour ces raisons, je ne présenterai que la théorie de la méthode de reconstruction.

4.5.1. Le modèle direct

Un fluorophore est une molécule qui a la propriété d'absorber des photons à une longueur d'onde d'excitation donnée et d'en réémettre à des longueurs d'onde plus grandes. La fluorescence fait intervenir une désexcitation non radiative de niveau d'énergie hauts suivi d'une désexcitation radiative vers des niveaux vibrationnels du fluorophore [Fig. 4.6]. Ainsi, l'émission de la fluorescence est effectuée à des longueurs d'onde plus grandes que celle de l'illumination excitatrice. Le décalage en longueur d'onde entre l'excitation et l'émission, appelé décalage de Stokes, est dû essentiellement à la composition chimique des fluorophores. Ainsi, la microscopie de fluorescence permet de réaliser des cartes de concentration de molécules bien spécifiques présentes dans un milieu. La microscopie de fluorescence est particulièrement utilisée pour imager des tissus biologiques. La possibilité de greffer certains fluorophores sur des zones spécifiques dans des cellules permet d'étudier comment ces dernières sont structurées.

Dans la suite, nous faisons deux approximations sur l'émission de la fluorescence :

— Le décalage de Stokes impose une émission de photons de fluorescence sur toute une plage spectrale. Sa prise en compte requiert la résolution d'autant de problèmes direct de fluorescence qu'il y a de longueurs d'onde d'émission. Pour réduire les temps de calcul, nous ne prenons pas en compte le décalage de Stokes dans le modèle direct et considérons que l'émission de l'intensité de fluorescence se fait à la même longueur d'onde que celle de l'illumination d'excitation du fluorophore.

— L'émission de la fluorescence est spatialement incohérente ce qui signifie que les champs électriques rayonnés par deux fluorophores distincts n'interfèrent pas. L'intensité de fluorescence captée sur la caméra est la somme des intensités

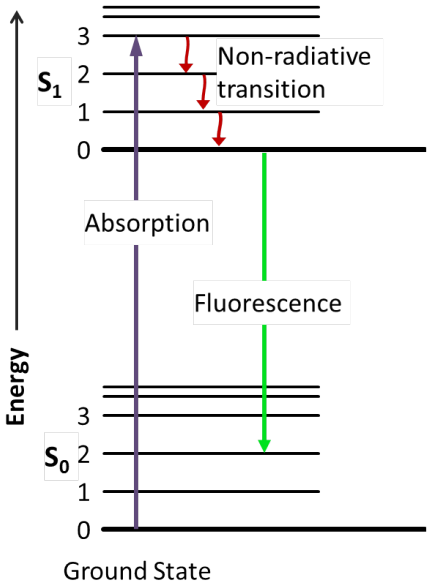

FIGURE 4.6. – Le diagramme de Perrin-Jablonski décrit les mécanismes de conversion d'énergie à l'œuvre dans l'émission de la fluorescence. Les niveaux d'énergie du fluorophores sont représentés. Les photons qui excitent le fluorophore sont absorbés et des électrons de l'état fondamental (ground state S_{00}) partent peupler un niveau d'énergie haut (S_{13}). Des désexcitations non-radiatives transfèrent ces électrons vers un niveau d'énergie plus bas (S_{10}). Une désexcitation radiative vers des niveaux vibrationnels du fluorophore (S_{03},S_{02},S_{01}...) donne lieu à l'émission des photons de fluorescence. L'écart d'énergie entre l'absorption des photons excitateurs et l'émission des photons de fluorescence est le décalage de Stokes.

rayonnées individuellement par chacun des fluorophores. Les fluorophores sont entourés par un milieu de permittivité hétérogène de sorte qu'il faudrait résoudre un problème de diffraction pour chaque fluorophore afin de calculer l'intensité de fluorescence émise par ce dernier. Une telle approche rendrait le temps de calcul de l'intensité de fluorescence sur la caméra exorbitant. C'est pourquoi nous appliquons l'approximation de Born lors de l'émission de la fluorescence, c'est-à-dire que l'émission de la lumière par le fluorophore est effectuée en l'absence de l'objet de permittivité.

À la configuration de diffraction usuelle décrite à la section 1.2, on considère une distribution de fluorophores $\rho(\boldsymbol{r})$ qui se superpose à la permittivité du milieu $\varepsilon(\boldsymbol{r}) = \chi(\boldsymbol{r}) + \varepsilon^{\text{ref}}(\boldsymbol{r})$. Le domaine d'investigation Ω est choisi suffisamment grand pour que tous les fluorophores y soit à l'intérieur [Fig. 4.7]. Résoudre le problème direct consiste à calculer les intensités de diffraction et de fluorescence au niveau des points d'observation du domaine Γ pour chacune des illuminations. Le calcul de l'intensité de diffraction a déjà été traité dans le chapitre sur la tomographie de

diffraction sans mesure de phase (chapitre 3).

L'intensité $|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,l)|^2$ induit en tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$ une distribution de sources induites pour la fluorescence $\rho(\boldsymbol{r})\,|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\chi,l)|^2$ qui rayonne l'intensité de fluorescence $I^{\text{fluo}}(\boldsymbol{o})$ en tout point d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$. Sous les deux approximations énoncées plus haut, l'intensité émise par les fluorophores est

$$I^{\text{fluo}}(\boldsymbol{o},\rho,\chi,l) \;=\; \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{H}}\big(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}'\big)\rho\big(\boldsymbol{r}'\big)\Big|\boldsymbol{E}\big(\boldsymbol{r}',\chi,l\big)\Big|^2, \tag{4.3}$$

où $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ est un point d'observation, et $\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})$ est la fonction de Green scalaire de fluorescence qui correspond à l'intensité diffractée par une source en moyennant l'orientation du dipôle sur les trois directions principales de l'espace. Ainsi, pour une source ponctuelle de fluorescence u placée en $\boldsymbol{r}' \in \Omega$,

$$\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})u = \tfrac{1}{3}\textstyle\sum_{\boldsymbol{i}=\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}}\Big|\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})\boldsymbol{i}\Big|^2 u \;=\frac{1}{3}\sum_{i,j=\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}}\Big|\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}_{i,j}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})\Big|^2 u. \tag{4.4}$$

où $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{mic}}$ est la fonction de Green du microscope pour la diffraction.

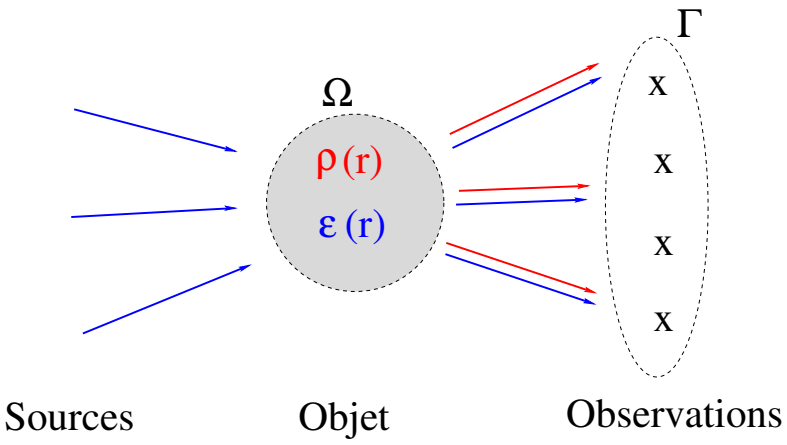

FIGURE 4.7. – Configuration d'imagerie. Une source éclaire un objet $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ et des fluorophores $\rho(\boldsymbol{r})$ situés à l'intérieur d'un domaine d'investigation Ω. Les intensités de diffraction (bleu) et de fluorescence (rouge) sont mesurées au niveau de points d'observation.

4.5.2. L'algorithme de reconstruction

L'algorithme de reconstruction estime la permittivité $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ et la distribution de fluorophores $\rho(\boldsymbol{r})$ en tout point $\boldsymbol{r}$ d'un domaine d'investigation Ω à partir des intensités mesurées de diffraction $\Big\{I^{\text{scat,mes}}(l)\Big\}_l$ et de fluorescence $\Big\{I^{\text{fluo,mes}}(l)\Big\}_l$ en minimisant la fonction coût suivante

$$\mathcal{F}(\chi,\rho) \;=\; \mathcal{F}^{\text{scat}}\big(\chi\big) + \mathcal{F}^{\text{fluo}}\big(\chi,\rho\big), \tag{4.5}$$

où $\mathcal{F}^{\text{scat}}$ est la fonction coût sur les intensités de diffraction

$$\mathcal{F}^{\text{scat}}\Big(\chi\Big) \quad = \quad W^{\text{scat}} \sum_l \left\| I^{\text{scat,mes}}(l) - \Big|\boldsymbol{E}\Big|^2(\chi, l) \right\|_\Gamma^2, \tag{4.6}$$

avec $W^{\text{scat}} = \left(\sum_l \left\| I^{\text{scat,mes}}(l) \right\|_\Gamma^2 \right)^{-1}$ et où $\mathcal{F}^{\text{fluo}}$ est la fonction coût sur les intensités de fluorescence

$$\mathcal{F}^{\text{fluo}}\Big(\chi, \rho\Big) \quad = \quad W^{\text{fluo}} \sum_l \left\| I^{\text{fluo,mes}}(l) - \overline{\mathbf{H}}\rho \Big|\boldsymbol{E}(\chi, l)\Big|^2 \right\|_\Gamma^2, \tag{4.7}$$

où $\overline{\mathbf{H}}\rho\,|\boldsymbol{E}(\chi, l)|^2$ est l'écriture de Eq. (4.3) en notation opérateur (section 2.4.1) et $W^{\text{fluo}} = \left(\sum_l \left\| I^{\text{fluo,mes}}(l) \right\|_\Gamma^2 \right)^{-1}$. Pour toute illumination l et tout point d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$, on introduit les résidus des fonctions coût de diffraction $h(\boldsymbol{o}, \chi, l) = I^{\text{scat,mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \Big|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o}, \chi, l)\Big|^2$ et de fluorescence $q(\boldsymbol{o}, \chi, \rho, l) = I^{\text{fluo,mes}}(\boldsymbol{o}, l) - \overline{\mathbf{H}}\rho \Big|\boldsymbol{E}(\chi, l)\Big|^2(\boldsymbol{o})$ qui seront utiles par la suite. On notera que la fonction de coût associée à la tomographie ne dépend que du contraste χ tandis que la fonction coût associée à la fluorescence dépend de ρ mais aussi du contraste.

La minimisation de la fonction coût est effectuée de la manière décrite dans la section 2.3 à savoir par le calcul de l'erreur $\mathcal{F}(\chi, \rho)$ pour une estimation donnée de la permittivité $\varepsilon(\boldsymbol{r}) = \varepsilon^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}) + \chi(\boldsymbol{r})$ et de la distribution de fluorophores $\rho(\boldsymbol{r})$ (étape 1) et par la correction de $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ et $\rho(\boldsymbol{r})$ de sorte que $\mathcal{F}(\chi, \rho)$ décroisse (étape 2). Nous allons maintenant détailler le calcul des gradients g_χ et g_ρ de la fonction coût par rapport respectivement à χ et à ρ.

Le gradient g_χ est la somme de g_χ^{scat} et g_χ^{fluo}, gradients par rapport à χ respectivement des fonctions coût $\mathcal{F}^{\text{scat}}$ et $\mathcal{F}^{\text{fluo}}$. Le gradient g_χ^{scat} a déjà été calculé dans la section 3.3 et est donné par Eq. (3.4). Nous rappelons que l'opérateur de Fréchet $\overline{\mathbf{D}}_\chi$ qui donne la variation du champ électrique au premier ordre pour une perturbation $\delta\chi$ du contraste du milieu est connu (section 2.4). Nous pouvons ainsi écrire le développement de Taylor à l'ordre 1 de $\mathcal{F}^{\text{fluo}}$ par rapport à χ,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}^{\text{fluo}}\Big(\chi + \delta\chi\Big) \quad &= \quad W^{\text{fluo}} \sum_l \left\| I_l^{\text{fluo,mes}} - \overline{\mathbf{H}}\rho \Big|\boldsymbol{E}(\chi, l) + \overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi + o(\delta\chi)\Big|^2 \right\|_\Gamma^2, \\
&= \quad W^{\text{fluo}} \sum_l \left\| q(l) - 2\text{Re}\Big[\overline{\mathbf{H}}\rho\boldsymbol{E}^*(l) \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\Big] + o\Big(\delta\chi\Big) \right\|_\Gamma^2, \\
&= \quad \mathcal{F}^{\text{fluo}}(\chi) - 4W^{\text{fluo}} \sum_l \text{Re}\Big\langle q(l), \text{Re}\Big[\overline{\mathbf{H}}\rho\boldsymbol{E}^*(l) \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\Big] \Big\rangle_\Gamma + o\Big(\delta\chi\Big), \\
&= \quad \mathcal{F}^{\text{fluo}}(\chi) - 4W^{\text{fluo}} \sum_l \text{Re}\Big\langle q(l), \overline{\mathbf{H}}\rho\boldsymbol{E}^*(l) \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi \Big\rangle_\Gamma + o\Big(\delta\chi\Big),
\end{aligned}$$

la dernière ligne venant du fait que $q(l)$ est réel. La variation de $\mathcal{F}^{\text{fluo}}$ à l'ordre 1

s'écrit

$$\begin{aligned}\left\langle q(l), \overline{\mathbf{H}}\rho\boldsymbol{E}^*(l)\cdot\overline{\mathbf{D}}_\chi(l)\delta\chi\right\rangle_\Gamma &= \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; q(\boldsymbol{o},l)\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{r},l)\cdot\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',l)\delta\chi(\boldsymbol{r}'),\\ &= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\delta\chi(\boldsymbol{r}')\left(\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\;\left[\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; q(\boldsymbol{o},l)\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})\right]\rho(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{r},l)\cdot\overline{\mathbf{D}}_\chi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',l)\right)\end{aligned}$$

d'où l'expression

$$g_\chi^{\mathrm{fluo}}(\boldsymbol{r}') = W^{\mathrm{fluo}}\sum_l\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\; t(\boldsymbol{r},l)\rho(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\cdot\overline{\mathbf{D}}_\chi^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',l), \tag{4.8}$$

avec $t(\boldsymbol{r},l) = \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; q(\boldsymbol{o},l)\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})$.

Finalement, l'expression du gradient de la fonction coût par rapport à χ est

$$\begin{aligned}g_\chi(\boldsymbol{r}) &= g_\chi^{\mathrm{scat}}(\boldsymbol{r}) + g_\chi^{\mathrm{fluo}}(\boldsymbol{r}),\\ &= W^{\mathrm{scat}}\sum_l\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; h(\boldsymbol{o},l)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},l)\cdot\overline{\mathbf{D}}_\chi^*(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r},l)\\ &+ W^{\mathrm{fluo}}\sum_l\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\; t(\boldsymbol{r}',l)\rho(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',l)\cdot\overline{\mathbf{D}}_\chi^*(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},l),\end{aligned} \tag{4.9}$$

pour tout point $\boldsymbol{r}$ du domaine d'investigation Ω. L'expression de l'opérateur de Fréchet par le théorème de réciprocité (voir section 2.4.4) permet d'écrire le gradient sous la forme

$$g_\chi(\boldsymbol{r}) = \sum_l\left[\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\cdot\left(\boldsymbol{E}\left(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^1,l\right)+\boldsymbol{E}\left(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^2,l\right)\right)\right]^*, \tag{4.10}$$

où $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^1,l)$ et $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^2,l)$ pour tout point $\boldsymbol{r}\in\Omega$ sont solutions des problèmes de diffraction

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^1,l) &= \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})h(\boldsymbol{o},l)\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{o},l) + \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^1),\\ \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{s}^2,l) &= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')t(\boldsymbol{r}',l)\rho(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}^*(\boldsymbol{r}',l) + \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{s}^2).\end{aligned}$$

Pour gagner du temps dans le calcul du champ $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^1,l)+\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{s}^2,l)$, j'exploite la linéarité du champ électrique par rapport aux sources et je résous seulement le problème de diffraction pour le champ incident adjoint effectif $\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref,\ adjoint}}(\boldsymbol{r},l)$ défini en tout point $\boldsymbol{r}\in\Omega$ par

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{ref,\ adjoint}}(\boldsymbol{r},l) = \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})h(\boldsymbol{o},l)\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o},l) + \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\;\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')t(\boldsymbol{r}',l)\rho(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}',l).$$

De manière analogue au calcul de g_χ, on calcule le gradient g_ρ en linéarisant $\mathcal{F}^{\mathrm{fluo}}$

par rapport à ρ,

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^{\text{fluo}}\Big(\rho+\delta\rho\Big) &= W^{\text{fluo}}\sum_l \Big\|I^{\text{fluo,mes}} - \overline{\mathbf{H}}\Big|\boldsymbol{E}(l)\Big|^2\Big(\rho+\delta\rho\Big) + o\Big(\delta\rho\Big)\Big\|_\Omega^2,\\ &= \mathcal{F}^{\text{fluo}}\Big(\rho\Big) - 2W^{\text{fluo}}\sum_l \text{Re}\Big\langle q(l), \overline{\mathbf{H}}\Big|\boldsymbol{E}(l)\Big|^2\delta\rho\Big\rangle_\Gamma + o\Big(\delta\rho\Big),\end{aligned}$$

et en explicitant la variation de $\mathcal{F}^{\text{fluo}}$ à l'ordre 1,

$$\begin{aligned}\Big\langle q(l), \overline{\mathbf{H}}\Big|\boldsymbol{E}(l)\Big|^2\delta\rho\Big\rangle_\Gamma &= \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; q(\boldsymbol{o},l)\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\;\Big|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\Big|^2\delta\rho(\boldsymbol{r}),\\ &= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}\delta\rho\Big(\boldsymbol{r}\Big)\Big(\Big|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\Big|^2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\;\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})q(\boldsymbol{o},l)\Big),\end{aligned}$$

Le gradient g_ρ est égal à

$$g_\rho\Big(\boldsymbol{r}\Big) = W^{\text{fluo}}\sum_l \Big|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\Big|^2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\;\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})q(\boldsymbol{o},l), \tag{4.11}$$

qui s'interprète comme le produit d'une intensité directe $\Big|\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\Big|^2$ et d'une intensité adjointe $\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\;\overline{\mathbf{H}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})q(\boldsymbol{o},l)$.

Les estimations de l'objet et des fluorophores sont mises à jour itérativement selon les relations suivantes

$$\chi_{n+1} = \chi_n + \alpha_n\Big(g_\chi\Big)_n, \tag{4.12}$$

$$\rho_{n+1} = \rho_n + \beta_n\Big(g_\rho\Big)_n. \tag{4.13}$$

avec α_{n+1} et β_{n+1} sont réels.

La distribution de fluorophores $\rho(\boldsymbol{r})$ est toujours positive aussi nous imposons une condition de positivité en posant $\rho(\boldsymbol{r}) = \eta^2(\boldsymbol{r})$ où $\eta(\boldsymbol{r})$ est une distribution à valeur réelles. Dans ce cas, la relation de mise à jour sur ρ (Eq. (4.13)) est remplacée par la relation sur η suivante

$$\eta_{n+1} = \eta_n + \gamma_n\Big(g_\eta\Big)_n, \tag{4.14}$$

où γ_n est un réel et g_η est le gradient de la fonction coût par rapport à η. Par différentiation composée, on a $g_\eta = (2\eta)\cdot g_\rho$.

Afin d'améliorer d'accélérer la convergence de la fonction coût, l'algorithme utilise un gradient conjugué avec les directions de descentes Polak-Ribière (section 2.6.7). Les coefficients de minimisation α, β et γ qui interviennent dans les Eqs. (4.12), (4.13) et (4.14) sont calculés en minimisant un polynôme.

4.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons appliqué la tomographie de diffraction sans mesure de phase développée au chapitre 3 à la microscopie de fluorescence TIRF à illumination structurée dans l'objectif de construire un microscope bimodal. Ce dernier doit

permettre à l'aide d'un microscope optique conventionnel d'estimer quantitativement des fluorophores et le milieu qui les entoure. Dans la configuration TIRF avec illumination structurée, nous avons démontré la faisabilité de construire séparément les fluorophores à partir de l'intensité de fluorescence et la permittivité du milieu à partir de l'intensité de diffraction. Afin d'améliorer l'estimation de la densité de fluorophores, nous avons ensuite utilisé la reconstruction du milieu fournie par la tomographie de diffraction sans mesure de phase pour modéliser l'intensité excitatrice au niveau des fluorophores en prenant en compte la diffusion multiple. Remarquant que les problèmes d'imagerie de diffraction et de fluorescence sont couplés par le biais de l'intensité excitatrice, nous avons proposé une méthode de reconstruction qui estime itérativement et de manière conjointe les fluorophores et le milieu.

Bibliographie

[1] K. Belkebir, P. C. Chaumet et A. Sentenac. ■ Influence of multiple scattering on three-dimensional imaging with optical diffraction tomography ■. In : *J. Opt. Soc. Am. A* 23 (2006), p. 586-595.

[2] Shwetadwip Chowdhury, Will J. Eldridge, Adam Wax et al. ■ Structured illumination multimodal 3D-resolved quantitative phase and fluorescence sub-diffraction microscopy ■. In : *Biomedical Optics Express* 8.5 (avr. 2017), p. 2496.

[3] G. Cox et C. J. R. Sheppard. ■ Practical limits of resolution in confocal and non-linear microscopy ■. In : *Micros. Res. Tech.* 63 (2004), p. 18-22.

[4] Jules Girard, Guillaume Maire, Hugues Giovannini et al. ■ Nanometric resolution using far-field optical tomographic microscopy in the multiple scattering regime ■. In : *Phys. Rev. A* 82.6 (déc. 2010), p. 061801.

[5] R. Heintzmann et C. Cremer. ■ Laterally modulated excitation microscopy : improvement of resolution by using a diffraction grating ■. In : *Proc. SPIE, Optical Biopsies and Microscopic Techniques III* 3568 (2007), p. 185-196.

[6] S. W. Hell. ■ Far-field optical nanoscopy ■. In : *Science* 25 (2007), p. 1153-1158.

[7] Guillaume Maire, Hugues Giovannini, Anne Talneau et al. ■ Phase imaging and synthetic aperture super-resolution via total internal reflection microscopy ■. In : *Optics Letters* 43.9 (avr. 2018), p. 2173.

[8] F. W. D. Rost. *Fluorescence microscopy.* T. II. Cambridge University Press, 1995.

[9] F. W. D. Rost. *Fluorescence microscopy.* T. I. 052123641-X : Cambridge University Press, 1996.

[10] F. Simonetti. ■ Multiple scattering : The key to unravel the subwavelength world from the far-field pattern of a scattered wave ■. In : *Phys. Rev. E* 73 (2006), p. 036619-13.

[11] A. Stemmer, M. Beck et R. Fiokla. ■ Widefield fluorescence microsocpy with extended resolution ■. In : *Histochem Cel. Biol.* 130 (2008), p. 807-617.

[12] C. Zander, J. Enderlein et R. A. Keller, éd. *Single molecule detection in solution : methods and applications.* Wiley-VCH Verlag, 2003.

5. Conclusion et perspectives

Le premier pas est le dernier pas.

Jiddu Krishnamurti

La tomographie de diffraction optique, aussi appelée microscopie par tomographie de diffraction (MTD), est une technique d'imagerie qui permet d'estimer quantitativement la permittivité d'un milieu. Le milieu sondé est éclairé successivement sous différentes illuminations et pour chaque illumination, le champ diffracté est mesuré au niveau de récepteurs. Une méthode d'inversion reconstruit ensuite la distribution de permittivité du milieu dans un volume donné à partir du jeu de mesures tomographique.

La MTD présente de nombreux avantages par rapport aux techniques d'imagerie analogiques : reconstruction tridimensionnelle, résolution au-delà de la limite de diffraction, traitement de données hétérogènes, introduction d'information *a priori* dans le processus de reconstruction...

Malgré son apparition dans le domaine de la microscopie optique depuis deux décennies, la MTD n'est pas considérée comme un outil d'imagerie de référence. Le travail présenté dans cette thèse a eu pour objectif de s'attaquer à deux difficultés majeures qui freinent l'adoption de cette technique d'imagerie : la prise en compte de la diffusion multiple dans le processus de reconstruction, et l'application de la MTD à des données sans mesure de phase.

Le premier axe de réflexion de ce travail de thèse a porté sur la prise en compte de la diffusion multiple dans le processus de reconstruction. En présence de diffusion multiple, le champ électrique est relié de manière non linéaire au contraste de permittivité et il n'y a dans ce cas pas de méthode d'inversion simple. La linéarisation du modèle de diffraction permet de construire des méthodes d'inversion linéaires simples, mais elle n'est valide que dans le régime de diffusion simple. Les méthodes de reconstruction sous l'approximation de Born ont ainsi le défaut majeur de dépendre de l'expression mathématique du modèle direct. Par ailleurs, elles ne peuvent être appliquées qu'à des objets d'étude faiblement contrastés. Dans cette thèse, nous avons développé un algorithme de reconstruction itératif qui est indépendant du modèle de diffraction. Il est ainsi possible de prendre en compte rigoureusement la diffusion multiple en utilisant pour modèle de diffraction un solveur rigoureux des équations de Maxwell.

Pour développer l'algorithme précédemment mentionné, nous avons calculé analytiquement et de manière exacte la variation au premier ordre du champ électrique pour une perturbation arbitraire de la permittivité du milieu sondé. Ce calcul a été effectué par différentes manières théoriques et a permis d'unifier des résultats trouvés dans la littérature. L'indépendance de l'algorithme itératif par rapport au modèle de diffraction vient du fait que la variation linéaire du champ électrique due à une

perturbation du milieu s'exprime de manière simple à partir de grandeurs physiques.

Pour étudier l'influence de la diffusion multiple sur les reconstructions, nous avons étudié l'imagerie en régime de diffusion simple, et tout particulièrement la technique de la rétropropagation. Cette technique est intimement reliée aux algorithmes itératifs développés en régime de diffusion multiple, et nous avons montré son équivalence avec l'imagerie de Fourier.

Le deuxième axe de réflexion de ce travail de thèse a porté sur le développement de la MTD pour des données sans mesures de phase. La MTD nécessite classiquement la mesure de la phase et de l'intensité du champ électrique dans l'espace image du microscope et impose de fait l'utilisation d'un montage interférométrique. Cette contrainte expérimentale constitue un frein important dans l'utilisation de la MTD sur des bancs optiques de microscopie conventionnels. Dans cette thèse, un algorithme itératif sans mesure de phase a été développé, qui présente des performances de reconstruction comparables à celles obtenues par des techniques d'inversion nécessitant la détermination de la phase du champ. Sa capacité à traiter un grand nombre de configurations d'imagerie (en transmission, en réflexion, à faible ou forte ouverture numérique, en présence d'un milieu stratifié...) en fait un outil prometteur pour la microscopie de phase pour la biologie par exemple.

Nous avons appliqué les deux axes de réflexion de cette thèse à la construction d'un microscope bimodal qui estime à l'aide d'un microscope confocal conventionnel la densité de fluorophores et le milieu qui les entoure. Nous nous sommes placés dans le cadre de la microscopie TIRF à illumination structurée qui est la technique la plus répandue pour obtenir des images de fluorophores super-résolues. La technique de l'illumination structurée qui consiste à éclairer les fluorophores à l'aide de grilles de lumière finement calibrées nécessite la connaissance précise de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores, mais l'illumination est déformée par le milieu en présence de diffusion multiple. Nous avons démontré la faisabilité d'un tel microscope pour des milieux présentant de la diffusion multiple forte. Enfin, nous avons développé un algorithme itératif sans mesure de phase qui estime conjointement la permittivité du milieu et les fluorophores.

Ce travail de thèse ouvre plusieurs perspectives de recherche et nous allons en proposer quelques unes. La première est l'imagerie de gros objets (entre 10 et 100 microns) par la MTD sans mesure de phase. Pour ce faire, l'utilisation de modèles de diffraction approchés comme la méthode de la beam-propagation capable de calculer la diffraction vers l'avant de gros objets semble indiquée. Ensuite, les algorithmes itératifs sans mesure de phase restent à être validés sur des jeux de données expérimentaux. Une difficulté, qui n'a pas été abordée dans cette thèse, est l'indétermination du plan focal objet du microscope, qui ne peut être levée directement à partir de mesures d'intensités et qui peut représenter une erreur de modèle importante dans le processus d'inversion. Une solution éventuelle à ce problème est d'introduire la position du plan focal objet du microscope comme paramètre supplémentaire dans le processus d'inversion. Enfin, le modèle direct de fluorescence qui a été utilisé dans cette thèse a été simplifié et peut être perfectionné, par exemple, en prenant en compte le décalage de Stokes ou encore la diffusion multiple après l'émission de la fluorescence.

A. Quelques définitions

A.1. Polarisation p et s

Une onde plane $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = E_0 e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}$ de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ polarisée linéairement éclaire une interface ayant pour normale le vecteur normé $\boldsymbol{z}$. La polarisation de l'onde plane $\boldsymbol{u}$ peut se décomposer de manière unique sur la base de polarisation $\{\boldsymbol{s}, \boldsymbol{p}\}$ (aussi appelé base {TE, TM}) définie par les formules,

$$\boldsymbol{s} = \boldsymbol{z} \times \boldsymbol{k}, \tag{A.1}$$

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{s} \times \boldsymbol{k}, \tag{A.2}$$

où $\times$ est le produit vectoriel. La base $\{\boldsymbol{s}, \boldsymbol{p}\}$ est utile pour calculer les amplitudes réfléchie et transmise au niveau de l'interface à l'aide des coefficients de Fresnel.

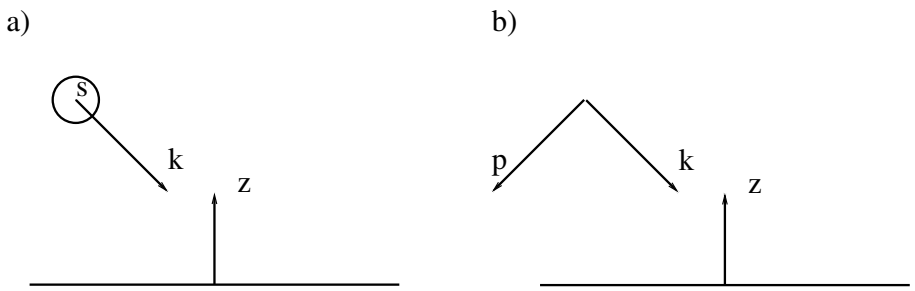

FIGURE A.1. – Une onde plane de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ illumine une interface de normale $\boldsymbol{z}$. a) L'onde est polarisée $\boldsymbol{s}$. b) L'onde est polarisée $\boldsymbol{p}$.

A.2. Produit scalaire dans $\mathcal{L}^2(\Omega)$

On définit l'espace $\mathcal{L}^2(\Omega)$ comme l'espace des fonctions tel que

$$\forall f \in \mathcal{L}(\Omega), \quad \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} |f(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r} < +\infty \tag{A.3}$$

On définit le produit scalaire $\langle f, g\rangle_\Omega$ [i] de deux fonctions f et g appartenant à $\mathcal{L}^2(\Omega)$ par [ii]

$$\langle f, g\rangle_\Omega = \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} f^*(\boldsymbol{r}) g(\boldsymbol{r}) \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{A.4}$$

i. noté $\langle f, g\rangle$ quand il n'y a pas d'ambiguïté sur l'espace des fonctions ; aussi noté parfois $\langle f|g\rangle$.
ii. $f(\boldsymbol{r})^*$ est le complexe conjugué de $f(\boldsymbol{r})$.

A partir du produit scalaire que nous venons de définir, nous pouvons construire une norme (dite *norme 2* ou *norme* $\mathcal{L}^2$) :

$$\forall f \in \mathcal{L}^2(\Omega),\ \ ||f|| = \sqrt{\langle f, f\rangle_\Omega} = \sqrt{\int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} |f(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{r}} \tag{A.5}$$

A.3. Définition de l'adjoint d'un opérateur linéaire

Soit $\boldsymbol{A}$ un opérateur *linéaire* défini de Ω dans Γ. On définit *l'opérateur adjoint* de $\boldsymbol{A}$ de Γ dans Ω par la relation :

$$\forall f \in \Omega, \forall g \in \Gamma,\ \ \langle g, \boldsymbol{A}f\rangle_\Gamma = \left\langle \boldsymbol{A}^\dagger g, f\right\rangle_\Omega \tag{A.6}$$

On va démontrer que[ii] :

$$\boldsymbol{A}^\dagger_{i,j} = \boldsymbol{A}^*_{j,i} \tag{A.7}$$

Pour tout $(f, g) \in \Omega \times \Gamma$, $\langle g, \boldsymbol{A}f\rangle_\Gamma = \left\langle \boldsymbol{A}^\dagger g, f\right\rangle_\Gamma$ soit

$$\int_{\boldsymbol{r}'\in\Gamma} g^*(\boldsymbol{r}')\left[\boldsymbol{A}f\right](\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \ = \ \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} \left[\boldsymbol{A}^\dagger g\right]^*(\boldsymbol{r}) f(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

Or, on a par définition :

$$\begin{aligned}
\left[\boldsymbol{A}f\right](\boldsymbol{r}') &= \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) f(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \\
\left[\boldsymbol{A}^\dagger g\right](\boldsymbol{r}) &= \int_{\boldsymbol{r}'\in\Gamma} \boldsymbol{A}^\dagger(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') g(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'.
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
\int_{\boldsymbol{r}'\in\Gamma} g^*(\boldsymbol{r}')\left[\int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) f(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right]\mathrm{d}\boldsymbol{r}' &= \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega}\left[\int_{\boldsymbol{r}'\in\Gamma} \boldsymbol{A}^\dagger(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') g(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\right]^* f(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \\
\int_{\boldsymbol{r}'\in\Gamma}\int_{\boldsymbol{r}\in\Omega} g(\boldsymbol{r}')^* \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) f(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}' &= \int_{\boldsymbol{r}\in\Omega}\int_{\boldsymbol{r}'\in\Gamma} \boldsymbol{A}^\dagger(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')^* g(\boldsymbol{r}')^* f(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'.
\end{aligned}$$

Puisque $(f, g) \in \Omega \times \Gamma$ est quelconque, on obtient en identifiant pour tout $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \in \Gamma \times \Omega$:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) &= \boldsymbol{A}^\dagger(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')^*, \\
\boldsymbol{A}^\dagger(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') &= \boldsymbol{A}^*(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}), \\
\boldsymbol{A}^\dagger_{i,j} &= \boldsymbol{A}^*_{j,i},
\end{aligned}$$

que l'on peut écrire formellement sous la forme :

$$\boldsymbol{A}^\dagger = (\boldsymbol{A}^*)^{\mathrm{t}}. \tag{A.8}$$

B. A propos du tenseur de Green en espace libre

B.1. Expression explicite de la fonction de Green en espace libre

En régime harmonique, le potentiel vecteur $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ s'écrit pour un dipôle $\boldsymbol{p}$ placé à l'origine

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = -i\omega \frac{\mu_0}{4\pi r} \boldsymbol{p} e^{ikr}. \tag{B.1}$$

où $r = \|r\|$, ω est la pulsation, μ_0 est la perméabilité magnétique du vide et $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le nombre d'onde avec la longueur d'onde $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ et la célérité de la lumière dans le vide c.

De la relation $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}$, en posant $\boldsymbol{u} = \frac{\boldsymbol{r}}{r}$, on obtient

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \frac{e^{ikr} k^2}{4\pi\varepsilon_0 c} (\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{p})[\frac{1}{r} + i\frac{1}{kr^2}]. \tag{B.2}$$

où ε_0 est la permittivité électrique du vide.

Puisque $\boldsymbol{E} = -\frac{1}{i\varepsilon_0\mu_0} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{B}$, on a

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} e^{ikr} \frac{k^2}{r} [\boldsymbol{p} - (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{p})\boldsymbol{u}] + [-i\frac{k}{r^2} + \frac{1}{r^3}][3(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{u})\boldsymbol{u} - \boldsymbol{p}]. \tag{B.3}$$

$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}$ est le champ électrique au point $\boldsymbol{r}$ émis par un dipôle $\boldsymbol{p}$ placé en $\boldsymbol{r}'$. En supposant le dipôle $\boldsymbol{p}$ situé en $\boldsymbol{r}'$, et en posant $\boldsymbol{u} = \frac{\boldsymbol{R}}{||\boldsymbol{R}||} = \frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{\|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\|}$, on obtient par identification

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} e^{ikR} \left\{ \frac{k^2}{R} [\overline{\boldsymbol{I}} - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{u} \cdot \overline{\boldsymbol{I}})] + \left[-i\frac{k}{R^2} + \frac{1}{R^3} \right] [3\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u} \cdot \overline{\boldsymbol{I}}) - \overline{\boldsymbol{I}}] \right\}. \tag{B.4}$$

Il faut noter que la fonction de Green de l'espace libre à une structure de convolution, c'est-à-dire $\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$.

B.2. Expression en champ lointain

$$
\begin{aligned}
||\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|| &= (r^2+r'^2+2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}')^{1\backslash 2} && \text{(B.5)}\\
&= r\left(1+\frac{r'^2}{r^2}+2\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'}{r^2}\right)^{1\backslash 2} && \text{(B.6)}\\
&= r\left(1+\frac{1}{2}\frac{r'^2}{r^2}+\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'}{r^2}+o(\frac{r'^2}{r^2})\right) && \text{(B.7)}
\end{aligned}
$$

Ainsi,

$$
\begin{aligned}
\exp(ikR) &= \exp\left[ikr\left(1+\frac{1}{2}\frac{r'^2}{r^2}+\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}'}{r^2}+o(\frac{r'^2}{r^2})\right)\right] && \text{(B.8)}\\
&= \exp(ikr)\exp\left(-ik\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{r}'\right)\exp\left(ik\frac{r'^2}{2r}\right)\exp\left(o(ik\frac{r'^2}{r})\right) && \text{(B.9)}
\end{aligned}
$$

Si l'on fait les approximations dites de champ lointain :

$$
\begin{aligned}
k\frac{r'^2}{r} &\ll 1\\
r' &\ll r && \text{(B.10)}
\end{aligned}
$$

équivalent à

$$
\begin{aligned}
\frac{r'^2}{r} &\ll \lambda\\
r' &\ll r && \text{(B.11)}
\end{aligned}
$$

on obtient,

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u} &\approx \frac{\boldsymbol{r}}{r}\\
\exp\left(ik\frac{r'}{2r}\right)\exp\left(o(ik\frac{r'^2}{r})\right) &\approx 1. && \text{(B.12)}
\end{aligned}
$$

Ainsi,

$$
\begin{aligned}
\exp(ikR) &\approx \exp(ikr)\exp\left(-ik\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{r}'\right) && \text{(B.13)}\\
\frac{1}{R} &\approx \frac{1}{r} && \text{(B.14)}
\end{aligned}
$$

Et l'Eq. (B.4) devient :

$$
\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\exp(ikr)}{r}\exp\left(-i\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{r}'\right)k^2\left[\overline{\boldsymbol{I}}-\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}\cdot\overline{\boldsymbol{I}})\right] \qquad \text{(B.15)}
$$

Le champ rayonné par un dipôle situé en $\boldsymbol{r}'$ est porté par une onde sphérique $\frac{\exp(ikr)}{r}$ et de polarisation orthogonale à la direction d'observation (à cause du projecteur

$\overline{\boldsymbol{I}} - \boldsymbol{u}(\boldsymbol{u} \cdot \overline{\boldsymbol{I}})$). On note la présence d'un déphasage $\exp(-i\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{r}')$ qui dépend de la position du dipôle par rapport à l'origine.

C. Fonction de Green d'un miroir parfait

Dans cette section, nous allons établir l'expression analytique de la fonction de Green associée à un miroir parfait, notée $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{miroir}}$, par la méthode des sources virtuelles. On considère le problème suivant : Quel est le champ électrique rayonné par un dipôle $\boldsymbol{p}$ situé au point $\boldsymbol{r}'$ au dessus d'un miroir plan infini ?

On définit un repère cartésien $(\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}, \hat{\boldsymbol{z}})$ dont on place l'origine sur la surface du miroir. L'axe $\hat{\boldsymbol{z}}$ est orienté de manière à ce que la côte du dipôle soit positive. Lorsque nous parlerons de plan sans préciser lequel, il s'agira du plan $z = 0$ et nous ajouterons aux grandeurs tangentes et normales à ce dernier les symboles $\parallel$ et $\perp$. On définit le domaine $\mathcal{D}$, comme le demi-espace défini par $z > 0$. On souhaite résoudre sur le domaine $\mathcal{D}$ les équations vérifiées par le champ

$$\begin{aligned}
\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) - \varepsilon_0 k_0^2 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) &= \boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \text{ pour tout } \boldsymbol{r} \in \mathcal{D}, && \text{(C.1)}\\
\lim_{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to\infty} \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) &= 0, && \text{(C.2)}\\
\boldsymbol{E}_{\parallel}(\boldsymbol{r}) &= 0 \text{ pour tout } \boldsymbol{r} \text{ du plan } z = 0, && \text{(C.3)}
\end{aligned}$$

où k_0 est le nombre d'onde associé à l'oscillation du dipôle $\boldsymbol{p}$ et $\delta(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ est la distribution de Dirac. La condition (C.3) vient de la continuité de la composante tangentielle du champ au niveau du plan et que le champ est nul à l'intérieur d'un conducteur parfait.

En utilisant la fonction de Green de l'espace libre, notée $\overline{\boldsymbol{G}}^0$, le champ $\overline{\boldsymbol{G}}^0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}$ vérifie les Eqs. (C.1) et (C.2). Soit $\boldsymbol{p}^{\text{sym}}$ un dipôle placé au point $\boldsymbol{r}'^{\text{sym}}$ symétrique de $\boldsymbol{r}'$ par rapport au plan, et vérifiant $\boldsymbol{p}_{\parallel}^{\text{sym}} = -\boldsymbol{p}_{\parallel}$. La distribution de sources constituée par l'ensemble $\{\boldsymbol{p}_{\parallel}, \boldsymbol{p}_{\parallel}^{\text{sym}}\}$ est antisymétrique par rapport au plan, donc le principe de symétrie de Curie permet d'affirmer que la composante tangentielle de $\{\overline{\boldsymbol{G}}^0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} + \overline{\boldsymbol{G}}^0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'^{\text{sym}})\boldsymbol{p}^{\text{sym}}\}$ est nulle en tout point $\boldsymbol{r}$ du plan. Ainsi, le champ $\overline{\boldsymbol{G}}^0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} + \overline{\boldsymbol{G}}^0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'^{\text{sym}})\boldsymbol{p}^{\text{sym}}$ vérifie les Eqs. (C.1), (C.2) et (C.3).

On conclut que la fonction de Green du miroir $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{miroir}}$ est égale pour tout $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}' \in \mathcal{D}$ et tout dipôle $\boldsymbol{p}$ à

$$\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{miroir}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} = \overline{\boldsymbol{G}}^0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} + \overline{\boldsymbol{G}}^0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'^{\text{sym}})\boldsymbol{p}^{\text{sym}}, \qquad \text{(C.4)}$$

avec $\boldsymbol{p}^{\text{sym}} = \boldsymbol{p} - 2(\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{p})\boldsymbol{x} - 2(\boldsymbol{y} \cdot \boldsymbol{p})\boldsymbol{y}$, et $\boldsymbol{r}'^{\text{sym}} = \boldsymbol{r}' - 2(\boldsymbol{r}' \cdot \boldsymbol{z})\boldsymbol{z}$.

D. Démonstration du théorème de réciprocité de Lorentz

Nous allons démontrer un théorème que nous utiliserons par la suite à de multiples reprises appelé *le théorème de réciprocité de Lorentz*. Il exprime l'idée que la valeur du champ n'est pas modifiée dans un milieu linéaire isotrope $\varepsilon(\boldsymbol{r})$ si l'on intervertit les positions de la source et de l'observation. L'utilisation du théorème de réciprocité permettra d'obtenir une expression élégante de l'opérateur de Fréchet (section 2.4.4). La démonstration ci-dessous reprend principalement les idées de l'article de A. Roger écrit en 1982 [1].

Soient $\boldsymbol{r}_\mathrm{a}$ et $\boldsymbol{r}_\mathrm{b}$ deux positions. Nous allons considérer deux configurations que nous noterons a) et b). Dans la configuration a), une distribution de courant $\boldsymbol{j}_\mathrm{a}(\boldsymbol{r}) = -i\omega\boldsymbol{p}_\mathrm{a}\delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{a}, \boldsymbol{r})$ éclaire un milieu de permittivité $\varepsilon_\mathrm{a}(\boldsymbol{r})$ et l'on mesure les champs électrique $\boldsymbol{E}_\mathrm{a}(\boldsymbol{r}_\mathrm{b})$ et magnétique $\boldsymbol{H}_\mathrm{a}(\boldsymbol{r}_\mathrm{b})$ à la position $\boldsymbol{r}_\mathrm{b}$. Dans la configuration b), la permittivité du milieu est perturbée et $\varepsilon_\mathrm{b}(\boldsymbol{r}) = \varepsilon_\mathrm{a}(\boldsymbol{r}) + \delta\varepsilon(\boldsymbol{r})$ est supposée différente de $\varepsilon_\mathrm{a}(\boldsymbol{r})$ uniquement dans un domaine borné Ω ne comprenant pas les positions $\boldsymbol{r}_\mathrm{a}$ et $\boldsymbol{r}_\mathrm{b}$. Par ailleurs, on inverse le rôle des sources et des observations, à savoir que $\boldsymbol{j}_\mathrm{b}(\boldsymbol{r}) = -i\omega\boldsymbol{p}_\mathrm{b}\delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{b}, \boldsymbol{r})$ et l'on mesure les champs électrique $\boldsymbol{E}_\mathrm{b}(\boldsymbol{r}_\mathrm{a})$ et magnétique $\boldsymbol{H}_\mathrm{b}(\boldsymbol{r}_\mathrm{a})$ [Fig. D.1].

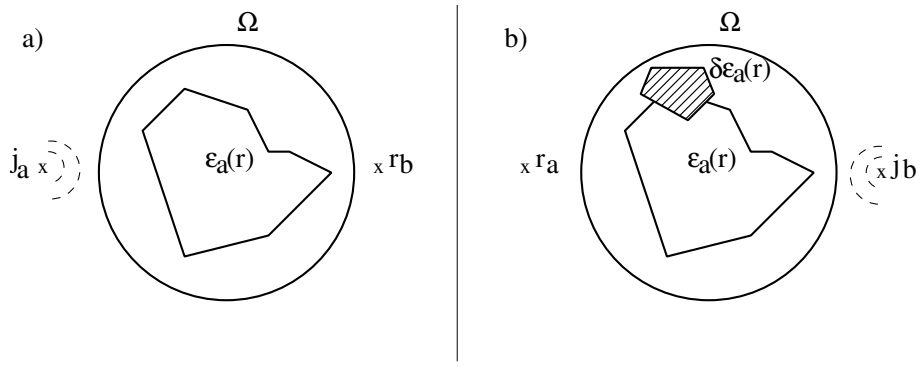

FIGURE D.1. – Configurations a) et b)

Les équations de Maxwell-Faraday et Maxwell-Ampère donnent

$$\begin{aligned} \nabla \times \boldsymbol{E}_\mathrm{k}(\boldsymbol{r}) &= i\omega\mu_0\boldsymbol{H}_\mathrm{k}(\boldsymbol{r}), \\ \nabla \times \boldsymbol{H}_\mathrm{k}(\boldsymbol{r}) &= \boldsymbol{j}_\mathrm{k}(\boldsymbol{r}) - i\omega\varepsilon_\mathrm{k}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}_\mathrm{k}(\boldsymbol{r}), \end{aligned} \tag{D.1}$$

avec $k = a, b$.

Posons $\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}) = [\boldsymbol{E}_\mathrm{a} \times \boldsymbol{H}_\mathrm{b} - \boldsymbol{E}_\mathrm{b} \times \boldsymbol{H}_\mathrm{a}](\boldsymbol{r})$. En utilisant la formule d'analyse vectorielle $\nabla \cdot (\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{n}) = (\nabla \times \boldsymbol{m}) \cdot \boldsymbol{n} - (\nabla \times \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{m}$ et Eq. (D.1), on évalue la

grandeur

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{U} &= [(\nabla\times\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}})\cdot\boldsymbol{H}_{\mathrm{b}}-(\nabla\times\boldsymbol{H}_{\mathrm{b}})\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}\\ &\quad -(\nabla\times\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}})\cdot\boldsymbol{H}_{\mathrm{a}}+(\nabla\times\boldsymbol{H}_{\mathrm{a}})\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}](\boldsymbol{r}),\\ &= [i\omega\mu_0\boldsymbol{H}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{H}_{\mathrm{b}}-\boldsymbol{j}_{\mathrm{b}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}+i\omega\varepsilon_{\mathrm{b}}\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}\\ &\quad -i\omega\mu_0\boldsymbol{H}_{\mathrm{b}}\cdot\boldsymbol{H}_{\mathrm{a}}+\boldsymbol{j}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}-i\omega\varepsilon_{\mathrm{a}}\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}](\boldsymbol{r}),\end{aligned}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}) = [\boldsymbol{j}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}-\boldsymbol{j}_{\mathrm{b}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}+i\omega(\varepsilon_{\mathrm{b}}-\varepsilon_{\mathrm{a}})\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}](\boldsymbol{r}) \tag{D.2}$$

Si l'on note $\partial\Omega$ la frontière du domaine Ω et $\boldsymbol{n}_{\partial\Omega}(\boldsymbol{r})$ la normale extérieure en un point $\boldsymbol{r}$ de $\partial\Omega$, on remarque que $\partial\Omega=\partial(\mathbb{R}^3\backslash\Omega)$ et $\boldsymbol{n}_{\partial\Omega}(\boldsymbol{r})=-\boldsymbol{n}_{\partial(\mathbb{R}^3\backslash\Omega)}(\boldsymbol{r})$. En tenant compte de cette observation, le théorème de Green-Ostrogradski donne

$$\begin{aligned}\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ {}^3\nabla\cdot\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}') &= \oint_{\partial\Omega}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ {}^2[\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n}_{\partial\Omega}](\boldsymbol{r}') = -\oint_{\partial(\mathbb{R}^3\backslash\Omega)}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ {}^2\left[\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{n}_{\partial(\mathbb{R}^3\backslash\Omega)}\right](\boldsymbol{r}')\\ &= -\int_{\mathbb{R}^3\backslash\Omega}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ {}^3\nabla\cdot\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}'),\end{aligned}$$

Puisque les sources sont à l'extérieur de Ω, de Eq. (D.2) on a

$$\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ {}^3\nabla\cdot\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}') = i\omega\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ [(\varepsilon_{\mathrm{b}}-\varepsilon_{\mathrm{a}})\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}](\boldsymbol{r}').$$

Par ailleurs, puisque $\varepsilon_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{r})$ ne diffère de $\varepsilon_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r})$ uniquement pour $\boldsymbol{r}$ dans Ω, de Eq. (D.2) on a

$$\int_{\mathbb{R}^3\backslash\Omega}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ {}^3\nabla\cdot\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}') = -i\omega[\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}})-\boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}})].$$

Ainsi, on obtient la relation

$$\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}})-\boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}}) = \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\ [(\varepsilon_{\mathrm{b}}-\varepsilon_{\mathrm{a}})\boldsymbol{E}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{b}}](\boldsymbol{r}'). \tag{D.3}$$

On va préciser les notations des champs en écrivant $\boldsymbol{E}_{\varepsilon_{\mathrm{i}}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}_{\mathrm{k}})$ le champ à la position $\boldsymbol{r}$ généré par le dipôle $\boldsymbol{p}_{\mathrm{k}}$ dans le milieu de permittivité ε_{i} où $i,k\in\{a,b\}$. Si l'on choisit $\varepsilon_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{r})=\varepsilon_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r})=\varepsilon(\boldsymbol{r})$, le membre de droite de l'équation précédente s'annule et on a démontré le théorème de la réciprocité

$$\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}\cdot\boldsymbol{E}_{\varepsilon}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}},\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}}) = \boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}\cdot\boldsymbol{E}_{\varepsilon}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}},\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}}). \tag{D.4}$$

Soit $\overline{\boldsymbol{G}}$ la fonction de Green associée à $\varepsilon(\boldsymbol{r})$. L'équation (D.4) s'écrit

$$\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}\cdot[\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}},\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}})\boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}] = \boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}\cdot[\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}},\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}})\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}] = \boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}\cdot[\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}},\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}})^T\boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}].$$

Puisque $\boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}$ et $\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}$ sont quelconques, le théorème de la réciprocité s'écrit à l'aide de la fonction de Green par la relation

$$\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}},\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}}) = \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}},\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}})^T, \tag{D.5}$$

pour $\boldsymbol{r}_{\mathrm{a}}$, $\boldsymbol{r}_{\mathrm{b}}$ quelconques, et où $\cdot^T$ est l'opération de transposition.

Bibliographie

[1] A. Roger. ■ Reciprocity theorem applied to the computation of functional derivatives of the scattering matrix ■. In : *Electromagnetics* 2 (1982), p. 69-83.

E. Étude de l'opérateur de rétropropagation

A la section 1.4.2, nous avons présenté la méthode de la rétropropagation, qui est une technique d'imagerie valide dans le cadre de l'approximation de Born pour estimer le contraste d'un objet $\chi(\boldsymbol{r})$ en faisant rétropropager les champ diffractés par ledit objet. Dans cette section, nous allons introduire un opérateur linéaire K, appelé *opérateur de rétropropagation*, qui transforme l'objet exact $\chi(\boldsymbol{r})$ en l'objet estimé par la méthode de la rétropropagation $\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$,

$$\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \int_{\Omega} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \; K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}'). \tag{E.1}$$

L'opérateur de rétropropagation K joue un rôle déterminant en imagerie sous l'approximation de Born. Dans ce cadre, nous montrons que la meilleure estimation que l'on puisse obtenir de l'objet exact est entièrement caractérisée par les fonctions propres et valeurs propres de K (section 2.5.2). Dans cette annexe, nous allons expliciter l'expression de K de manière générale et dans les configurations d'imagerie fréquemment rencontrées en pratique que sont la configuration de l'espace libre et la configuration en réflexion en présence d'un miroir parfait.

Si l'on développe l'expression du champ diffracté $\boldsymbol{E}^{\text{mes}}(\boldsymbol{o},\chi,l)$ (Eq. (2.40)) dans la formule obtenue pour le contraste fourni par la rétropropagation $\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$ (Eq. (1.15)), on obtient sous l'approximation de Born l'expression suivante du noyau de l'opérateur de rétropropagation [i]

$$\begin{aligned} K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \quad &= \quad \sum_l \int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \; \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}) \cdot \overline{\boldsymbol{G}}^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{o})\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}') \\ &= \quad \sum_l \int_{\Gamma} \mathrm{d}\boldsymbol{o} \; \left[\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r},l)\right]^* \cdot \left[\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}',l)\right], \end{aligned} \tag{E.2}$$

la dernière égalité étant obtenue en appliquant le théorème de réciprocité (section D).

Nous allons expliciter l'expression de K lorsque les observations sont à l'infini (champ lointain) pour deux configurations importantes en microscopie : dans le cas d'un milieu de référence homogène uniforme (configuration de l'espace libre) et dans le cas de l'imagerie en réflexion au dessus d'un miroir parfait.

Dans la configuration de l'espace libre, la fonction de Green est analytique (an-

i. Il faut noter que nous avons négligé le préfacteur $\frac{\nu}{\sum_l \left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r},l)\right|^2}$ dans l'expression de $K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$, ceci pour deux raisons. Premièrement, le facteur ν dépend certes de l'objet exact par le biais du champ diffracté mais pondère uniquement $\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$ par un facteur global. Deuxièmement, $\sum_l \left|\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r},l)\right|^2$ sera le plus souvent uniforme ou de variation douce dans le domaine d'investigation.

nexe B). En supposant les observations en champ lointain, elle s'écrit pour toute direction d'observation $\boldsymbol{o} \in \Gamma$ et tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$

$$\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{libre}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}) \quad = \quad e^{ik_0 \boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{r}} \overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{o}}, \tag{E.3}$$

où $\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{o}} = \left[\overline{\boldsymbol{I}} - \boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}}\right]$ est le projecteur orthogonal à la direction d'observation $\boldsymbol{o}$. Dans l'expression de $\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{libre}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r})$, nous avons négligé le préfacteur de l'onde sphérique $k_0^2 \frac{e^{ik_0 R}}{R}$ qui joue le rôle d'une constante dans la suite de nos développements.

Le calcul du produit sous l'intégrale de l'Eq. (E.2) donne

$$\begin{aligned}
& \left[\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}) \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)\right]^* \cdot \left[\overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}') \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l)\right] \qquad \text{(E.4)} \\
= \; & e^{ik_0 \boldsymbol{o}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})} \left[\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{o}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l)\right] \cdot \left[\overline{\boldsymbol{P}}_{\boldsymbol{o}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l)\right], \\
= \; & e^{ik_0 \boldsymbol{o}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})} \left[\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l) - \boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l)\right] \cdot \left[\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l) - \boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l)\right], \\
= \; & e^{ik_0 \boldsymbol{o}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})} \Big[\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l) \cdot \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l) - \left(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l)\right) \cdot \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l), \\
& \quad - \boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l) \cdot \left(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l)\right) + \left(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l)\right) \cdot \left(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}^{\text{t}} \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l)\right)\Big],
\end{aligned}$$

or pour tous vecteurs $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ et $\boldsymbol{b}'$, on a $(\boldsymbol{o}\boldsymbol{o}^{\text{t}} a)\cdot\boldsymbol{b} = (\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{b})$ et en prenant $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{o}\boldsymbol{o}^{\text{t}}\boldsymbol{b}'$ on a $(\boldsymbol{o}\boldsymbol{o}^{\text{t}}\boldsymbol{a})\cdot(\boldsymbol{o}\boldsymbol{o}^{\text{t}}\boldsymbol{b}') = (\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{o}\boldsymbol{o}^{\text{t}}\boldsymbol{b}') = (\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{b}')$. De ces relations, on déduit l'expression du noyau de l'opérateur de rétropropagation en espace libre $K^{\text{libre}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$

$$\begin{aligned}
& K^{\text{libre}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \\
& \sum_l \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; e^{-ik_0 \boldsymbol{o}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \left[\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l) \cdot \boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l) - \left(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{E}^{\text{ref}*}(\boldsymbol{r}, l)\right)\left(\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}', l)\right)\right] \qquad \text{(E.5)}
\end{aligned}$$

valable pour un champ de référence arbitraire $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)$. L'équation (E.5) montre que $K^{\text{libre}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ dépend essentiellement de l'auto-corrélation de $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\cdot, l)$ entre les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$. Par exemple, pour des illuminations de speckle dont les corrélations spatiales en amplitude, phase et polarisation sont connues, nous nous attendons à ce que la méthode de rétropropagation permette d'obtenir une estimation de l'objet exact à condition d'avoir un nombre suffisamment grand de réalisations de speckle statistiquement indépendantes. En tomographie, les illuminations sont souvent des ondes planes et en posant $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l) = e^{-i\boldsymbol{k}_l^{\text{inc}}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{u}$, on a

$$K^{\text{libre, ondes planes}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \quad = \quad \sum_l \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\; e^{-ik_0 \boldsymbol{o}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} e^{i\boldsymbol{k}_l^{\text{inc}}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \left[1 - |\boldsymbol{o}\cdot\boldsymbol{u}|^2\right], \tag{E.6}$$

qui montre que l'action de $K^{\text{libre, ondes planes}}$ sur l'objet exacte $\chi(\boldsymbol{r})$ consiste à effectuer une transformée de Fourier 3D de $\chi(\boldsymbol{r})$, multiplier par une fonction de transfert, puis effectuer une transformée de Fourier inverse.

L'étude de K dans le cas d'un miroir parfait se déduit de celle que nous venons de faire pour la configuration de l'espace libre. Plaçons un miroir parfait [ii] qui occupe le demi-espace $z < 0$; le domaine d'investigation Ω étant défini sur le demi-espace $z > 0$. On peut montrer (annexe C) que la fonction de Green d'un miroir parfait

ii. Un miroir est parfait si le champ est nul à l'intérieur du miroir.

$\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{miroir}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ vérifie pour tout $\boldsymbol{r}$,$\boldsymbol{r}' \in \Omega$ et tout dipôle $\boldsymbol{p}$

$$\overline{\boldsymbol{G}}^{\text{miroir}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} \;=\; \overline{\boldsymbol{G}}^{\text{libre}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{p} + \overline{\boldsymbol{G}}^{\text{libre}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'^{\text{sym}})\boldsymbol{p}^{\text{sym}} \tag{E.7}$$

avec le point $\boldsymbol{r}'^{\text{sym}}$ symétrique de $\boldsymbol{r}'$ par rapport à l'interface du miroir et $\boldsymbol{p}^{\text{sym}}$ ayant ses composantes normale et tangentielle par rapport au miroir respectivement égale et opposée à celle de $\boldsymbol{p}$. Pour tout point $\boldsymbol{r} \in \Omega$, nous prolongeons au point $\boldsymbol{r}^{\text{sym}}$ symétrique de $\boldsymbol{r}$ par rapport au miroir le champ de référence $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}^{\text{sym}}, l)$ en choisissant ses composantes normale et tangentielle par rapport au miroir respectivement égale et opposée à celle de $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l)$. Ainsi en utilisant ce champ de référence prolongé et en injectant Eq. (E.7) dans Eq. (E.2), on obtient l'expression du noyau de l'opérateur de rétropropagation pour un miroir parfait

$$K^{\text{miroir}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = K^{\text{libre}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') + K^{\text{libre}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'^{\text{sym}}) + K^{\text{libre}}(\boldsymbol{r}^{\text{sym}},\boldsymbol{r}') + K^{\text{libre}}(\boldsymbol{r}^{\text{sym}},\boldsymbol{r}'^{\text{sym}}) \tag{E.8}$$

pour tous points $\boldsymbol{r}$,$\boldsymbol{r}' \in \Omega$. En présence d'un miroir, une onde plane incidente de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}_l^{\text{inc}} = (\boldsymbol{k}_{\parallel}^{\text{inc}}{}_l, \gamma_l)$ interfère avec sa réflexion et le champ de référence peut s'écrire sous la forme $\boldsymbol{E}^{\text{ref}}(\boldsymbol{r}, l) = \cos(\gamma_l z) e^{i\boldsymbol{k}_{\parallel}^{\text{inc}}{}_l \cdot \boldsymbol{r}_{\parallel}} \boldsymbol{u}$ pour tout point $\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{r}_{\parallel}, z) \in \Omega$. A cause de la parité du cosinus, $K^{\text{miroir}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ est directement proportionnel à $\cos(\gamma_l z)$ [iii]. Ainsi, lorsque qu'un objet $\chi(\boldsymbol{r})$ est illuminé par une onde plane au dessus d'un miroir parfait, l'estimation fournie par la rétropropagation $\chi^{\text{retro}}(\boldsymbol{r})$ est modulée le long de l'axe orthogonal au plan du miroir (Fig. E.1(b)). Puisque l'opérateur de rétropropagation K conditionne intégralement la reconstruction de $\chi(\boldsymbol{r})$ sous l'approximation de Born (section 2.5.2), il est important d'établir une stratégie pour s'affranchir de cette modulation axiale, propre à l'illumination [Fig. E.1(c)]. Il est possible de réduire les oscillations selon l'axe optique en utilisant des données mesurées à plusieurs longueurs d'ondes [1] ou en appliquant des techniques de régularisation, en imposant par exemple une contrainte de régularité selon l'axe optique [Fig. E.1(d)].

Bibliographie

[1] Ting Zhang, Kévin Unger, Guillaume Maire et al. ■ Multi-wavelength multi-angle reflection tomography ■. In : *Opt. Express* 26.20 (oct. 2018), p. 26093-26105.

iii. Pour le voir, il faut écrire K^{libre} avec le champ de référence donné et calculer Eq. (E.8)

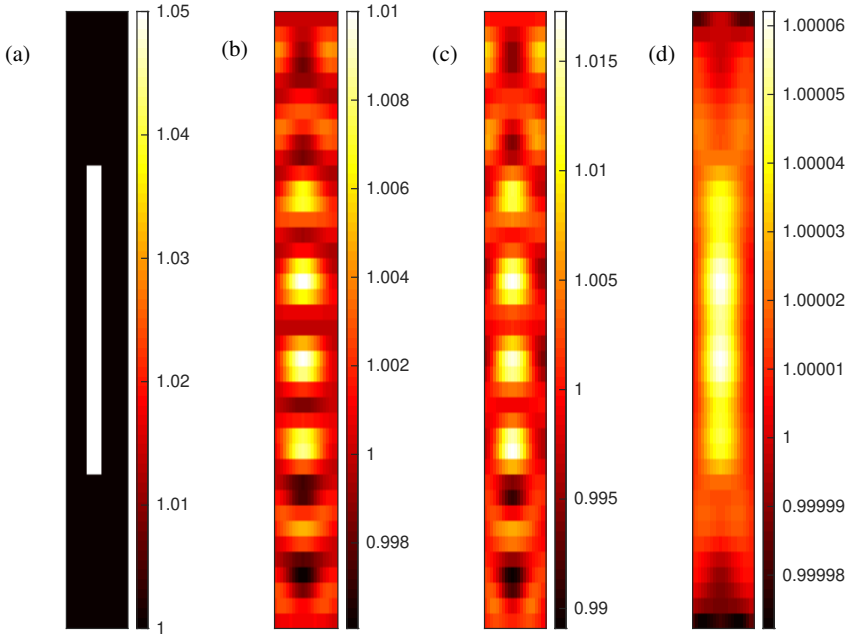

FIGURE E.1. – Un parallélépipède (de dimension $\lambda\backslash 2 \times \lambda\backslash 2 \times \lambda$ et de permittivité 1.05) placé à 2λ au-dessus d'un miroir parfait (de permittivité 20) est illuminé en incidence normale par une onde plane de longueur d'onde $\lambda = 500$ nm. Dimension du domaine d'investigation : $2\lambda \times 2\lambda \times 4\lambda$. Pas de discrétisation : $\lambda\backslash 10$. a) Permittivité de l'objet théorique. b) Permittivité obtenue par la méthode de la rétropropagation. c) Permittivité reconstruite à l'aide d'un algorithme itératif. d) Permittivité reconstruite avec le même algorithme qu'en c) et en ajoutant une contrainte de régularité selon l'axe optique.

F. Calcul du gradient pour l'inversion sur des intensités par méthode variationnelle

F.1. Introduction

Γ et Ω sont respectivement les espaces observation et objet. On définit le produit hermitien sur Γ par $\langle f, g\rangle_\Gamma = \int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o} f^*(\boldsymbol{o}')g(\boldsymbol{o})$ qui induit une norme. De même pour Ω. Dans la suite, on considére que f et f^* sont indépendants. Cela signifie notamment que $\langle f, g\rangle_\Gamma$ dépend de f^* et non de f.

On pose le lagrangien suivant

$$\mathcal{L}(\chi, \chi^*, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}^*, \boldsymbol{v}^*) = \left\langle I^{\mathrm{mes}} - \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} \cdot \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}, I^{\mathrm{mes}} - \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} \cdot \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} \right\rangle_\Gamma + \left\langle \boldsymbol{v}, \boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}^0 - \overline{\mathbf{B}}\chi\boldsymbol{E} \right\rangle_\Gamma, \tag{F.1}$$

avec le champ détecté

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\boldsymbol{o}) = \boldsymbol{E}^{\mathrm{spec}}(\boldsymbol{o}) + \overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}(\boldsymbol{o}), \tag{F.2}$$

et le résidu réel

$$h(\boldsymbol{o}) = I^{\mathrm{mes}}(\boldsymbol{o}) - \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*} \cdot \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\boldsymbol{o}), \tag{F.3}$$

où χ, χ^*, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{E}^*$, $\boldsymbol{v}^*$ sont cinq variables indépendantes. $\boldsymbol{E}^0$ et $\boldsymbol{E}^{\mathrm{spec}}$ sont respectivement le champ de réference et le champ spéculaire. Le lagrangien est composé de deux termes : le premier est la fonction coût à minimiser, le second relaxe le modèle direct et introduit une pénalit'e par le multiplicateur de Lagrange $\boldsymbol{v}^*$.

Un minimum de $\mathcal{L}$ est un point critique ; or $(\chi, \chi^*, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{E}^*, \boldsymbol{v}^*)$ est un point critique de $\mathcal{L}$ si les différentielles partielles de $\mathcal{L}$ en ce point s'annulent.

F.2. Différentielles partielles de $\mathcal{L}$

Calculons les différentielles partielles de $\mathcal{L}$ en un point quelconque. Pour ce faire, il est bon de savoir que

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*} \cdot \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} = \boldsymbol{E}^{\mathrm{spec}*} \cdot \boldsymbol{E}^{\mathrm{spec}} + \boldsymbol{E}^{\mathrm{spec}*} \cdot (\overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}) + (\overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E})^* \cdot \boldsymbol{E}^{\mathrm{spec}} + (\overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E})^* \cdot (\overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}), \tag{F.4}$$

d'où

$$\partial_{\boldsymbol{E}}\left[\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}\right](\delta\boldsymbol{E}) = \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot(\overline{\mathbf{A}}\chi\delta\boldsymbol{E}) \tag{F.5}$$

$$\partial_{\boldsymbol{E}^*}\left[\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}\right](\delta\boldsymbol{E}^*) = (\overline{\mathbf{A}}\chi\delta\boldsymbol{E})^*\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} \tag{F.6}$$

$$\partial_{\chi}\left[\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}\right](\delta\chi) = \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot(\overline{\mathbf{A}}\delta\chi\boldsymbol{E}) \tag{F.7}$$

$$\partial_{\chi^*}\left[\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}\right](\delta\chi^*) = (\overline{\mathbf{A}}\delta\chi\boldsymbol{E})^*\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} \tag{F.8}$$

La différentielle partielle selon $\boldsymbol{v}^*$ est

$$\partial_{\boldsymbol{v}^*}\mathcal{L}(\delta\boldsymbol{v}^*) = \left\langle\delta\boldsymbol{v}, \boldsymbol{E}-\boldsymbol{E}^0-\overline{\mathbf{A}}\chi\boldsymbol{E}\right\rangle_\Omega. \tag{F.9}$$

La différentielle partielle selon $\boldsymbol{E}$ est

$$\begin{aligned}\partial_{\boldsymbol{E}}\mathcal{L}(\delta\boldsymbol{E}) &= \left\langle h, \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{A}}\chi(\delta\boldsymbol{E})\right\rangle_\Gamma + \left\langle\boldsymbol{v},(1-\overline{\mathbf{B}}\chi)(\delta\boldsymbol{E})\right\rangle_\Omega + \left\langle(\overline{\mathbf{A}}\chi(\delta\boldsymbol{E}))^*\cdot\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}, h\right\rangle_\Gamma,\\ &= 2\left\langle h, \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{A}}\chi(\delta\boldsymbol{E})\right\rangle_\Gamma + \left\langle\boldsymbol{v},(1-\overline{\mathbf{B}}\chi)(\delta\boldsymbol{E})\right\rangle_\Omega.\end{aligned} \tag{F.10}$$

La différentielle partielle selon $\boldsymbol{E}^*$ est

$$\partial_{\boldsymbol{E}^*}\mathcal{L}(\delta\boldsymbol{E}^*) = 2\left\langle\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{A}}\chi(\delta\boldsymbol{E}), h\right\rangle_\Gamma. \tag{F.11}$$

La différentielle partielle selon χ est

$$\partial_{\chi}\mathcal{L}(\delta\chi) = 2\left\langle h, \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{A}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}\right\rangle_\Gamma - \left\langle\boldsymbol{v},\overline{\mathbf{B}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}\right\rangle_\Omega. \tag{F.12}$$

La différentielle partielle selon χ^* est

$$\partial_{\chi^*}\mathcal{L}(\delta\chi^*) = 2\left\langle\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{A}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}, h\right\rangle_\Gamma. \tag{F.13}$$

F.3. Calcul du gradient g_χ

Pour un point donné, on veut déterminer la dérivée partielle de $\mathcal{L}$ par rapport à χ, notée g_χ, qui maximise la variation de $\mathcal{L}$, mais qui laisse $\mathcal{L}$ inchangée selon toutes les autres directions orthogonales selon χ^*, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{E}^*$ et $\boldsymbol{v}^*$. En particulier, cette dernière remarque signifie que l'on a au point considéré,

$$\begin{aligned}0 &= \partial_{\boldsymbol{E}}\mathcal{L}(\delta\boldsymbol{E})(\boldsymbol{r}),\\ &= 2\left\langle h, \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{A}}\chi(\delta\boldsymbol{E})\right\rangle_\Gamma + \left\langle\boldsymbol{v},(1-\overline{\mathbf{B}}\chi)(\delta\boldsymbol{E})\right\rangle_\Omega,\\ &= 2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r})\chi(\boldsymbol{r}')(\delta\boldsymbol{E})(\boldsymbol{r}')\\ &+ \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\left[\delta(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}')\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot(\delta\boldsymbol{E})(\boldsymbol{r}') - \boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')(\delta\boldsymbol{E})(\boldsymbol{r}')\right],\\ &= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\left[2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\cdot + \boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}')\cdot - \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\right](\delta\boldsymbol{E})(\boldsymbol{r}\end{aligned}$$

Ceci étant vrai pour tout $\delta\boldsymbol{E}$, on a nécessairement pour tout $\boldsymbol{r}\in\Omega$:

$$
\begin{aligned}
2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\cdot+\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}')\cdot-\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}') &= 0,\\
2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\cdot+\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot\left[1-\overline{\mathbf{B}}\chi\right](\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}') &= 0,
\end{aligned}
$$

soit

$$
\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}) = -2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\left(\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\right)\left[1-\overline{\mathbf{B}}\chi\right]^{-1}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) \tag{F.14}
$$

Maintenant, il suffit d'expliciter la différentielle

$$
\begin{aligned}
\partial_\chi\mathcal{L}(\delta\chi) &= 2\left\langle h,\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{A}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}\right\rangle_\Gamma-\left\langle \boldsymbol{v},\overline{\mathbf{B}}(\delta\chi)\boldsymbol{E}\right\rangle_\Omega, && \text{(F.15)}\\
&= 2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')(\delta\chi(\boldsymbol{r}'))\\
&- \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')(\delta\chi(\boldsymbol{r}')),\\
&= \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'(\delta\chi(\boldsymbol{r}'))\left(2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')\right.\\
&- \left.\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')\right). && \text{(F.16)}
\end{aligned}
$$

Puisque l'on a par définition,

$$
\partial_\chi\mathcal{L}(\delta\chi)=\langle g_\chi,\delta\chi\rangle_\Omega=\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'(\delta\chi(\boldsymbol{r}')g_\chi{}^*(\boldsymbol{r}'), \tag{F.17}
$$

on a en identifiant,

$$
g_\chi{}^*(\boldsymbol{r}') = 2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')-\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\boldsymbol{v}^*(\boldsymbol{r}'')\cdot\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}'),
$$

et en injectant Eq. (2.23), on a finalement

$$
\begin{aligned}
g_\chi{}^*(\boldsymbol{r}''') &= 2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}''')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}''')\\
&+ 2\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\left[\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\left(\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\right)\left[1-\overline{\mathbf{B}}\chi\right]^{-1}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}'')\right]\cdot\\
&\quad\left[\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}''')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}''')\right],\\
&= 2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\left(\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}''')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}''')\right.\\
&+ \left.\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\left[1-\overline{\mathbf{B}}\chi\right]^{-1}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}'')\cdot\left[\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}''')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}''')\right]\right),\\
&= 2\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\left[h\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\right](\boldsymbol{o})\cdot\overline{\mathbf{D}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}''') && \text{(F.18)}
\end{aligned}
$$

en posant

$$
\begin{aligned}
\overline{\mathbf{D}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}''') &= \overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}''')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}''')\\
&+ \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}'\overline{\mathbf{A}}(\boldsymbol{o},\boldsymbol{r}')\chi(\boldsymbol{r}')\int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}''\left[1-\overline{\mathbf{B}}\chi\right]^{-1}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}'')\cdot\left[\overline{\mathbf{B}}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}''')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}''')\right] && \text{(F.19)}
\end{aligned}
$$

ou symboliquement

$$\begin{aligned}\overline{\mathbf{D}} &= \overline{\mathbf{A}}\boldsymbol{E} + \overline{\mathbf{A}}\chi[1-\overline{\mathbf{B}}\chi]^{-1}\overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{E}, \\ &= \overline{\mathbf{A}}[1-\chi\overline{\mathbf{B}}]^{-1}[1-\overline{\mathbf{B}}\chi]^{-1}\boldsymbol{E}^0 \end{aligned} \tag{F.20}$$

La dernière égalité a été montrée dans un précédent calcul.

G. Inversion à partir de mesures d'amplitudes

G.1. Fonctionnelle coût et gradient

On se propose de minimiser la fonctionnelle suivante

$$\mathcal{F} = W_\Gamma \sum_{l=1}^{N} \|M - |\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|\|_\Gamma^2, \tag{G.1}$$

où $W_\Gamma = \sum_{l=1}^{N} \|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|\|_\Gamma^2$ normalise la fonctionnelle coût.

L'amplitude du champ détecté se linéarise ainsi

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\chi+\delta\chi)|^2 &= \sqrt{\left(\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} + \overline{\mathbf{D}}\delta\chi + o(\delta\chi)\right)^* \left(\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}} + \overline{\mathbf{D}}\delta\chi + o(\delta\chi)\right)} \\
&= \sqrt{|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|^2 + |\overline{\mathbf{D}}\delta\chi|^2 - 2\mathrm{Re}\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{D}}\delta\chi} \\
&= |\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|\sqrt{1 + 2\mathrm{Re}\frac{\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{D}}\delta\chi}{|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|^2} + o(\delta\chi)} \\
&= |\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}| + \mathrm{Re}\frac{\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{D}}\delta\chi}{|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|} + o(\delta\chi)
\end{aligned} \tag{G.2}$$

La linéarisation au premier ordre donne donc un gradient similaire à celui obtenu pour l'inversion sur intensités :

$$g_\chi^*(\boldsymbol{r}) = -2W_\Gamma \sum_{l=1}^{N} \left(\int_\Gamma \mathrm{d}\boldsymbol{o}\boldsymbol{E}^{\boldsymbol{p}(\boldsymbol{o},l)}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},l)\right), \tag{G.3}$$

avec la source $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{o}) = h(\boldsymbol{o})\frac{\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\boldsymbol{o})}{|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\boldsymbol{o})|}$ où on a le résidu $h(\boldsymbol{o}) = M(\boldsymbol{o}) - |\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\boldsymbol{o})|$.

G.2. Polynôme de minimisation

Pour garder des termes simples mais ne pas pousser trop loin la linéarisation des coefficients du polynôme de minimisation, on linéarise par rapport à $\frac{-2\mathrm{Re}\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}\cdot\overline{\mathbf{D}}\delta\chi + |\overline{\mathbf{D}}\delta\chi|^2}{|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|^2}$. On obtient les coefficients suivants :

$$
\begin{aligned}
P_l^0(\boldsymbol{r}) &= h_l(\boldsymbol{r}), && \text{(G.4)}\\
P_l^1(\boldsymbol{r}) &= \mathrm{Re}\left(\frac{\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}^*}_l}{|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|}\cdot\overline{\mathbf{D}}_l g_\chi\right)(\boldsymbol{r}), && \text{(G.5)}\\
P_l^2(\boldsymbol{r}) &= \frac{|\overline{\mathbf{D}}_l g_\chi|^2}{2|\boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}|}(\boldsymbol{r}), && \text{(G.6)}\\
P_l^{00} &= \|P_l^0\|_\Gamma^2, && \text{(G.7)}\\
P_l^{11} &= \|P_l^1\|_\Gamma^2, && \text{(G.8)}\\
P_l^{22} &= \|P_l^2\|_\Gamma^2, && \text{(G.9)}\\
P_l^{01} &= \left\langle P_l^0, P_l^1\right\rangle_\Gamma, && \text{(G.10)}\\
P_l^{02} &= \left\langle P_l^0, P_l^2\right\rangle_\Gamma, && \text{(G.11)}\\
P_l^{12} &= \left\langle P_l^1, P_l^2\right\rangle_\Gamma, && \text{(G.12)}
\end{aligned}
$$

du polynôme

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}(\alpha_n) = W_\Gamma \sum_l (&P_l^{00} + \alpha_n^2 P_l^{11} + \alpha_n^4 P_l^{22}\\
&- 2\alpha_n P_l^{01} - 2\alpha_n^2 P_l^{02} + 2\alpha_n^3 P_l^{12}).
\end{aligned}
\tag{G.13}
$$

H. Calcul du coefficient de minimisation

Les algorithmes présentés aux chapitres 2 et 3 estiment successivement la susceptibilité $\chi(\boldsymbol{r})$ en tout point $\boldsymbol{r}$ d'un domaine d'investigation Ω de sorte qu'une fonction coût $\mathcal{F}(\chi)$ mesurant l'écart entre les mesures et le modèle soit minimisée. La relation de mis-à-jour de la susceptibilité de l'itération n à l'itération $n+1$ est

$$\chi_{n+1}(\boldsymbol{r}) \quad = \quad \chi_n(\boldsymbol{r}) + \alpha g_\chi(\boldsymbol{r}), \tag{H.1}$$

où $g_\chi(\boldsymbol{r})$ est le gradient de $\mathcal{F}$ calculé en χ_n et α est un réel choisi tel que la linéarisation de $\mathcal{F}(\chi_{n+1})$ par rapport à g_χ soit minimal.

Nous expliquons comment nous calculons en pratique le coefficient de minimisation α pour les algorithmes sur champs, sur intensités et pour l'algorithme conjoint sur intensités de diffraction et de fluorescence.

H.1. Pour l'algorithme sur champs

La fonction coût sur champs est

$$\mathcal{F}(\chi) \quad = \quad W_\Gamma \sum_l \left\| \boldsymbol{M}(l) - \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}(\chi, l) \right\|_\Gamma^2 .$$

En posant le résidu $\boldsymbol{h} = \boldsymbol{M} - \boldsymbol{E}^{\mathrm{d}}$, la fonction coût à l'itération $n+1$ s'écrit

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\chi_{n+1}) \quad &\approx \quad W_\Gamma \sum_l \left\| \boldsymbol{h}(\chi_n, l) - \alpha \overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi + o(g_\chi) \right\|_\Gamma^2 , \\
&= \quad W_\Gamma \mathcal{F}(\chi_n) - 2\alpha W_\Gamma \sum_l \mathrm{Re} \left\langle \boldsymbol{h}(\chi_n, l), \overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi \right\rangle_\Gamma + \alpha^2 W_\Gamma \sum_l \left\| \overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi \right\|_\Gamma^2 .
\end{aligned}$$

Cette dernière équation est un polynôme de degré 2 en α et $\mathcal{F}(\chi_{n+1})$ est minimale pour

$$\alpha \quad = \quad \frac{\sum_l \mathrm{Re} \left\langle \boldsymbol{h}(\chi_n, l), \overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi \right\rangle_\Gamma}{\sum_l \left\| \overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi \right\|_\Gamma^2} . \tag{H.2}$$

En pratique, les termes faisant intervenir $\overline{\mathbf{D}}_\chi g_\chi$ sont calculés de manière approchés pour accélérer les temps de calcul (section H.3).

H.2. Pour l'algorithme sur intensité

La fonction coût sur intensités est

$$\mathcal{F}(\chi) \quad = \quad W_\Gamma \sum_l \left\| M(l) - |\boldsymbol{E}(\chi, l)|^2 \right\|_\Gamma^2 . \tag{H.3}$$

En posant $h = M - |\boldsymbol{E}|^2$, la fonction coût à l'itération $n+1$ s'écrit

$$\mathcal{F}(\chi_{n+1}) \approx W_\Gamma \sum_l \left\| h(\chi_n, l) - 2\alpha \mathrm{Re}\left[\boldsymbol{E}(\chi_n, l)^* \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi\right] - \alpha^2 \left|\overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi\right|^2 \right\|_\Gamma^2 \tag{H.4}$$

En définissant les coefficients

$$\begin{aligned}
P_l^0(\boldsymbol{o}, l) &= h(\boldsymbol{o}, l), \\
P^1(\boldsymbol{o}, l) &= 2\mathrm{Re}\left[\boldsymbol{E}(\chi_n, l)^* \cdot \overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi\right](\boldsymbol{o}), \\
P^2(\boldsymbol{o}, l) &= \left|\overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi\right|^2 (\boldsymbol{o}), \\
P^{00}(l) &= \|P^0(l)\|_\Gamma^2, \\
P^{11}(l) &= \|P^1(l)\|_\Gamma^2, \\
P^{22}(l) &= \|P^2(l)\|_\Gamma^2, \\
P^{01}(l) &= \left\langle P^0(l), P^1(l) \right\rangle_\Gamma , \\
P^{02}(l) &= \left\langle P^0(l), P^2(l) \right\rangle_\Gamma , \\
P^{12}(l) &= \left\langle P^1(l), P^2(l) \right\rangle_\Gamma ,
\end{aligned}$$

on a

$$\mathcal{F}(\chi_{n+1}) \quad = \quad W_\Gamma \sum_l \left[P^{00}(l) + \alpha^2 P^{11}(l) + \alpha^4 P^{22}(l) - 2\alpha P^{01}(l) - 2\alpha^2 P^{02}(l) + 2\alpha^3 P^{12}(l) \right].$$

Cette dernière équation est un polynôme de degré 4 en α qui est minimisée numériquement.

H.3. Remarques

Le calcul du coefficient de minimisation α nécessite le calcul de $\left\|\overline{\mathbf{D}}_\chi(\chi_n, l) g_\chi\right\|_\Gamma^2$ qui est très coûteux car il nécessite de faire autant de résolution de problèmes directs qu'il y a de points d'observations. Afin de garder des temps de calcul raisonnables, nous faisons l'approximation de Born sur le champ adjoint. Ainsi,

$$\left[\overline{\mathbf{D}}_\chi g_\chi\right](\boldsymbol{o}, l) \quad \approx \quad \int_\Omega \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \overline{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{r}') g_\chi(\boldsymbol{r}') \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}', \chi_n, l), \tag{H.5}$$

ce qui simplifie considérablement le calcul théorique des coefficients du polynôme de minimisation.

Lorsque le calcul du coefficient de minimisation a nécessité la minimisation numé-

rique d'un polynôme, cette dernière a été effectuée à l'aide d'une routine personnelle programmée par K. Belkebir. Cette routine prend en arguments d'entrée les coefficients du polynôme ainsi que ceux du polynôme dérivé.

I. Relation entre les gradients des fonctions coûts à variable complexe et réelle

Soit une fonction coût $\mathcal{F}(\chi)$ où χ est une variable complexe. On définit le gradient g de $\mathcal{F}$ en χ par la relation

$$\mathcal{F}(\chi + \delta\chi) \;=\; \mathcal{F}(\chi) + 2\mathrm{Re}(g^*\delta\chi) + o(\delta\chi), \tag{I.1}$$

où $\delta\chi$ est une petite perturbation arbitraire.

En introduisant χ^{r} et χ^{i} les parties réelles et imaginaires de χ vérifiant $\chi = \chi^{\mathrm{r}} + i\chi^{\mathrm{i}}$, on peut définir la fonction coût $\mathcal{F}^1$ par la relation

$$\mathcal{F}^1(\chi^{\mathrm{r}}, \chi^{\mathrm{i}}) \;=\; \mathcal{F}(\chi), \tag{I.2}$$

pour tout χ. Le gradient $\{\partial_{\chi^{\mathrm{r}}}\mathcal{F}^1, \partial_{\chi^{\mathrm{i}}}\mathcal{F}^1\}$ de $\mathcal{F}^1$ au point $\{\chi^{\mathrm{r}}, \chi^{\mathrm{i}}\}$ est défini par

$$\mathcal{F}^1(\chi^{\mathrm{r}} + \delta\chi^{\mathrm{r}}, \chi^{\mathrm{i}} + \delta\chi^{\mathrm{i}}) \;=\; \mathcal{F}^1(\chi^{\mathrm{r}}, \chi^{\mathrm{i}}) + \partial_{\chi^{\mathrm{r}}}\mathcal{F}^1\delta\chi^{\mathrm{r}} + \partial_{\chi^{\mathrm{i}}}\mathcal{F}^1\delta\chi^{\mathrm{i}} + o(\|\delta\chi^{\mathrm{r}}, \delta\chi^{\mathrm{i}}\|), \tag{I.3}$$

pour toute perturbation arbitraire $\{\delta\chi^{\mathrm{r}}, \delta\chi^{\mathrm{i}}\}$.

Nous allons établir la relation qui lie g, $\partial_{\chi^{\mathrm{r}}}\mathcal{F}^1$ et $\partial_{\chi^{\mathrm{i}}}\mathcal{F}^1$. Soit une perturbation arbitraire $\delta\chi = \delta\chi^{\mathrm{r}} + \delta\chi^{\mathrm{i}}$. De l'égalité de l'Eq. (I.2) on en déduit que les variations linéaires doivent être égales,

$$\begin{aligned}
\partial_{\chi^{\mathrm{r}}}\mathcal{F}^1\delta\chi^{\mathrm{r}} + \partial_{\chi^{\mathrm{i}}}\mathcal{F}^1\delta\chi^{\mathrm{i}} &= 2\mathrm{Re}(g^*\delta\chi), \\
&= g^*\delta\chi + g(\delta\chi)^*, \\
&= (g^* + g)\delta\chi^{\mathrm{r}} + i(g^* - g)\delta\chi^{\mathrm{i}}, \\
&= (2\mathrm{Re}g)\delta\chi^{\mathrm{r}} + (2\mathrm{Im}g)\delta\chi^{\mathrm{i}}.
\end{aligned}$$

Puisque la perturbation est arbitraire, par identification on a $\partial_{\chi^{\mathrm{r}}}\mathcal{F}^1 = 2\mathrm{Re}g$ et $\partial_{\chi^{\mathrm{i}}}\mathcal{F}^1 = 2\mathrm{Im}g$, soit

$$g \;=\; \frac{1}{2}\partial_{\chi^{\mathrm{r}}}\mathcal{F}^1 + i\frac{1}{2}\partial_{\chi^{\mathrm{i}}}\mathcal{F}^1. \tag{I.4}$$

J. Publications associées

Dans cette annexe sont reportés dans leur intégralité les articles de recherche associés aux chapitres 2 et 3.

JOURNAL OF MODERN OPTICS, 2018
VOL. 65, NO. 15, 1787–1792
https://doi.org/10.1080/09500340.2018.1459912

Taylor & Francis
Taylor & Francis Group

Check for updates

Linearized inversion methods for three-dimensional electromagnetic imaging in the multiple scattering regime

Kevin Unger[a], Ting Zhang[b], Patrick C. Chaumet[a], Anne Sentenac[a] and Kamal Belkebir[a]

[a]Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, Institut Fresnel, UMR 7249, Marseille, France; [b]Key Laboratory of Ocean Observation-Imaging Testbed of Zhejiang Province, College of Information Science and Electronic Engineering (ISEE), Zhejiang University, Hangzhou, China

ABSTRACT
In optical or microwave computational tomography, the sample permittivity is reconstructed numerically from the measurements of its scattered field for various illuminations. When the light sample interaction involves multiple scattering, the relationship between the scattered field and the permittivity is non-linear and a direct reconstruction is not possible. Using a simple physical approach, adapted to the three-dimensional vectorial electromagnetic framework, we derive an iterative inversion technique, based on the linearization of the scattering operator, for imaging (possibly anisotropic) targets in the multiple scattering regime. We investigate the performances of different approximations of this operator accounting for more or less multiple scattering. Our method is applied to the reconstruction of targets in the microwave domain using experimental data.

ARTICLE HISTORY
Received 1 December 2017
Accepted 10 March 2018

KEYWORDS
Inverse problem; vectorial scattering

1. Introduction

Fostered by the continuous improvement of computer capacity, the last 20 years have seen the rise of computational electromagnetic imaging, first in the microwave domain and more recently in optics. This imaging approach is based on an accurate modelling of the link between the recorded field and the sample permittivity and the use of an inverse technique for reconstructing the sample from the data. When the sample is weakly contrasted, the measurements are usually assumed to be linearly linked to the sample permittivity and standard direct or iterative linear inverse methods are applied to the data. When the sample supports multiple scattering, the recorded field is no more linearly linked to the sought sample permittivity distribution and the reconstruction procedure must grope its way towards a solution. The classical technique, which belongs to the linearized inversion schemes (*1*), consists in estimating iteratively the sample permittivity so as to minimize the distance (or cost functional) between the data and the field simulated for a given sample estimation. In most cases, the minimization is performed using a gradient technique. Now the derivation of the gradient of the cost functional with respect to the permittivity is not straightforward when multiple scattering is present. In practice, only a few studies have addressed the issue in the case of 3D electromagnetic imaging. Expressions obtained from the Lagrangian approach (*2*) or from a direct derivation of the cost functional (*3–6*) have thus been proposed but the complexity of their formulations hinders their comparison.

In this paper, we present a simple physic-based technique to derive the gradient in the complex configuration of 3D vectorial electromagnetic imaging of anisotropic targets. A similar approach has been used, in acoustic imaging, to provide an expression that is equivalent to that given by the Lagrangian multiplier or the direct derivation (*7*). The easy physical interpretation of the gradient permits to investigate several approximations accounting for more or less multiple scattering that are numerically more tractable. The performance of the different approximations in a standard conjugate-gradient inversion scheme are analysed on experimental microwave data.

2. The inverse problem context

We consider a target defined by its permittivity distribution $\overline{\varepsilon}$. To be as general as possible, the target permittivity may be anisotropic as long as it is reciprocal. In other words, $\overline{\varepsilon}$ is a tensor satisfying ${}^t\overline{\varepsilon} = \overline{\varepsilon}$, where ${}^t\overline{\varepsilon}$ is the transpose of the tensor $\overline{\varepsilon}$. The imaging problem consists in estimating $\overline{\varepsilon}$ in a domain under investigation Ω from the measurements $\mathcal{M}$ of the electromagnetic field taken for various observation and source positions $(\mathbf{o}, \mathbf{s}) \in \Gamma$. We call $\mathcal{E}[\overline{\varepsilon}](\mathbf{o}, \mathbf{s})$ the model of the recorded data, for a

CONTACT Anne Sentenac anne.sentenac@fresnel.fr

© 2018 Informa UK Limited, trading as Taylor & Francis Group

given observation and illumination pair, which depends on $\overline{\varepsilon}$. The inverse problem consists in finding $\overline{\varepsilon}$ such that,

$$\mathcal{M} = \mathcal{E}[\overline{\varepsilon}]. \tag{1}$$

The Maxwell equations that describe the interaction between an electromagnetic wave and an inhomogeneous medium yield a forward model $\mathcal{E}(\overline{\varepsilon})$ which is generally nonlinear with respect to $\overline{\varepsilon}$. In this case, the estimation of $\overline{\varepsilon}$ satisfying Equation (1) is not straightforward. The simplest approach from a conceptual point of view consists in minimizing iteratively the error $\mathcal{M} - \mathcal{E}(\overline{\varepsilon})$ by modifying the permittivity $\overline{\varepsilon}$ with a small perturbation $\overline{\delta\varepsilon}$, using

$$\mathcal{E}[\overline{\varepsilon} + \overline{\delta\varepsilon}] - \mathcal{E}[\overline{\varepsilon}] = \mathcal{D}[\overline{\delta\varepsilon}] + o(\overline{\delta\varepsilon}), \tag{2}$$

where $\mathcal{D}$ is a linear operator (known as the Fréchet operator) which transforms an Ω-tensor into a Γ-function. For each iteration step, the estimation of $\overline{\delta\varepsilon}$ minimizing $\mathcal{M} - \mathcal{E}[\overline{\varepsilon}] - \mathcal{D}[\overline{\delta\varepsilon}]$ is obtained with a standard linear inversion scheme (*8*). This technique is very expensive numerically and more tractable methods in which $\overline{\delta\varepsilon}$ is sought along a particular direction $\overline{u}$ are often preferred. In these approaches, $\overline{\delta\varepsilon}$ is written as $\overline{\delta\varepsilon} = \alpha\overline{u}$ and the scalar α only is optimized. The search direction $\overline{u}$ is usually built from the gradient of a cost functional $\mathcal{F}(\overline{\varepsilon})$ representing the distance between the data and the model with respect to $\overline{\varepsilon}$. To define this distance, one introduces an inner product on Γ,

$$\langle e, f\rangle_\Gamma = \sum_{(\mathbf{o},\mathbf{s})\in\Gamma} e^*(\mathbf{o},\mathbf{s}) f(\mathbf{o},\mathbf{s}), \tag{3}$$

where a^* stands for the conjugate of a, so that $\mathcal{F}(\overline{\varepsilon})$ reads,

$$\mathcal{F}(\overline{\varepsilon}) \propto \|\mathcal{M} - \mathcal{E}[\overline{\varepsilon}]\|_\Gamma^2 = \|h\|_\Gamma^2, \tag{4}$$

where $h(\mathbf{o},\mathbf{s}) = \mathcal{M}(\mathbf{o},\mathbf{s}) - \mathcal{E}[\overline{\varepsilon}](\mathbf{o},\mathbf{s})$ denotes the residual error computed from Equation (1). Recalling that the gradient $\overline{g}$ is the vector $\overline{u}$ in Ω that maximizes the directional derivative

$$\lim_{t\to 0} \frac{\mathcal{F}(\overline{\varepsilon} + t\overline{u}) - \mathcal{F}(\overline{\varepsilon})}{t}, \tag{5}$$

one easily finds that

$$\overline{g} = -\mathcal{D}^\dagger[h], \tag{6}$$

where the adjoint operator $\mathcal{D}^\dagger$ is defined as, $\langle \mathcal{D}^\dagger[e], \overline{\eta}\rangle_\Omega = \langle e, \mathcal{D}[\overline{\eta}]\rangle_\Gamma$, with the Frobenius inner product over Ω

$$\left\langle \overline{e}, \overline{f}\right\rangle_\Omega = \int_\Omega \overline{e}^*(\mathbf{r}) : \overline{f}(\mathbf{r})\mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{7}$$

where $\overline{a} : \overline{b} = \sum_{ij} a_{ij} b_{ij}$ in an orthogonal basis representation.

The Fréchet operator, which linearizes the scattering problem, is thus a key issue of most inversion schemes. In the following, we derive its expression in the general framework of electromagnetic scattering by anisotropic inhomogeneous media.

3. Derivation of the Fréchet operator

We consider an imaging configuration where the target is illuminated by a monochromatic dipole antenna $\mathbf{p}_s$ located at the position $\mathbf{s}$ and the recorded data correspond to the electric field observed at the observation point $\mathbf{o}$ projected onto the observation dipole antenna $\mathbf{p}_o$. We start from a reference inhomogeneous medium described by its reciprocal permittivity tensor $\overline{\varepsilon}$. We call $\mathbf{E}_\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{s})$ the electric field observed at $\mathbf{r}$ in the reference medium, radiated by a monochromatic dipole $\mathbf{p}_s$ located at the position $\mathbf{s}$ and $\overline{\mathbf{G}}$ the monochromatic Green tensor of the medium. By definition, $\mathbf{E}_\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{s}) = \overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{s})\mathbf{p}_s$. We now introduce a permittivity fluctuation $\overline{\delta\varepsilon}$ in the domain under investigation Ω. According to the volume integral equation stemming from Maxwell equations (*9*), the field in the perturbed medium created by the source $\mathbf{p}_s$, $\mathbf{E}_{\varepsilon+\delta\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s})$, can be written as the field in the reference medium $\mathbf{E}_\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{s})$ plus the field radiated by the induced sources $\overline{\delta\varepsilon}\mathbf{E}_{\varepsilon+\delta\varepsilon}$,

$$\mathbf{E}_{\varepsilon+\delta\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s}) = \mathbf{E}_\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{s}) + \int_\Omega \overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\overline{\delta\varepsilon}(\mathbf{r}')\mathbf{E}_{\varepsilon+\delta\varepsilon}(\mathbf{r}',\mathbf{s})\mathrm{d}\mathbf{r}'. \tag{8}$$

Taking $\mathbf{r} = \mathbf{o} \in \Gamma$ and projecting the field on the observation antenna $\mathbf{p}_o$ yield the data model,

$$\mathcal{E}[\overline{\varepsilon} + \overline{\delta\varepsilon}](\mathbf{o},\mathbf{s}) = \mathcal{E}[\overline{\varepsilon}](\mathbf{o},\mathbf{s}) + \int_\Omega \mathbf{p}_o \cdot \overline{\mathbf{G}}(\mathbf{o},\mathbf{r})\overline{\delta\varepsilon}(\mathbf{r})\mathbf{E}_{\varepsilon+\delta\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s})\mathrm{d}\mathbf{r}. \tag{9}$$

The reciprocity theorem (*10*), valid in a reciprocal inhomogeneous medium, $\mathbf{u}\cdot\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_u,\mathbf{r}_v)\mathbf{v} = \mathbf{v}\cdot\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_v,\mathbf{r}_u)\mathbf{u}$, permits to rewrite Equation (9) as,

$$\mathcal{E}[\overline{\varepsilon} + \overline{\delta\varepsilon}](\mathbf{o},\mathbf{s}) - \mathcal{E}[\overline{\varepsilon}](\mathbf{o},\mathbf{s}) = \int_\Omega \overline{\delta\varepsilon}(\mathbf{r})\mathbf{E}_{\varepsilon+\delta\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s})\cdot\mathbf{E}_\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{o})\mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{10}$$

where $\mathbf{E}_\varepsilon(\mathbf{r},\mathbf{o}) = \overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{o})\mathbf{p}_o$ is the field observed at $\mathbf{r}$ in the reference medium generated by the antenna $\mathbf{p}_o$ located at the position $\mathbf{o}$. Subtracting Equation (8) in the right-hand term of Equation (10), one can build a series in all orders of $\overline{\delta\varepsilon}$ whose first term yields the Fréchet operator (and the second term is the Hessian),

$$\mathcal{D}[\overline{\delta\varepsilon}](\mathbf{o},\mathbf{s}) = \int_{\Omega} \overline{\delta\varepsilon}(\mathbf{r})\mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s}) \cdot \mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{o})\mathrm{d}\mathbf{r},$$
$$\mathcal{D}(\mathbf{o},\mathbf{s},\mathbf{r})\overline{\delta\varepsilon}(\mathbf{r}) = \left[\mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{o}) \otimes \mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s})\right] : \overline{\delta\varepsilon}(\mathbf{r}). \quad (11)$$

Equation (11) shows that the estimation of the Fréchet operator and the related gradient requires only the calculation of two fields in the reference medium, one generated by an emitter located at the source position $\mathbf{s}$ and one generated by an emitter located at the observation position $\mathbf{o}$.

4. Reconstruction of targets

To compare our formulation to the gradients given in the literature, we consider an imaging problem in which the targets are made of isotropic materials (the sought permittivity is a scalar) and the source and observation antennas $(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_o)$ belong to fixed independent domains Γ_s and Γ_o with N_s and N_o points, respectively. In this case, the Fréchet operator transforming a function of $\mathbf{r} \in \Omega$ in a function of $(\mathbf{o},\mathbf{s}) \in \Gamma$ reads, $\mathcal{D}(\mathbf{o},\mathbf{s},\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s}) \cdot \mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{o})$ and the gradient given by Equation (6) reads,

$$g(\mathbf{r}) = -\sum_{\mathbf{s}\in\Gamma_s} \mathbf{E}^*_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s}) \cdot \left[\sum_{\mathbf{o}\in\Gamma_o} \mathbf{E}^*_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{o})h(\mathbf{o},\mathbf{s})\right]. \quad (12)$$

The expression 12 is similar to that obtained with the Lagrange multiplier (*2*). It is the dot product of two near-fields in the medium of permittivity ε, one stemming from the emitter $\mathbf{p}_s$ and one stemming from a source located at the observation points, $\mathbf{S}_s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{o}\in\Gamma_o} h(\mathbf{o},\mathbf{s})\mathbf{p}_o$ $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{o})$. These $2N_s$ electric fields can be computed with any Maxwell equation solver (*9*). Yet, if the domain under investigation is large, this rigorous calculation can be time consuming and the use of approximate models for estimating the fields in Equations (12) and (4) (Born (*11*), Rytov (*12*), Beam Propagation Method (*13*) among others) may be interesting.

In the following, we investigate the performance of different gradient approximations in a standard conjugate gradient inversion scheme (*3*) applied to the reconstruction of targets in the microwave domain.

For an arbitrary permittivity $\varepsilon(\mathbf{r})$, the field $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ is computed at any position $\mathbf{r}$ of the domain under investigation Ω with the method of moments (*14*, *15*) which consists in discretizing Equation (8); Ω is split into elemental units little enough so that the Green function $\overline{\mathbf{G}}$, the permittivity ε and the field $\mathbf{E}$ can be assumed constants inside each unit: the computation of the field is reduced to the resolution of a linear system with the value of the field at the different units as unknowns. Many standard linear solvers exists and we use a biconjugate gradient method to compute quickly and with accuracy the field (*16*).

The algorithm implemented in this study minimizes the distance

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \frac{\sum_l \|\mathbf{E}^{\mathrm{mes}}_l - \mathbf{E}^{\mathrm{d}}_l(\varepsilon)\|^2_{\Gamma_o}}{\sum_l \|\mathbf{E}^{\mathrm{mes}}_l\|^2_{\Gamma_o}}, \quad (13)$$

between the measured detected field $\mathbf{E}^{\mathrm{mes}}$ and the detected field $\mathbf{E}^{\mathrm{d}}(\varepsilon)$ that would be computed for a sample of permittivity ε with the scattering model. The minimization is performed thanks to a classical gradient technique which updates iteratively ε with the relation

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + \alpha_n d_n, \quad (14)$$

where d_n is the Polak-Ribiére descent

$$d_n = g_n + a_{n,\varepsilon} d_{n-1}, \quad (15)$$

with

$$a_{n,\varepsilon} = \frac{< g_n | g_n - g_{n-1} >_{\Omega}}{\|g_{n-1}\|^2_{\Omega}}, \quad (16)$$

and g_n is computed with Equation (12); and α_n is a real number which minimizes the cost functional $\mathcal{F}$ at the next iteration.

Among the various approximations possible to compute the fields in the gradient $g(\mathbf{r})$, we consider only the Born approximation and the rigorous calculation to distinguish clearly the two states, accounting thoroughly or not at all for multiple scattering. In addition, we do not use any regularization to avoid any bias in the comparisons. In all cases, Equation (4) is evaluated using a rigorous calculation of $\mathcal{E}[\overline{\varepsilon}]$.

The first approximation, called Born-Born, consists in supposing that $\overline{\varepsilon}(\mathbf{r}) - 1$ is small enough for $\mathbf{E}_{\varepsilon}$ to be close to the field existing in vacuum $\mathbf{E}_{\mathrm{vac}}$. This approximation, amounts to overlooking any perturbation induced by $\overline{\varepsilon}$, and thus any possible multiple scattering in the estimation of the Fréchet operator. The expression of $\mathbf{E}_{\mathrm{vac}}$ being analytically, the calculation is quasi-instantaneous.

The second approximation, called Born-Rig, accounts for some multiple-scattering. It still replaces $\mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{o})$ by $\mathbf{E}_{\mathrm{vac}}(\mathbf{r},\mathbf{o})$ but it calculates rigorously $\mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s})$. This choice is dictated by the fact that a rigorous calculation of $\mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{o},\mathbf{s})$ is anyway necessary for estimating the residue, Equation (4), and the near-field in Ω, $\mathbf{E}_{\varepsilon}(\mathbf{r},\mathbf{s})$, is an easy to get by-product of this computation. This is particularly true if one uses a volume integral method (*9*). This approximation can be found in several studies (*3*). From a computational point of view, the Born-Rig approximation, requires the solving of N_s forward problems at each iteration of the algorithm.

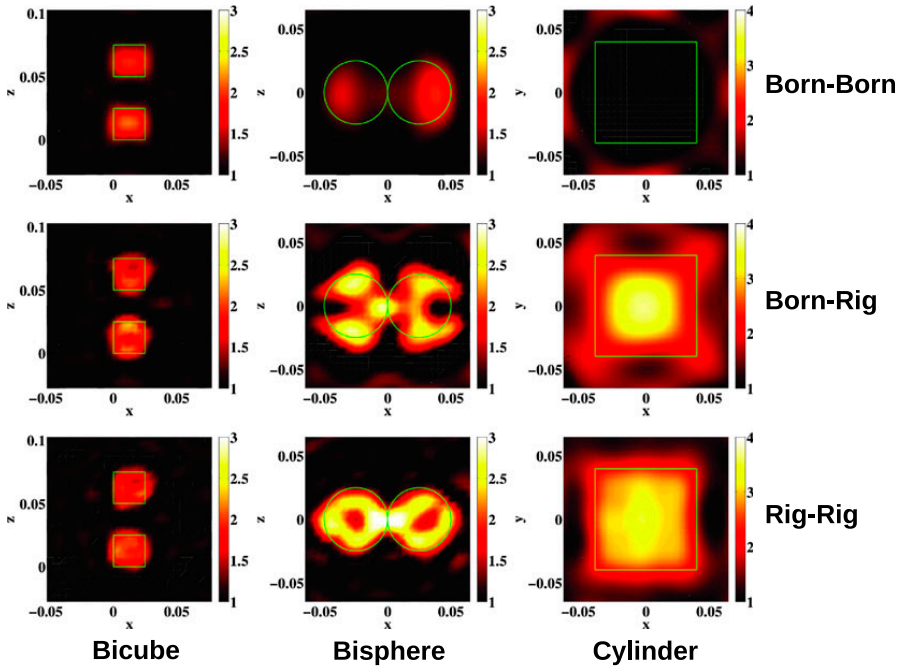

Figure 1. Target reconstructions using three different expressions for the gradient. The units of the figure are in centimeter. (*left column*) two cubes with edge $a = 2.5$ cm and $\varepsilon = 2.4$ at 8 GHz ($\lambda = 3.75$ cm); (*center column*) two touching spheres with radius $r = 2.5$ cm and $\varepsilon = 2.6$ at 5 GHz ($\lambda = 6$ cm); (*right column*) a circular-basis cylinder with radius $r = 4$ cm, height $h = 8$ cm and $\varepsilon = 3.05$ at 3 GHz ($\lambda = 10$ cm). The (*first*), (*second*) and (*third line*) correspond to the reconstructions with Born-Born, Born-Rig and Rig-Rig gradients, respectively. The solid line indicates the exact contour of the real object. For each case except Born-Born Cylinder and Born-Rig Cylinder, the 100th iteration is shown from which the cost functional reaches a plateau. For the cylinder, however, the multiple scattering is so strong inside the sample that the cost functional diverges after the 5th iteration under the Born-Born approximation and shows a chaotic evolution under the Born-Rig approximation. The 5th iteration under the Born-Born approximation is shown. The 63th iteration under the Born-Rig approximation where the cost functional reaches its lowest value is shown. For more details about the convergence of the cost functional, see Figure 2.

The third evaluation of the gradient, called Rig-Rig, corresponds to the rigorous calculation and it requires the solving of $2N_s$ forward problems at each iteration.

We study the effectiveness of the three approximations previously described in the reconstruction process thanks to the Fresnel database. The database provides experimental scattered fields associated to different targets with low, moderate and strong multiple scattering. The imaging configuration is thoroughly described in Refs. (*17*–*19*). Each target of the database is illuminated by 81 polarized antennas and the complex amplitude of the scattered field is collected on 36 observation antennas. The antennas are distributed on a sphere of radius 1.796 m with the target at the center. The precise positions of the source and receiver antennas are described in Sections 2.3 *Sources locations* and 2.4 *Receiver locations* in Ref. (*17*). The scattered fields have been measured at different illuminating frequencies ranging from 3 to 8 GHz. The measurements have been performed in an electromagnetic anechoic chamber and the target position was far from any dielectric dioptres. With these experimental precautions, the free space configuration can be assumed. Among the different targets available, we choose to study three particular targets. The first target is composed of two identical cubes (edge 2.5 cm, relative permittivity 2.4) separated from each other of 2.5 cm along the z axis. The second target is composed of two identical balls (radius 2.5 cm, relative permittivity 2.6) in contact along the x axis. The third target is a cylinder with a circular basis (height 8 cm, radius 4 cm, relative permittivity 3.05) oriented along the x axis. The bicube, the bisphere and the cylinder show increasing scattering capacities and multiple scattering.

Since the studied targets have been well characterized, we estimate the quadratic susceptibility error $\mathrm{Err}(\varepsilon) = \frac{\|\varepsilon-\varepsilon^{\mathrm{true}}\|^2_\Omega}{\|\varepsilon^{\mathrm{true}}-1\|^2_\Omega}$ between the reconstructed permittivity with re-

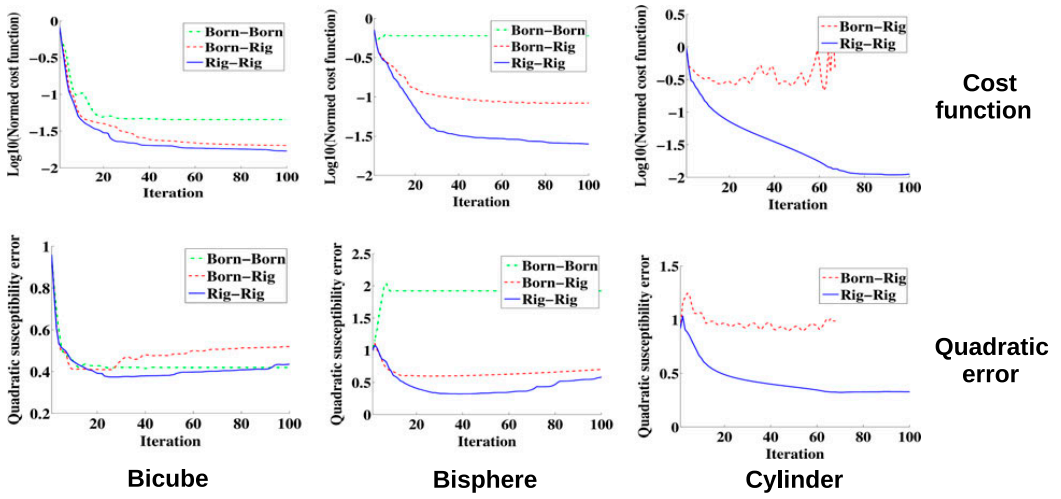

Figure 2. Evolution of the cost functional (*first line*) and of the quadratic susceptibility error $\frac{\|\varepsilon-\varepsilon^{\text{true}}\|^2_\Omega}{\|\varepsilon^{\text{true}}-1\|^2_\Omega}$ (*second line*) with respect to the iterations using three different expressions for the gradient. (*left column*) two cubes with edge $a = 2.5$ cm and $\varepsilon = 2.4$ at 8 GHz ($\lambda = 3.75$ cm); (*center column*) two touching spheres with radius $r = 2.5$ cm and $\varepsilon = 2.6$ at 5 GHz ($\lambda = 6$ cm); (*right column*) a circular-basis cylinder with radius $r = 4$ cm, height $h = 8$ cm and $\varepsilon = 3.05$ at 3 GHz ($\lambda = 10$ cm).

spect to the real target permittivity $\varepsilon^{\text{true}}$ (Figure 2). When the targets are weakly scattering, Figure 1 (left column), the reconstruction obtained with the Born-Rig or even the Born-Born approximation is satisfactory (Err(ε) = 40%). When the targets support moderate multiple scattering, Figure 1 (center column), the influence of the different gradient approximations becomes visible : Born-Rig and Rig-Rig (Err(ε) = 50%) better estimate the high spatial frequencies of the dimer, especially at the contact point, than Born-Born (Err(ε) = 200%). When the object supports strong multiple scattering as in Figure 1(right column) the Rig-Rig reconstruction (Err(ε) = 40%) is significantly better than the Born-Rig one (Err (ε) = 100%) while the Born-Born algorithm diverges after the first iteration.

5. Conclusion

In conclusion, we have given a simple physics-based approach for deriving an iterative inversion scheme adapted to electromagnetic imaging in the multiple scattering regime. We have investigated the performance of different search strategies under the conditions of weak and strong multiple scattering. We have shown that a rigorous evaluation of these directions, requiring the solving of many forward problems, is not always necessary. This study paves the way to the development of approximate iterative inversion techniques that are less time consuming in the moderate multiple scattering regime.

Disclosure statement

No potential conflict of interest was reported by the authors.

References

(1) Mudry, E.; Chaumet, P.C.; Belkebir, K.; Sentenac, A. Electromagnetic Wave Imaging of Three-dimensional Targets Using a Hybrid Iterative Inversion Method. *Inverse Probl.* **2012,** *28,* 065007.
(2) Voznyuk, I.; Litman, A.; Tortel, H. Efficient Combination of a 3d Quasi-Newton Inversion Algorithm and a Vector Dual-primal Finite Element Tearing and Interconnecting Method. *Inverse Probl.* **2015,** *31,* 085005.
(3) Chaumet, P.C.; Belkebir, K. Three-dimensional Reconstruction from Real Data Using a Conjugate Gradient-coupled Dipole Method. *Inverse Probl.* **2009,** *25,* 024003–17.
(4) De Zaeytijd, J.; Franchois, A. Three-dimensional Quantitative Microwave Imaging from Measured Data with Multiplicative Smoothing and Value Picking Regularization. *Inverse Probl.* **2009,** *25,* 024004.
(5) Yuan, M.; Yu, C.; Liu, Q.H. Reconstruction of 3D Objects from Multi-frequency Experimental Data with a Fast DBIM-BCGS Method. *Inverse Probl.* **2009,** *25,* 024007–24.
(6) Soubies, E.; Pham, T.-A.; Unser, M. Efficient Inversion of Multiple-scattering Model for Optical Diffraction Tomography. *Optics Exp.* **2017,** *25* (Aug), 21786.
(7) Norton, S.J. Iterative Inverse Scattering Algorithms: Methods Of Computing Fréchet Derivatives. *J. Acoust. Soc. Amer.* **1999,** *106,* 2653–2660.

(8) Roger, A. Newton-Kantorovitch Algorithm Applied to an Electromagnetic Inverse Problem. *IEEE Trans. Antennas Propag.* **1981,** *29,* 232–238.
(9) Kahnert, F.M. Numerical Methods in Electromagnetic Scattering Theory. *J. Quant. Spect. Rad. Transf.* **2003,** *79–80,* 775–824.
(10) Van Bladel, J.G. *Electromagnetic Fields, 2nd Edition*. IEEE Press Ser. Electromagn. Wave Theory, IEEE Press: Wiley, **2007**.
(11) Wolf, E. Three-dimensional Structure Determination of Semi-transparent Objects from Holographic Data. *Opt. Commun.* **1969,** *1,* 153–156.
(12) Carminati, R. Phase Properties of the Optical Near Field. *Phys. Rev. E* **1997,** *55*(May), R4901–R4904.
(13) Liu, J.M.; Gomelsky, L. Vectorial Beam Propagation Method. *J. Opt. Soc. Amer. A* **1992,** *9* (Sep), 1574.
(14) Draine, B.T.; Flatau, P.J. Discrete-dipole Approximation for Scattering Calculations. *J. Opt. Soc. Am. A* **1994,** *11,* 1491–1499.
(15) Chaumet, P.C.; Sentenac, A.; Rahmani, A. Coupled Dipole Method for Scatterers with Large Permittivity. *Phys. Rev. E* **2004,** *70,* 036606–6.
(16) Chaumet, P.C.; Rahmani, A. Efficient Iterative Solution of the Discrete Dipole Approximation for Magneto-dielectric Scatterers. *Opt. Lett.* **2009,** *34,* 917–919.
(17) Geffrin, J.M.; Sabouroux, P. Continuing with the Fresnel Database: Experimental Setup and Improvements in 3D Scattering Measurements. *Inverse Probl.* **2009,** *25,* 024001.
(18) Eyraud, C. J.-M geffrin, A. Litman, P. Sabouroux, and H. Giovannini. Drift Correction for Scattering Measurements. *Appl. Phys. Lett.* **2006,** *89,* 244104.
(19) Eyraud, C.; Geffrin, J.M.; Sabouroux, P.; Chaumet, P.C.; Tortel, H.; Giovannini, H.; Litman, A. Validation of 3D Bistatic Microwave Scattering Measurement Setup. *Radio Sci* **2008,** *43,* RS4018.

Research Article Vol. 36, No. 11 / November 2019 / Journal of the Optical Society of America A C1

Journal of the Optical Society of America A
OPTICS, IMAGE SCIENCE, AND VISION

Versatile inversion tool for phaseless optical diffraction tomography

Kevin D. Unger, Patrick C. Chaumet, Guillaume Maire, Anne Sentenac,* and Kamal Belkebir

Institut Fresnel, Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, Marseille, France
*Corresponding author: anne.sentenac@fresnel.fr

Received 12 March 2019; revised 18 June 2019; accepted 27 June 2019; posted 27 June 2019 (Doc. ID 362166); published 26 July 2019

Estimating three-dimensional complex permittivity of a sample from the intensity recorded at the image plane of a microscope for various angles of illumination, as in optical Fourier ptychography microscopy, permits one to avoid the interferometric measurements of classical tomographic diffraction microscopes (TDMs). In this work, we present a general inversion scheme for processing intensities that can be applied to any microscope configuration (transmission or reflection, low or high numerical aperture), scattering regime (single or multiple scattering), or sample-holder geometries (with or without substrate). The inversion procedure is tested on a wide variety of synthetic experiments, and the reconstructions are compared to that of TDMs. In most cases, phaseless data yield the same result as complex data, thus paving the way toward a drastic simplification of TDM implementation. © 2019 Optical Society of America

https://doi.org/10.1364/JOSAA.36.0000C1

1. INTRODUCTION

Optical diffraction tomography (ODT) [1], or tomographic diffraction microscopy (TDM) [2], is a quantitative imaging technique in which a sample is illuminated by a collimated laser beam under various angles of incidence, and an interferometric technique allows the recording of both the phase and intensity of the image fields. The permittivity of the sample is reconstructed numerically from the stack of complex fields using an inversion procedure. This approach proved to be particularly promising for obtaining three-dimensional images of marker-free samples with a resolution better than that of the best analogical microscopes and, in some cases, even beyond the diffraction limit [3,4].

Unfortunately, despite these achievements, TDM has still not been widely adopted as a reference imaging tool. In particular, the necessity to measure the phase of the image field, which complicates the setup and prevents the use of conventional microscopes, appears as a significant drawback. Thus, achieving the same performances with a simpler tomographic mounting in which only the intensity is recorded would enhance the interest for this computational imaging technique.

Phaseless diffraction tomography, in which the sample permittivity is reconstructed from intensity images recorded under various incident angles, has been recently popularized under the name of optical Fourier ptychography (OFP) [5–8]. Yet, up to now, it has been studied only in the case of transmission configuration with low numerical aperture (NA) objectives. These restrictions allow the use of approximate scalar forward models (such as the beam propagation method), which eases significantly the reconstruction procedure. Qualitative 3D images of large samples with a moderate resolution (about a few micrometers) were obtained with this approach.

Now, to push forward the interest of phaseless tomography, its performances should be investigated with high NA objectives in both transmission and reflection geometries and for samples that potentially support multiple scattering. In these cases, the scalar approximate forward models on which the inversion schemes of OFP are presently based are not always valid. Hence, developing an inversion scheme that does not depend on a specific forward model and can be applied to any method for simulating the data would greatly enlarge the application domain of phaseless tomography.

In this work, we describe a versatile inversion procedure for phaseless diffraction tomography that provides reconstructions of the sample permittivity distribution in any imaging configuration. The key point of our inversion approach is that it does not depend on the model linking the recorded intensities to the sought permittivity distribution. Thus, it can be used with the approach best adapted to the samples: Born approximation in the weak scattering regime, beam propagation method in the forward scattering regime, or rigorous solver of Maxwell equations in the multiple scattering regime.

2. DERIVATION OF THE INVERSION SCHEME

We derive the inversion procedure for a very general monochromatic tomographic microscope in the rigorous framework of electromagnetism [9,10].

1084-7529/19/1100C1-08 Journal © 2019 Optical Society of America

We introduce a reference geometry corresponding to the microscope *in the absence of the sample* (encompassing the lenses, glass slide, splitting cubes, sample holder, etc.), which is described by a spatially varying relative permittivity ε_{ref}. In the presence of the sample, the relative permittivity of the entire system becomes ε. Our aim is to estimate the sample contrast, $\chi = \varepsilon - \varepsilon_{\text{ref}}$. Hereafter, the latter is assumed to be equal to 0 outside a predefined bounded domain Ω. In addition, we assume that χ is scalar (isotropic media) but anisotropy can be accounted for without major modifications, as shown in Refs. [9,10].

The sample is lit by L different illuminations of wavenumber $k_0 = 2\pi/\lambda$ (which can be, but are not restricted to, collimated beams under various incident angles) that are generated by source distributions $\mathbf{Q}_l(\mathbf{r})$ for $l = 1, \ldots, L$ (usually point sources at the backfocal plane of the objective for providing a collimated beam in Ω), and the field intensity is recorded at the observation points $\mathbf{o}_{m=1,\ldots,M}$ of a domain Γ (which is generally the CCD camera).

We call $\mathbf{E}_l(\mathbf{r})$ the field generated by the l-th illumination in the microscope *in the presence of the sample*. It satisfies the equation

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_l(\mathbf{r}) - k_0^2 \varepsilon_{\text{ref}}(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}_l(\mathbf{r}) + k_0^2 \chi(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r}), \quad (1)$$

with outgoing boundary condition. The total field $\mathbf{E}_l(\mathbf{r})$ can be written as the sum of a reference field (i.e., the field that would exist in the absence of the sample) generated by $\mathbf{Q}_l(\mathbf{r})$, $\mathbf{E}_l^{\text{ref}}(\mathbf{r})$, and a sample field (or scattered field) $\mathbf{E}_l^{\text{diff}}(\mathbf{r})$ generated by the induced source $k_0^2 \chi(\mathbf{r}) \mathbf{E}_l(\mathbf{r})$.

We assume that we have a forward solver that is able to compute this field, at any point $\mathbf{o} \in \Gamma$ and for any χ in Ω. Then, the intensity recorded at the observation point $\mathbf{o}$ is modeled by $|\mathbf{E}_l(\mathbf{o})|^2$.

In addition, we assume that the forward solver is able to simulate the field at any point $\mathbf{r} \in \Omega$ that is radiated by any point source $\mathbf{Q}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{o})$ located at the observation domain, $\mathbf{o} \in \Gamma$. This field, hereafter denoted by $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{o}, \mathbf{Q})$, is the solution of Eq. (1) with the source $\mathbf{Q}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{o})$.

The inversion scheme consists of estimating iteratively χ in Ω so as to minimize the intensity-based diffractive tomography (IDT) cost functional,

$$\mathcal{F}(\chi) = \frac{\sum_{l=1}^{L} \| I_l^{\text{mes}} - |\mathbf{E}|^2 \|_\Gamma^2}{\sum_{l=1}^{L} \| I_l^{\text{mes}} \|_\Gamma^2}, \quad (2)$$

where I^{mes} represents the actual intensities. The distance $\| \cdot \|_\Gamma$ is induced by the Hermitian product on Γ defined by $\langle f, g \rangle_\Gamma = \int_{\mathbf{o} \in \Gamma} f^*(\mathbf{o}) g(\mathbf{o}) \mathrm{d}\mathbf{o}$, where * is the complex number conjugation. A similar distance will be defined for Ω.

For simplifying the notations, we introduce the residue $h_l(\mathbf{o}) = I_l^{\text{mes}}(\mathbf{o}) - |\mathbf{E}_l(\mathbf{o})|^2$ for any $\mathbf{o} \in \Gamma$ and introduce the normalizing factor $W_\Gamma = 1/\sum_l \| I_l^{\text{mes}} \|_\Gamma^2$.

The cost functional is minimized due to a classical gradient technique that updates iteratively χ with the relation

$$\chi_n = \chi_{n-1} + \alpha_n d_n, \quad (3)$$

where d_n is the Polak–Ribière descent

$$d_n = g_n + a_n d_{n-1}, \quad (4)$$

with

$$a_n = \frac{\langle g_n, g_n - g_{n-1} \rangle_\Omega}{\| g_{n-1} \|_\Omega^2}, \quad (5)$$

and g_n is the gradient at the n-th iteration of $\mathcal{F}$ with respect to χ, and α is real. Introducing Eq. (3) into Eq. (2), the cost functional is transformed into a polynomial with respect to α. Then, α is chosen so as to minimize this polynomial. The minimization can be performed analytically by finding the root of the polynomial, or it can be done numerically using a standard gradient algorithm. The main difficulty of the approach is to find the expression of the gradient, as $|\mathbf{E}_l|^2$ is related to χ in a non-explicit and non-linear form through Eq. (1). The most important result of this work lies in the rigorous expression of the gradient $g_n(\mathbf{r} \in \Omega)$, which is derived in Appendix A:

$$g_n(\mathbf{r}) = -4 W_\Gamma \sum_{l=1}^{L} \int_{\mathbf{o} \in \Gamma} \mathrm{d}\mathbf{o} [\mathbf{E}_{l,n-1}(\mathbf{r}, \mathbf{o}, h_{l,n-1}(\mathbf{o}) \mathbf{E}_{l,n-1}^*(\mathbf{o})) \cdot \mathbf{E}_{l,n-1}(\mathbf{r})]^*. \quad (6)$$

It is seen that the gradient at the n-th iteration is the sum over the illuminations of the dot product between the field generated by the l-th illumination in Ω for the previous estimation of χ, $\mathbf{E}_{l,n-1}$, and the adjoint field created in Ω by a source distribution restricted to the observation domain Γ with amplitude, $h_{l,n-1}(\mathbf{o}) \mathbf{E}_{l,n-1}(\mathbf{o})$, $\mathbf{o} \in \Gamma$.

The main interest of this gradient expression is that it does not depend on the model chosen for simulating the fields. Thus, if the samples are highly contrasted and support multiple scattering, the fields can be estimated with a rigorous Maxwell equation solver. On the contrary, if the samples are weakly scattering, the fields can be estimated with the first-order Born approximation or, if the forward scattering is dominant (as is assumed in most OFP applications), with the beam propagation method.

At this point, it is worth noting that a similar inversion scheme has been developed in Ref. [9] for inverting the data of imaging configurations that give access to the full-vectorial field $\mathbf{E}_l^{\text{mes}}$ (such as the tomographic microscope used in Ref. [11]). In this case, one estimates iteratively χ so as to minimize the vectorial-based diffractive tomography (VDT) cost functional,

$$\mathcal{F}_E(\chi) = \frac{\sum_{l=1}^{L} \| \mathbf{E}_l^{\text{mes}} - \mathbf{E}_l \|_\Gamma^2}{\sum_{l=1}^{L} \| \mathbf{E}_l^{\text{mes}} \|_\Gamma^2}, \quad (7)$$

with the same approach. The only difference lies in the gradient expression at the n-th iteration, which now reads

$$g_n^E(\mathbf{r}) = -4 W_\Gamma \sum_{l=1}^{L} \int_{\mathbf{o} \in \Gamma} \mathrm{d}\mathbf{o} [\mathbf{E}_{l,n-1}(\mathbf{r}, \mathbf{o}, \mathbf{h}_{l,n-1}^{E,*}(\mathbf{o})) \cdot \mathbf{E}_{l,n-1}(\mathbf{r})]^*. \quad (8)$$

In the field case, the amplitude of the source distribution restricted to Γ that generates the adjoint field is simply the vectorial residue $\mathbf{h}_{l,n-1}^E(\mathbf{o}) = \mathbf{E}_l^{\text{mes}}(\mathbf{o}) - \mathbf{E}_{l,n-1}(\mathbf{o})$. The two inversion schemes are thus very close to each other, which makes it easy to switch from one problem to the other.

In the following, we will study *in synthetic experiments* the performances of phaseless diffraction tomography for a wide

Research Article Vol. 36, No. 11 / November 2019 / Journal of the Optical Society of America A C3

range of configurations, (microscopes in transmission, in reflection, with and without substrate) and several samples (finely structured in the transverse plane, extended along the optical axis, highly contrasted, with and without absorption) to point out the assets and limits of this imaging tool.

3. SYNTHETIC IMAGING EXPERIMENTS

A. Imaging Configuration

We consider a microscope made of an objective and a tube lens in a 4f mounting with NA, magnification M, and optical axis z oriented from the objective to the tube lens. The modeling of the microscope has been kept simple following [12], but more sophisticated point spread functions, taking into account, e.g., possible refractive mismatch [13,14] and aberrations, can be easily implemented by solely modifying the forward solver. We define the object space as the medium before the objective. For encompassing most imaging configurations, the sample in the object space is placed on a planar substrate (usually a glass slide) with interface placed at $z = 0$. The object space is described by its permittivity $\varepsilon_{\text{ref}}(\mathbf{z}) = \varepsilon_1$ for $z > 0$ and $\varepsilon_{\text{ref}}(\mathbf{z}) = \varepsilon_2$ for $z < 0$. The equality between ε_1 and ε_2 corresponds typically to cases where the samples are plunged in a solution whose permittivity matches that of the glass slide and are imaged with an oil-immersion objective.

The sample is illuminated by a monochromatic collimated beam under various incident angles. The latter is assimilated to a linearly polarized plane wave with varying transverse wavevector $(k_x^{\text{inc}}, k_y^{\text{inc}})$. In the reflection configuration, the incident beam is generated by a source at $z > 0$ and propagates towards the negative z, while in the transmission configuration, it is generated by a source at $z < 0$ and propagates towards positive z.

All the synthetic data are obtained using a rigorous solver of Maxwell equations [15] based on volume elements for calculating the field scattered by the sample and a rigorous modeling of the microscope following [12,16,17] for estimating the field at the image focal plane. The magnification of the microscope is assumed to be one, and the field at the image focal plane is calculated on a regular grid of 256×256 observation points to mimic the camera pixels. The simulation tool (including the Maxwell Solver and the microscope) is freely accessible at [18].

The discretization step used for the investigation domain Ω is the same as the one used for recording the data at the image focal plane. It depends on the sample refractive index n and is always smaller than $\lambda/(5n)$ to describe smoothly the electric field inside Ω. The synthetic data are deteriorated with additive white noise on the real and imaginary parts of the scattered field. For each illumination, the magnitude of the noise is chosen equal to κ times the difference between the maximum and the minimum of the values taken by the real part (resp. imaginary part) of the scattered field. Except in the last section, where a specific study with respect to noise has been conducted, the noise level, κ, is taken equal to 15% in all the numerical experiments.

For each numerical experiment, less than 10 different incident angles have been used for generating the data. Reconstructions using more incident angles (not shown) were not significantly better. The important point is to choose the incident illuminations so as to ensure a good coverage of the accessible sample Fourier coefficients: in the single scattering regime, the scattered field in direction $\mathbf{k}$ obtained under incidence $\mathbf{k}_{\text{inc}}$ is proportional to the sample Fourier coefficient taken at $\mathbf{k} - \mathbf{k}_{\text{inc}}$. The angular step and span of the incident directions is determined by the size of the sample and the NA of the objective. Then, adding illuminations yields redundant information and is useful only to increase the signal-to-noise ratio.

All the iterative inversions are initialized with a constant $\chi = 0.001$ in the investigating domain Ω and are stopped when the cost functional reaches a plateau. To quantify the performance of the reconstruction at the last iteration, we introduce $\text{Err}(\chi)$ as the relative error $\frac{\|\chi - \chi^{\text{exact}}\|_\Omega^2}{\|\chi^{\text{exact}}\|_\Omega^2}$, where χ^{exact} is the actual permittivity contrast of the sample.

B. Investigating the Transverse Resolution of Phaseless Diffraction Tomography

One of the big achievements of TDM using complex field data is the significant improvement in transverse resolution compared to the equivalent conventional microscopes [11]. In this paragraph, we check if this gain is conserved with intensity data.

We consider a thin resin star (target A) made of 12 identical branches, with permittivity 2, height 160 nm, length 400 nm, and width 100 nm placed on a glass substrate that has already been used as a transverse resolution target in TDM studies [19]. The star is illuminated from the substrate, under total internal reflection, by six TM-polarized plane waves with wavelength 475 nm and wavevectors equally distributed along a 60° angle cone about the optical axis. The image field is obtained in the reflection configuration via an oil-objective (the oil index matching that of the glass slide) of $\text{NA} = 0.95$, discretized over a square grid of 256×256 pixels with step 50 nm. The object focal plane is taken at the air–glass interface, and the investigation domain Ω chosen for the inversion is a box of width 1900 nm and height 300 nm located on the glass slide. The simulations are performed with a rigorous solver of Maxwell equations.

We first study the brightfield configuration in which the specular reflection of the incident beam at the air–glass interface reaches the image plane. We thus record $|\mathbf{E}_l^{\text{ref}} + \mathbf{E}_l^{\text{diff}}|^2$. We compare the analogical brightfield image [Fig. 1(a)], obtained by summing the image intensities for all illuminations, to the numerical reconstruction, Fig. 1(d), obtained with our intensity inversion scheme in taking into account the specular reflection. As expected, the resolution of the latter is much better than that of the former. The stack of each intensity image conveys more information on the sample than the sum of these intensities.

We conduct a similar analysis in the darkfield configuration in which the specular reflection of the incident beam is filtered out and does not reach the image plane. We thus record $|\mathbf{E}_l^{\text{diff}}|^2$. The darkfield image, Fig. 1(b), obtained by summing the intensities, is compared to the numerical reconstruction, Fig. 1(e), obtained with our intensity inversion scheme without the specular reflection. The darkfield reconstruction (final relative

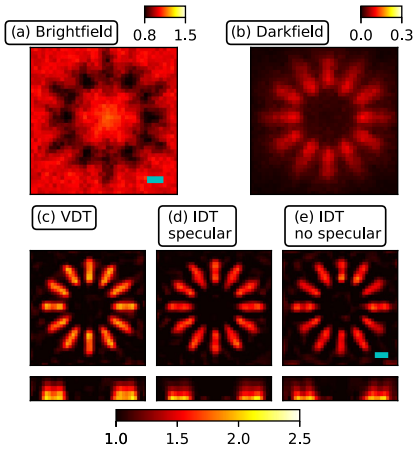

Fig. 1. (a) Brightfield image obtained by summing the image intensities for all illuminations. (b) Darkfield image obtained by filtering out the specular reflection of the incident beam and summing the image intensities for all illuminations. (c) Permittivity estimated of target A in reflection on a glass substrate with vectorial complex field data. (d) Permittivity estimated of target A in reflection on a glass substrate with intensity data. (e) Permittivity estimated of target A in reflection on a glass substrate with intensity data where the specular reflection of the incident beam has been filtered out. The green bar represents 200 nm. The final iteration is shown.

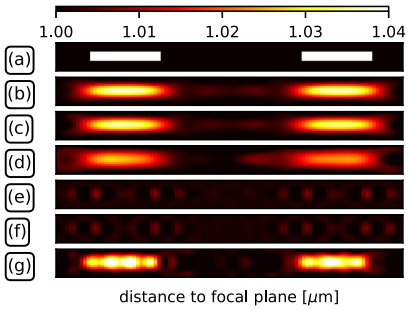

Fig. 2. (a) Theoretical permittivity of target B ($\varepsilon = 1.05$). Estimated permittivity of target B *in transmission*: (b) with complex vectorial data, (c) with intensity data, and (d) with intensity data where the specular reflection of the incident beam has been filtered out. Estimated permittivity of target B *in reflection*: (e) with complex vectorial data, (f) with intensity data in free space, and (g) with intensity data above a mirror. The final iteration is shown.

error $\mathrm{Err}(\chi) = 79\%$), Fig. 1(e), remains better than the analogical darkfield image, Fig. 1(b), but is not as good as the brightfield reconstruction (final relative error $\mathrm{Err}(\chi) = 62\%$), Fig. 1(d). This result does not come as a surprise, since the interference between the reference field and the sample field bring important information for the phase retrieval issue (as in line holography). Of course, the best reconstruction is still obtained with vectorial complex field data (final relative error $\mathrm{Err}(\chi) = 57\%$); see Fig. 1(c). However, the difference between the reconstructions being relatively small, phaseless tomography appears as a very interesting option.

C. Investigating the Axial Resolution of Phaseless Diffractive Tomography

A key point of field tomography is its ability to reconstruct a 3D sample from 2D images that are recorded at a fixed plane for different angles of illumination. Under Born approximation, it can be shown that there is a one-to-one correspondence between the 2D stack of complex field data and the 3D Fourier transform of the sample restricted to the support of the optical transfer function of the microscope (which depends on the imaging configuration, reflection, or transmission and the NA) [20]. It is thus important to check whether this property is conserved with intensity data only. We consider a sample (target B) composed of two identical cuboids (edges along x and y axes 250 nm, edge along z axis 1 μm, $\varepsilon = 1.05$) separated by 2 μm along the optical axis. The cuboids are centered at 3.5 μm and 6.5 μm from the microscope focal plane; see Fig. 2(a). In a first numerical experiment, the sample is imaged in transmission with an air objective of NA = 0.95. It is illuminated by nine TM-polarized plane waves with illumination wavevectors equally distributed within a 30° angle cone about the optical axis, and the wavelength is $\lambda = 500$ nm. The discretization step at the image plane is 50 nm $= \lambda/10$. The simulations are performed with a rigorous solver of Maxwell equations.

In this configuration, the specular transmitted beam interferes with the sample field, and we observe that the 3D reconstruction obtained from the intensity data, Fig. 2(c), is very similar to that obtained from the full-vectorial field data, Fig. 2(b). If we artificially filter out the transmitted specular beams so that only the sample field reaches the image plane (darkfield configuration), the reconstruction is not as good; see Fig. 2(d), but still meaningful. As observed in Fig. 1, the interference with a specular field is useful, but its absence does not preclude totally the reconstruction.

In a second numerical experiment, the sample is imaged in the reflection configuration. The reconstructions obtained from the complex field and the intensity data, displayed in Figs. 2(e) and 2(f), look alike. The cubes are poorly retrieved, and only the interfaces can be located. This disappointing result does not come from a failure of the inversion algorithm. It is a direct illustration of the band-pass filtering of the reflection imaging system, which cuts the low spatial frequencies of the sample [10]. Without regularization, one cannot expect a better reconstruction in this case.

In a third numerical experiment, we aim at improving the imaging of the cubes by combining the transmission and reflection configurations. The two cubes are placed above a mirror that is placed at the focal plane of the microscope $z = 0$. By reflecting the illumination and the scattered field, the mirror sends both the transmitted and reflected fields toward the image plane [21]. As expected, the reconstruction of the cubes [Fig. 2(g)] is significantly improved compared to that obtained in transmission [Fig. 2(c)] or reflection [Fig. 2(f)] in agreement with the enlarged support of the optical transfer function [21]. Note that the data provided by other techniques specifically

Research Article Vol. 36, No. 11 / November 2019 / Journal of the Optical Society of America A C5

developed for improving the resolution about the z axis, using sample rotation [22–24] or 4π configuration, e.g., could also be handled by the IDT algorithm.

D. Phaseless Tomography for Imaging Transparent and Absorbing Objects

An important limitation of the conventional brightfield microscopes [25] is that transparent (i.e., lossless) objects are invisible, while in darkfield configuration, they cannot be discriminated against lossy objects [26,27].

To be sensitive to these different contrasts, several imaging techniques, such as phase or differential interference contrast (DIC) microscopes have been developed. Now, if the recording of intensity images for various angles of incidence is sufficient for simulating a standard microscope, mimicking phase or DIC microscopy requires *a priori* the knowledge of the complex field at the image plane. The latter is obtained with the interferometric mounting of a tomographic diffraction microscope (TDM) and confers to this technique an interesting all-in-one multimodal imaging capability [28–31], but it is not accessible to our simpler configuration where phaseless data are recorded. The ability to obtain quantitative information on the complex permittivity of the sample from intensity data only is thus an important question.

In this paragraph, we consider a sample (target C) made of four cubes with different complex permittivities. The cubes of side 150 nm centered at the corners of a square of side 450 nm are placed (in air) at the object focal plane [Figs. 3(a) and 3(b)]. The cube permittivities, $\varepsilon = 1.1 + i0.1$, $\varepsilon = 1.0 + 1.0$, $\varepsilon = 2.0 + i0.5$, $\varepsilon = 1.5$, exhibit different levels of real and imaginary parts. Target C is illuminated by nine TM-polarized plane waves with polar angle 60°, azimuthal angle $q2\pi/9$ with $q = 0, \ldots, 8$ and $\lambda = 700$ nm. The discretization step at the image plane is 75 nm $= \lambda/9$. The simulations are performed with a rigorous solver of Maxwell equations. The reconstruction in the transmission configuration is given in Figs. 3(c) and 2(d). We observe that the variation on the real and imaginary levels of the permittivity of the cubes is accurately retrieved. On the other hand, the reconstruction in the reflection configuration, in Figs. 3(e) and 2(f), does not permit one to distinguish the absorbing objects from the non-absorbing ones. This phenomenon was to be expected as, without the interference with a specular reflected or transmitted beam, a cube with a given imaginary contrast signs in the same way as a cube with the same contrast made real.

These synthetic experiments show that it is possible to retrieve the nature of the targets (phase or absorbing or mixed) by measuring the intensity as long as the scattered field interferes with a reference beam. An interesting perspective would be to investigate the ability of tomographic microscopy to image anisotropic samples. Our recent theoretical work on inversion scheme shows that this kind of extension would require only minor changes in the reconstruction algorithm [9].

E. Phaseless Tomography in the Multiple Scattering Regime

Up to now, we have considered small targets or targets with low contrast for which the single scattering approximation (or Born approximation) is valid. In this paragraph, we investigate the performance of the intensity inversion scheme for a target that supports multiple scattering. The sample (target D) is made of two identical spheres in contact of diameter 250 nm ($\varepsilon = 2.05$ aligned along the x axis, Fig. 4. The contact point is placed at the object focal plane. The spheres are embedded in air and illuminated by nine TM-polarized plane waves with wavelength 450 nm and wavevectors regularly chosen along a 60° angle cone with the optical axis. The target is imaged in

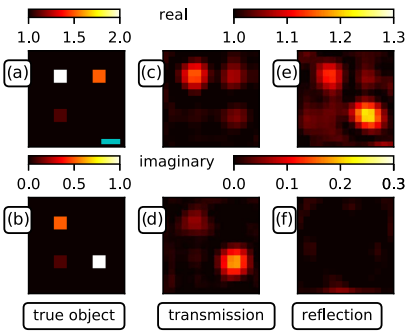

Fig. 3. Theoretical permittivity of target C: (a) real part and (b) imaginary part. Estimated permittivity of target C with intensity data *in transmission*: (c) real part and (d) imaginary part. Estimated permittivity of target C with intensity data *in reflection*: (e) real part and (f) imaginary part. The final iteration is shown. The green bar measures 200 nm.

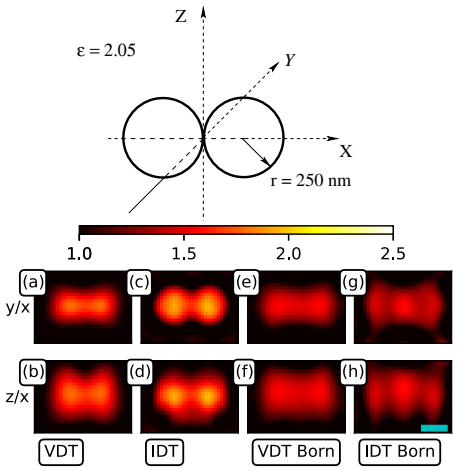

Fig. 4. Permittivity estimated of target D in transmission with complex vectorial data with rigorous computation of the field: (a) transversal plane and (b) axial plane. Permittivity estimated of target D in transmission with intensity data with rigorous computation of the field: (c) transversal plane and (d) axial plane. Permittivity estimated of target D in transmission with complex vectorial data with Born approximation: (e) transversal plane and (f) axial plane. Permittivity estimated of target D in transmission with intensity data with Born approximation: (g) transversal plane and (h) axial plane. The green bar measures 200 nm. The final iteration is shown.

transmission configuration with NA = 0.95, and the intensities are recorded at the image plane with a discretization step of 25 nm, i.e., $\lambda/18$.

We plot in Fig. 4 the reconstructions obtained from the intensities and the full vectorial field using either a rigorous solver of Maxwell equations for calculating the gradients or the Born approximation. As expected, a more accurate reconstruction is obtained when the gradients are estimated rigorously, as under the Born approximation, the inversion scheme fails to retrieve the two spheres; see Figs. 4(e)–4(h). With the rigorous solver, both spheres are retrieved. The reconstructions obtained from the intensities and the full vectorial field with rigorous computation of the field are close to final relative errors Err(χ), equal to 45% and 41%, respectively.

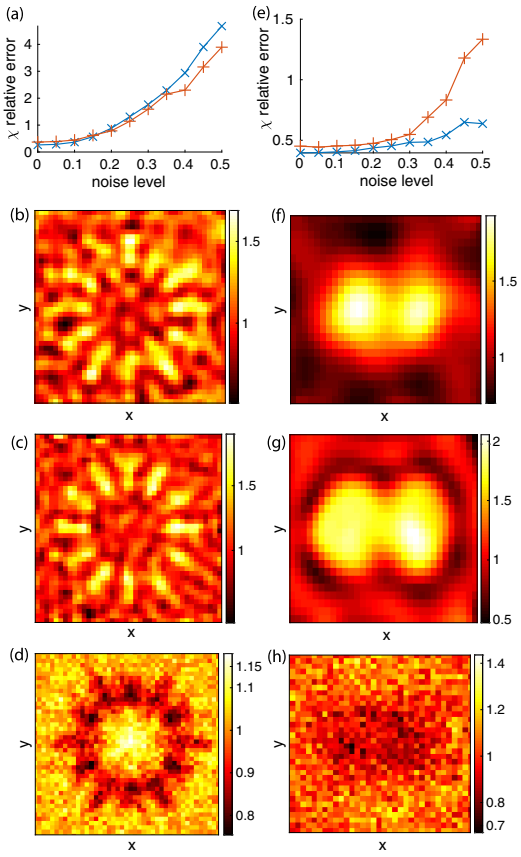

Fig. 5. Robustness of the reconstruction of target A (left column) and target D (right column) with respect to noise. Top row: evolution of the reconstruction error Err(χ) with respect to the noise level κ (red "+" curve: intensity data; blue "×" curve: complex vectorial data). Second row: final reconstructions obtained from vectorial field data with $\kappa = 25\%$. Third row: final reconstructions obtained from intensity data with $\kappa = 25\%$. Bottom row: images obtained by summing the noisy intensities. The numerical reconstructions are significantly better than the "analogical" images.

F. Robustness of the Reconstructions with Respect to Noise

In this paragraph, we investigate the performance of the reconstruction algorithms when the noise is increased. We consider two targets, the resin star (target A), which exhibits high spatial frequency features, and the bisphere (target D), which has a more regular shape but supports multiple scattering, in the same configurations as those in Sections B and E.

We increase the noise level κ from 0% to 50% and plot the reconstruction relative error Err(χ) in Fig. 5. We observe without surprise that Err(χ) increases with the noise level but that the reconstructions are always significantly better than the standard microscopy images obtained by summing all the intensities. In addition, the deterioration of the intensity-based reconstruction remains comparable to that of the field-based reconstruction. Thus, it is expected that the sensitivity to noise of the IDT algorithm be similar to that of VDT, which has been shown to be able to handle experimental data with more than 80% of noise [4].

4. CONCLUSION

In conclusion, we have presented an inversion scheme able to reconstruct the complex permittivity of a sample from intensity images obtained under various incident angles. Our algorithm can be adapted to any model used for simulating the images and to any microscope configuration (in reflection or transmission with low or high NA). We have investigated the phaseless tomography performances on four main issues—transverse super-resolution, three-dimensional reconstruction (in reflection and transmission), contrast detection, and multiple scattering regime—and compared them to that of tomography using complex field data. We have found that, in most cases, phaseless tomography exhibited the same gain in resolution and contrast as field tomography. It is thus a very interesting option for popularizing computational tomographic microscopy, as it requires minor changes in the microscope setup.

APPENDIX A: DERIVATION OF THE GRADIENT

In Appendix A, we detail the derivation of the gradient.

A. Linearization of the Scattering Model: Fréchet Derivative

Hereafter, $\mathbf{E}^{\chi}$ denotes the field existing in the medium of contrast χ for a given illumination (the subscript l is omitted). It is non-linearly linked to χ through a differential equation, given by Eq. (1). The calculation of the gradient of the cost functional requires to linearize the model linking the field $\mathbf{E}^{\chi}$ to χ. We thus introduce the Fréchet derivative, which is the unique linear operator $\overline{\mathbf{D}}_{\chi}$, which gives a linear variation of the field with respect to a small variation of the contrast $\delta\chi$:

$$\mathbf{E}^{\chi+\delta\chi} = \mathbf{E}^{\chi} + \overline{\mathbf{D}}_{\chi}\delta\chi + o(\delta\chi). \tag{A1}$$

To estimate the Fréchet derivative, we rewrite the differential equation satisfied by $\mathbf{E}^{\chi}$, Eq. (1), into the integral equation

$$\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\mathrm{ref}}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbf{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\mathbf{r}'\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}'), \tag{A2}$$

Research Article Vol. 36, No. 11 / November 2019 / Journal of the Optical Society of America A C7

where $\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\chi(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}')$ is the field existing at $\mathbf{r}$ in the microscope *without the sample* radiated by a source $\chi(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}')$ placed at $\mathbf{r}'$. If we modify χ by a small perturbation $\delta\chi$, we have

$$\mathbf{E}^{\chi+\delta\chi}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\mathrm{ref}}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbf{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\mathbf{r}'\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')(\chi+\delta\chi)(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi+\delta\chi}(\mathbf{r}'). \tag{A3}$$

Neglecting the terms of second order in $\delta\chi$ yields

$$\mathbf{E}^{\chi+\delta\chi}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}) + \int_{\mathbf{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\mathbf{r}'\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\delta\chi(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}') + o(\delta\chi). \tag{A4}$$

Since $\mathbf{E}^{\mathrm{ref}}(\mathbf{o})$ does not depend on the media, we have for a dipole $\mathbf{p}$ located at an observation position $\mathbf{o}$

$$\begin{aligned}\mathbf{p}\cdot\delta\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{o}) &= \mathbf{p}\cdot[\mathbf{E}^{\chi+\delta\chi} - \mathbf{E}^{\chi}](\mathbf{o})\\ &= \int_{\mathbf{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\mathbf{r}'\mathbf{p}\cdot\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{o},\mathbf{r}')[\delta\chi(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}')].\end{aligned} \tag{A5}$$

Now, the Lorentz reciprocity theorem states that if the two sources $\mathbf{u}$ and $\mathbf{v}$ are located at positions $\mathbf{r}$ and $\mathbf{r}'$, respectively, we have $\mathbf{u}\cdot[\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\mathbf{v}] = \mathbf{v}\cdot[\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r}',\mathbf{r})\mathbf{u}]$. We apply the reciprocity theorem on Eq. (A5) and obtain

$$\mathbf{p}\cdot\delta\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{o}) = \int_{\mathbf{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\mathbf{r}'[\delta\chi(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}')]\cdot\overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r}',\mathbf{o})\mathbf{p}. \tag{A6}$$

Introducing $\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}',\mathbf{o},\mathbf{p}) = \overline{\mathbf{G}}(\mathbf{r}',\mathbf{o})\mathbf{p}$, the field in the medium with contrast χ radiated by a source $\mathbf{p}$ located at $\mathbf{o}$, we obtain

$$\mathbf{p}\cdot\delta\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{o}) = \int_{\mathbf{r}'\in\Omega} \mathrm{d}\mathbf{r}'[\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r}',\mathbf{o},\mathbf{p})\cdot\mathbf{E}^{\chi}](\mathbf{r}')\delta\chi(\mathbf{r}'). \tag{A7}$$

By identification with Eq. (A1), we have

$$\mathbf{p}\cdot\overline{\mathbf{D}}(\mathbf{o},\mathbf{r}) = \mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{E}^{\chi}(\mathbf{r},\mathbf{o},\mathbf{p}). \tag{A8}$$

B. Detailed Derivation of the Gradient

Once the Fréchet operator is known, we introduce the gradient $\mathbf{g}$ of the cost functional $\mathcal{F}(\chi)$ with respect to χ as

$$\mathcal{F}(\chi+\delta\chi) = \mathcal{F}(\chi) + \mathrm{Re}\langle\mathbf{g},\delta\chi\rangle_{\Omega} + \mathrm{o}(\delta\chi). \tag{A9}$$

Now, let us differentiate $\mathcal{F}$ with respect to χ:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(\chi+\delta\chi) &= W_{\Gamma}\sum_{l}\|I_l^{\mathrm{mes}} - (\mathbf{E}_l^{\chi} + \overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi)^*\cdot(\mathbf{E}_l^{\chi} + \overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi)\|_{\Gamma}^2,\\ &= W_{\Gamma}\sum_{l}\|h_l - 2\,\mathrm{Re}(\mathbf{E}_l^{\chi*}\cdot(\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi)) + \mathrm{o}(\delta\chi)\|_{\Gamma}^2,\\ &= \mathcal{F}(\chi) - 2W_{\Gamma}\sum_{l}\mathrm{Re}\langle h_l, 2\,\mathrm{Re}(\mathbf{E}_l^{\chi*}\cdot(\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi))\rangle_{\Gamma}\\ &\quad + \mathrm{o}(\delta\chi),\end{aligned} \tag{A10}$$

and since h is real,

$$\mathcal{F}(\chi+\delta\chi) = \mathcal{F}(\chi) - 4W_{\Gamma}\sum_{l}\mathrm{Re}\langle h_l, \mathbf{E}_l^{\chi*}\cdot(\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi)\rangle_{\Gamma} + \mathrm{o}(\delta\chi). \tag{A11}$$

We have

$$\begin{aligned}\langle h_l\mathbf{E}_l^{\chi*}\cdot(\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi)\rangle_{\Gamma} &= \int_{\Gamma}\mathrm{d}\mathbf{r}'h_l(\mathbf{r}')\mathbf{E}^{\chi*}\cdot[\overline{\mathbf{D}}\delta\chi](\mathbf{r}'),\\ &= \int_{\Gamma}\mathrm{d}\mathbf{r}'\int_{\Omega}\mathrm{d}\mathbf{r}h_l(\mathbf{r}')\mathbf{E}_l^{\chi*}(\mathbf{r}')\cdot\overline{\mathbf{D}}_l(\mathbf{r}',\mathbf{r})\delta\chi(\mathbf{r}),\\ &= \int_{\Omega}\mathrm{d}\mathbf{r}\delta\chi(\mathbf{r})\left(\int_{\Gamma}\mathrm{d}\mathbf{r}'h(\mathbf{r}')\mathbf{E}_l^{\chi*}(\mathbf{r}')\cdot\overline{\mathbf{D}}_l(\mathbf{r}',\mathbf{r})\right)\\ &= \int_{\Omega}\mathrm{d}\mathbf{r}\delta\chi(\mathbf{r})\left[-\frac{1}{4W_{\Gamma}}\mathbf{g}_{\chi l}^*(\mathbf{r})\right].\end{aligned} \tag{A12}$$

Finally,

$$\begin{aligned}\mathbf{g}(\mathbf{r}) &= -4W_{\Gamma}\sum_{l}\mathbf{g}_l(\mathbf{r}),\\ &= -4W_{\Gamma}\sum_{l}\left(\int_{\Gamma}\mathrm{d}\mathbf{r}'h(\mathbf{r}')\mathbf{E}_l^{\chi*}(\mathbf{r}')\cdot\overline{\mathbf{D}}_l(\mathbf{r}',\mathbf{r})\right)^*.\end{aligned} \tag{A13}$$

APPENDIX B: HOW α_n AND β_n ARE DETERMINED

In Appendix B, we detail the choice of the scalars α_n and β_n in the iterative intensity and field inversion procedures.

A. Inversion from Intensity Data

The cost functional reads

$$\mathcal{F}(\chi_+\delta\chi) \approx W_{\Gamma}\sum_{l}\|h_l - 2\,\mathrm{Re}(\mathbf{E}_l^{\chi*}\cdot\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi) - |\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi|^2\|_{\Gamma}^2. \tag{B1}$$

If we set

$$P_l^0(\mathbf{r}) = h_l(\mathbf{r}), \tag{B2}$$

$$P_l^1(\mathbf{r}) = 2\,\mathrm{Re}(\mathbf{E}_l^{\chi*}\cdot\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi)(\mathbf{r}), \tag{B3}$$

$$P_l^2(\mathbf{r}) = |\overline{\mathbf{D}}_l\delta\chi|^2(\mathbf{r}), \tag{B4}$$

$$P_l^{00} = \|P_l^0\|_{\Gamma}^2, \tag{B5}$$

$$P_l^{11} = \|P_l^1\|_{\Gamma}^2, \tag{B6}$$

$$P_l^{22} = \|P_l^2\|_{\Gamma}^2, \tag{B7}$$

$$P_l^{01} = \langle P_l^0, P_l^1\rangle_{\Gamma}, \tag{B8}$$

$$P_l^{02} = \langle P_l^0, P_l^2\rangle_{\Gamma}, \tag{B9}$$

$$P_l^{12} = \langle P_l^1, P_l^2\rangle_{\Gamma}, \tag{B10}$$

we have

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(\chi+\delta\chi) \approx W_{\Gamma}\sum_{l}(&P_l^{00} + P_l^{11} + P_l^{22}\\ &- 2P_l^{01} - 2P_l^{02} + 2P_l^{12}).\end{aligned} \tag{B11}$$

At iteration $n+1$, $\chi_{n+1} = \chi_n + \delta\chi$. We choose $\delta\chi = \alpha_n d_n$, and by redefining the coefficients introduced in Eqs. (B2) to (B10), we transform the cost functional into a polynomial in α_n:

$$\mathcal{F}(\alpha_n) = W_\Gamma \sum_l (P_l^{00} + \alpha_n^2 P_l^{11} + \alpha_n^4 P_l^{22} - 2\alpha_n P_l^{01} - 2\alpha_n^2 P_l^{02} + 2\alpha_n^3 P_l^{12}). \quad \textbf{(B12)}$$

The coefficient α_n is determined by minimizing the polynomial $\mathcal{F}(\alpha_n)$.

B. Inversion of Complex-Field Data

Setting $\delta\chi = \beta_n d_n$, the cost functional reads

$$\mathcal{Q}(\chi + \delta\chi) \approx W_\Gamma \sum_l (\|\mathbf{v}_l\|_\Gamma^2 - 2\,\mathrm{Re}\langle \mathbf{E}_l^{\mathrm{d}}, \overline{\mathbf{D}}_l \delta\chi\rangle_\Gamma + \|\overline{\mathbf{D}}_l \delta\chi\|_\Gamma^2),$$
$$\approx W_\Gamma \sum_l (\|\mathbf{v}_l\|_\Gamma^2 - 2\beta_n \mathrm{Re}\langle \mathbf{E}_l^{\mathrm{d}}, \overline{\mathbf{D}}_l \mathbf{t}_\chi\rangle_\Gamma + \beta_n^2 \|\overline{\mathbf{D}}_l \mathbf{t}_\chi\|_\Gamma^2). \quad \textbf{(B13)}$$

The function $\mathcal{Q}(\beta_n)$ is a parabola, and its minimum is at the abscissa

$$\beta_n = W_\Gamma \frac{\sum_l \mathrm{Re}\langle \mathbf{E}_l^{\mathrm{d}}, \overline{\mathbf{D}}_l \mathbf{t}_{\chi l}\rangle_\Gamma}{\sum_l \|\overline{\mathbf{D}}_l \mathbf{t}_{\chi n}\|_\Gamma^2}. \quad \textbf{(B14)}$$

To speed up the computations, the coefficients of the polynomial (see Appendix A) are computed with a Born approximation on the adjoint field, i.e., that $\mathbf{u}(\mathbf{o}) \cdot \overline{\mathbf{D}}(\mathbf{o}, \mathbf{r}) \approx [\mathbf{E}^{\mathbf{u}(\mathbf{o})} \cdot \mathbf{E}](\mathbf{r})$, where $\mathbf{E}^{\mathbf{u}(\mathbf{o})}$ is the field in the absence of the sample with a dipole $\mathbf{u}(\mathbf{o})$ at observation $\mathbf{o}$.

REFERENCES

1. V. Lauer, "New approach to optical diffraction tomography yielding a vector equation of diffraction tomography and a novel tomographic microscope," J. Microsc. **205**, 165–176 (2002).
2. B. Simon, M. Debailleul, V. Georges, V. Lauer, and O. Haeberlé, "Tomographic diffractive microscopy of transparent samples," Eur. Phys. J. **44**, 29–35 (2008).
3. Y. Park, C. Depeursinge, and G. Popescu, "Quantitative phase imaging in biomedicine," Nat. Photonics **12**, 578–589 (2018).
4. T. Zhang, C. Godavarthi, P. C. Chaumet, G. Maire, H. Giovannini, A. Talneau, M. Allain, K. Belkebir, and A. Sentenac, "Far-field diffraction microscopy at λ/10 resolution," Optica **3**, 609–612 (2016).
5. L. Tian and L. Waller, "3d intensity and phase imaging from light field measurements in an led array microscope," Optica **2**, 104–111 (2015).
6. T.-A. Pham, E. Soubies, A. Goy, J. Lim, F. Soulez, D. Psaltis, and M. Unser, "Versatile reconstruction framework for diffraction tomography with intensity measurements and multiple scattering," Opt. Express **26**, 2749–2763 (2018).
7. A. M. Maiden, M. J. Humphry, and J. M. Rodenburg, "Ptychographic transmission microscopy in three dimensions using a multi-slice approach," J. Opt. Soc. Am. A **29**, 1606–1614 (2012).
8. G. Zheng, R. Horstmeyer, and C. Yang, "Wide-field, high-resolution Fourier ptychographic microscopy," Nat. Photonics **7**, 739–745 (2013).
9. K. Unger, T. Zhang, P. C. Chaumet, A. Sentenac, and K. Belkebir, "Linearized inversion methods for three-dimensional electromagnetic imaging in the multiple scattering regime," J. Mod. Opt. **65**, 1787–1792 (2018).
10. A. Sentenac and J. Mertz, "Unified description of three-dimensional optical diffraction microscopy: from transmission microscopy to optical coherence tomography: tutorial," J. Opt. Soc. Am. A **35**, 748–754 (2018).
11. T. Zhang, Y. Ruan, G. Maire, D. Sentenac, A. Talneau, K. Belkebir, P. C. Chaumet, and A. Sentenac, "Full-polarized tomographic diffraction microscopy achieves a resolution about one-fourth of the wavelength," Phys. Rev. Lett. **111**, 243904 (2013).
12. S. Khadir, P. C. Chaumet, G. Baffou, and A. Sentenac, "Quantitative model of the image of a radiating dipole through a microscope," J. Opt. Soc. Am. A **36**, 478–484 (2019).
13. M. J. Nasse and J. C. Woehl, "Realistic modeling of the illumination point spread function in confocal scanning optical microscopy," J. Opt. Soc. Am. A **27**, 295–302 (2010).
14. O. Haeberlé, "Focusing of light through a stratified medium: a practical approach for computing microscope point spread functions. Part ii: confocal and multiphoton microscopy," Opt. Commun. **235**, 1–10 (2004).
15. P. C. Chaumet, A. Sentenac, and A. Rahmani, "Coupled dipole method for scatterers with large permittivity," Phys. Rev. E **70**, 036606 (2004).
16. L. Novotny, D. W. Pohl, and P. Regli, "Light propagation through nanometer-sized structures: the two-dimensional-aperture scanning near-field optical microscope," J. Opt. Soc. Am. A **11**, 1768–1779 (1994).
17. B. Richards, E. Wolf, and D. Gabor, "Electromagnetic diffraction in optical systems. ii. Structure of the image field in an aplanatic system," Proc. R. Soc. London, Ser. A **253**, 358–379 (1959).
18. P. C. Chaumet, A. Sentenac, and D. Sentenac, "The computations were done using the free software IFDDA," https://github.com/pchaumet/IF-DDA.
19. C. Godavarthi, T. Zhang, G. Maire, P. C. Chaumet, H. Giovannini, A. Talneau, K. Belkebir, and A. Sentenac, "Superresolution with full-polarized tomographic diffractive microscopy," J. Opt. Soc. Am. A **32**, 287–292 (2015).
20. O. Haeberlé, K. Belkebir, H. Giovaninni, and A. Sentenac, "Tomographic diffractive microscopy: basics, techniques and perspectives," J. Mod. Opt. **57**, 686–699 (2010).
21. E. Mudry, P. C. Chaumet, K. Belkebir, G. Maire, and A. Sentenac, "Mirror-assisted tomographic diffractive microscopy with isotropic resolution," Opt. Lett. **35**, 1857–1859 (2010).
22. S. Vertu, J.-J. Delaunay, I. Yamada, and O. Haeberlé, "Diffraction microtomography with sample rotation: influence of a missing apple core in the recorded frequency space," Central Eur. J. Phys. **7**, 22–31 (2009).
23. B. Vinoth, X.-J. Lai, Y.-C. Lin, H.-Y. Tu, and C.-J. Cheng, "Integrated dual-tomography for refractive index analysis of free-floating single living cell with isotropic superresolution," Sci. Rep. **8**, 5943 (2018).
24. B. Simon, M. Debailleul, M. Houkal, C. Ecoffet, J. Bailleul, J. Lambert, A. Spangenberg, H. Liu, O. Soppera, and O. Haeberlé, "Tomographic diffractive microscopy with isotropic resolution," Optica **4**, 460 (2017).
25. N. Streibl, "Three-dimensional imaging by a microscope," J. Opt. Soc. Am. A **2**, 121–127 (1985).
26. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics* (Pergamon, 1959).
27. M. W. Davidson and M. Abramowitz, *Optical Microscopy* (American Cancer Society, 2002).
28. J. Lobera and J. M. Coupland, "Contrast enhancing techniques in digital holographic microscopy," Meas. Sci. Technol. **19**, 025501 (2008).
29. L. Miccio, A. Finizio, R. Puglisi, D. Balduzzi, A. Galli, and P. Ferraro, "Dynamic dic by digital holography microscopy for enhancing phase-contrast visualization," Biomed. Opt. Express **2**, 331–344 (2011).
30. J. Bailleul, B. Simon, M. Debailleul, and O. Haeberlé, "An introduction to tomographic diffractive microscopy," in *Micro- and Nanophotonic Technologies*, P. Meyrueis, M. Van de Voorde, and K. Sakoda, eds. (2017).
31. X. Fan, J. J. Healy, K. O'Dwyer, and B. M. Hennelly, "Label-free color staining of quantitative phase images of biological cells by simulated Rheinberg illumination," Appl. Opt. **58**, 3104–3114 (2019).

Optics EXPRESS

Coherent anti-Stokes Raman Fourier ptychography

SANDRO HEUKE,[1] KEVIN UNGER,[1] SAMIRA KHADIR,[1] KAMAL BELKEBIR,[1] PATRICK C. CHAUMET,[1] HERVÉ RIGNEAULT,[1,2] AND ANNE SENTENAC[1,3]

[1] *Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, Institut Fresnel, Marseille, France*
[2] *herve.rigneault@fresnel.fr*
[3] *anne.sentenac@fresnel.fr*

Abstract: We present a theoretical and numerical study of coherent anti-Stokes Raman scattering Fourier ptychography microscopy (CARS-FPM), a scheme that has not been considered so far in the previously reported CARS wide-field imaging schemes. In this approach, the distribution of the Raman scatterer density of the sample is reconstructed numerically from CARS images obtained under various angles of incidences of the pump or Stokes beam. Our inversion procedure is based on an accurate vectorial model linking the CARS image to the sample and yields both the real and imaginary parts of the susceptibility, the latter giving access to the Raman information, with an improved resolution.

© 2019 Optical Society of America under the terms of the OSA Open Access Publishing Agreement

1. Introduction

Coherent anti-Stokes Raman (CARS) microscopy is a marker-free imaging tool in which the sample is illuminated simultaneously by two intense beams at different pump and Stokes wavelengths and emits an anti-stokes radiation resulting from a non-linear light-matter interaction [1–3]. This technique permits to probe the third-order susceptibility of the sample which is highly dependent on the chemical components of the material. As a result, CARS microscopy is able to provide chemical images of biological samples [4, 5] and more recently opened interesting perspectives for histo-pathological applications [6–9]. Yet, to appear as a breakthrough in the bio-medical investigation of tissues, CARS microscopy has still to demonstrate its ability to yield highly resolved quantitative images with a reasonable acquisition rate. Because of the high power involved, CARS microscopy has been mostly implemented with focused lasers scanning the sample [1]. This point-wise approach proved to be particularly interesting for 3D sectioning of thick samples down to hundreds of micrometer of depth due to its non-linearity providing an intrinsic confocality property. On the other hand, for thin samples, *i.e.* with an axial extent of only a few micrometers (*e.g.* <10 μm), the confocality loses its relevance and the scanning technique appears orders of magnitude too slow to compete with the traditional widefield imaging of stained tissues. Hence, in the last fifteen years, several widefield configurations based on different illumination geometries for the pump and Stokes beam, such as co-propagating [10–13], folded-box [11, 14–18], oblique [19, 20], converging beam [21] or light grids [22], have been investigated in combination with holography [23] or Fourier-transform spectroscopy [24].

Surprisingly, none of these wide field studies developed a model linking the CARS image to the sample susceptibility, thus preventing any comparison in terms of resolution between the different configurations. In this work, we derive the relationship between the sample and any CARS image obtained under widefield excitation and we analyze the resolution that can be expected with a given illumination and observation configuration. Then, we investigate a novel wide-field CARS image acquisition paradigm: CARS Fourier ptychography microscopy (CARS FPM) in which various low resolved images recorded for different illumination angles of the pump or Stokes beam are processed numerically to yield the sample's complex third-order susceptibility with

#363481 https://doi.org/10.1364/OE.27.023497
Journal © 2019 Received 22 Apr 2019; revised 25 Jun 2019; accepted 25 Jun 2019; published 1 Aug 2019

high resolution [25]. This work paves the way towards highly resolved quantitative widefield CARS microscopy.

The paper is divided in three main parts. First we study the anti-Stokes radiation emitted by the sample in far-field and we link the notion of transfer function to the phase matching conditions. Second, we develop a vectorial model of the widefield CARS image of a microscope in a $4f$ configuration. Based on this model, we develop an inversion procedure able to reconstruct the sample density from several CARS images recorded for various excitations. The potential of CARS FPM is then tested on synthetic data. Last, we present a possible experimental setup with a particular attention to the requirements of a suitable laser source.

2. Analysis of the transfer function and phase matching conditions

In the literature, the concepts of phase-matching conditions and spatial frequency transfer functions are frequently used but by non-overlapping scientific communities due to a lack of mutual understanding. In this section, we show the relationship between these two approaches. Hereafter, the subscripts S, p and aS indicate affiliations to the Stokes, pump beam and anti-Stokes radiation, respectively.

The phase matching conditions tell us that, if a homogeneous non-linear infinite medium is excited by a pump and Stokes collimated beams $\mathbf{E}_{p,S}$ of angular frequency $\omega_{p,S}$ respectively and wavevectors $\mathbf{k}_{p,S}$, then it generates an anti-Stokes beam with angular frequency $\omega_{aS} = 2\omega_p - \omega_S$ and wavevector

$$\mathbf{k}_{aS} = 2\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_S. \tag{1}$$

In CARS imaging, one seeks to retrieve the varying sample third order susceptibility from the CARS radiation. The first issue is thus to analyse how the phase matching conditions are modified when the sample is inhomogeneous.

In the following, we assume that the sample placed in an homogeneous medium with refractive index $n_{p,S,aS}$, excited by two linear polarized plane waves $\mathbf{E}_{p,S}$ at the pump and Stokes frequencies generates an anti-Stokes radiation at $\omega_{aS} = 2\omega_p - \omega_S$. The wavevectors of the pump, stokes and anti-stokes fields satisfy, $k_{p,S,aS} = n_{p,S,aS}\omega_{p,S,aS}/c$ respectively.

The source of anti-Stokes radiation is linked to the third-order polarization defined as [26]:

$$\mathbf{P}^{(3)}_{aS}(\mathbf{r}) = \overleftrightarrow{\chi}^{(3)}_{aS}(\mathbf{r})\mathbf{E}_p(\mathbf{r})\mathbf{E}_p(\mathbf{r})\mathbf{E}^*_S(\mathbf{r}), \tag{2}$$

which obeys, in the slowly varying envelop approximation, the equation,

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}_{aS}(\mathbf{r}) - k^2_{aS}\mathbf{E}_{aS}(\mathbf{r}) = k^2_{aS}\mathbf{P}^{(3)}_{aS}(\mathbf{r}), \tag{3}$$

where $\overleftrightarrow{\chi}^{(3)}_{aS}(\mathbf{r})$ denotes the third order nonlinear susceptibility tensor of rank 4 which is a function of the dipole or scatterer density $N(\mathbf{r})$, its orientation and the Raman scattering cross section [2]. Each of its 81 tensor elements may contribute to the anti-Stokes polarization with polarization orientation A using Einstein notation as $P^{(3)}_{aS,A} = \chi^{(3)}_{aS,ABCD}E_{p,B}E_{p,C}E^*_{S,D}$ with $A, B, C, D \in x, y, z$. Introducing the Green tensor which is the solution of

$$\nabla \times \nabla \times \overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) - k^2_{aS}\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \overleftrightarrow{\mathbf{I}}\,\delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}), \tag{4}$$

that satisfies out-going boundary condition, the anti-Stokes radiation at observation point $\mathbf{R}$ is given by [26]

$$\mathbf{E}_{aS}(\mathbf{R}) = k^2_{aS}\int \mathrm{d}\mathbf{r}\,\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{r})\mathbf{P}^{(3)}_{aS}(\mathbf{r}). \tag{5}$$

The link between the anti-Stokes radiation and the sample is easily obtained when the observation point is far enough (Fraunhofer diffraction regime) from the sample for the radiated field to be

Optics EXPRESS

approximated by a centered spherical wave whose amplitude depends only on the direction of observation $\mathbf{k}_{aS} = k_{aS}\mathbf{R}_{\text{far}}/R_{\text{far}}$. The far-field amplitude, $\mathbf{e}(\mathbf{k}_{aS})$, can be directly recorded at the Fourier or pupil plane of a microscope [27], each point of the latter corresponding to a specific direction of observation. In far-field, the Green tensor can be approximated by,

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{R}_{\text{far}}, \mathbf{r}) \approx \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS}) \exp(-i\mathbf{k}_{aS} \cdot \mathbf{r})/(4\pi R_{\text{far}}), \tag{6}$$

with $\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})$ defined as,

$$\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\mathbf{P} = \mathbf{P} - [\mathbf{P} \cdot \mathbf{k}_{aS}]\mathbf{k}_{aS}/k_{\text{aS}}^2, \tag{7}$$

is the projection operator onto the plane normal to $\mathbf{k}_{aS}$ [26, 28] and P a generic polarization vector. Injecting Eq. (6) in Eq. (5), one obtains the expression for the CARS far-field,

$$\mathbf{E}_{aS}(\mathbf{R}_{\text{far}}) \approx \frac{2\pi^2 k_{aS}^2 \exp(ik_{\text{aS}}R_{\text{far}})}{R_{\text{far}}} \mathbf{e}_{aS}(\mathbf{k}_{aS}), \tag{8}$$

with

$$\mathbf{e}_{aS}(\mathbf{k}_{aS}) = \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\tilde{\mathbf{P}}_{aS}^{(3)}(\mathbf{k}_{aS}), \tag{9}$$

where we have introduced the 3D Fourier transform of $\mathbf{P}^{(3)}$,

$$\mathcal{F}_{3D}(f) = \tilde{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathrm{d}\mathbf{r} \text{ and } \mathcal{F}_{3D}^{-1}(\tilde{f}) = \int \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathrm{d}\mathbf{k}. \tag{10}$$

To simplify our analysis, we will assume hereafter that the susceptibility tensor is proportional to the scatterer density

$$\overleftrightarrow{\chi}_{aS}^{(3)}(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r})\overleftrightarrow{\chi}_{aS}^{\prime(3)}, \tag{11}$$

with $\overleftrightarrow{\chi}_{aS}^{\prime(3)}$ known. The density $N(\mathbf{r}) = N_{el}(\mathbf{r}) + N_{re,vib}(\mathbf{r}) + iN_{im,vib}(\mathbf{r})$ is complex, where $N_{el}(\mathbf{r})$ denotes the electronic contribution giving rise to the nonresonant background. $N_{re,vib}(\mathbf{r}) + iN_{im,vib}(\mathbf{r})$ express the vibrational contribution. It should be noted that $N_{re,vib}(\mathbf{r})$ is spatially independent from $N_{im,vib}(\mathbf{r})$ as soon as the nonhomogeneous sample consists of several molecular groups of unequal Raman shifts that contribute to the overall CARS signal.

Recalling that the excitation beams are plane waves, $\mathbf{E}_{p,S}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{p,S} \cdot \mathbf{r})\mathbf{u}_{p,S}$, the third order polarization can be written as,

$$\mathbf{P}_{aS}^{(3)}(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) \exp[i(2\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_S) \cdot \mathbf{r}]\mathbf{u}, \tag{12}$$

where $\mathbf{u} = \overleftrightarrow{\chi}_{aS}^{\prime(3)}\mathbf{u}_p\mathbf{u}_p\mathbf{u}_S^*$. Using the modulation theorem and Eq. (12), the 3D Fourier transform of the polarization verifies,

$$\tilde{\mathbf{P}}_{aS}^{(3)}(\mathbf{k}) = \tilde{N}(\mathbf{k} - 2\mathbf{k}_p + \mathbf{k}_S)\mathbf{u}, \tag{13}$$

and the far-field CARS amplitude is,

$$\mathbf{e}_{aS}(\mathbf{k}_{aS}) \propto \tilde{N}(\mathbf{k}_{aS} - 2\mathbf{k}_p + \mathbf{k}_S)\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\mathbf{u}. \tag{14}$$

Thus, the recording of the anti-Stokes far-field amplitude at a point of the microscope pupil plane corresponding to the observation direction $\mathbf{k}_{aS}$ depends on the three-dimensional Fourier coefficient of the scatterer density N taken at $\mathbf{K} = \mathbf{k}_{aS} - 2\mathbf{k}_p + \mathbf{k}_S$. Now, if the non-linear medium is homogeneous and infinite, $\tilde{N}(\mathbf{K}) = 0$ everywhere except for $\mathbf{K} = \mathbf{0}$. In this case, the CARS radiation occurs only in the direction $\mathbf{k}_{aS}$ such that $\mathbf{k}_{aS} = 2\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_S$. The classical phase

matching condition is retrieved. On the contrary, when the sample is inhomogeneous, the CARS field is emitted in all the directions,

$$\mathbf{k}_{aS} = \mathbf{K} + 2\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_s, \tag{15}$$

for which $\tilde{N}(\mathbf{K})$ is not negligible.

In an imaging experiment, one uses the CARS radiation to retrieve the scatterer density. The one to one relationship, Eq. (14), between the far-field CARS amplitude and the Fourier coefficient of the scatterer density gives access to the scatterer density spectrum in a restricted three-dimensional Fourier domain, hereafter named W, that depends on the imaging configuration. The domain W is built by following the extremity of the transfer vector $\mathbf{K} = \mathbf{k}_{aS} - 2\mathbf{k}_p + \mathbf{k}_S$ when $\mathbf{k}_{p,S}$, fixed by the pump and Stokes beam, and $\mathbf{k}_{aS}$ corresponding to the observation directions, are varied. This support determines the resolution with which the scatterer density can be reconstructed.

In an ideal widefield CARS imaging set-up, where the far-field radiation is observed from all possible angles (using a 4π objective for example [29]), while the pump and Stokes beams are fixed, W is a sphere of radius k_{aS} translated by $2\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_S$. In an ideal widefield CARS tomography, where the observation and illumination are done from all possible directions, Ω is a ball of radius $k_{aS} + 2k_p + k_S$. As a reminder, the Fourier support of an ideal linear tomography experiment at the pump wavelength is a ball of radius $2k_p$ [30]. Thus, CARS has the potential to provide three-dimensional images with a twice better resolution than that of an ideal linear tomography set-up, which would be about $\lambda_p/8$.

Yet, generally the observation and illumination directions are restricted by the microscope configuration. In particular, the observation directions are limited by the size of the pupil of the microscope objective. Introducing the transverse and axial components of the wavevector, $\mathbf{k}_{aS} = \mathbf{k}_\parallel + \gamma\mathbf{z}$ where $\gamma = \sqrt{k_{aS}^2 - k_\parallel^2}$ and $\mathbf{z}$ is the unit vector along the optical axis, the pupil imposes that $k_\parallel < k_{aS}\mathrm{NA}$ where NA is the numerical aperture of the objective. As a result, $\mathbf{k}_{aS}$ describes a cap of sphere of radius k_{aS} whose projection onto the transverse (k_x, k_y) plane is a disk of radius of $k_{aS}\mathrm{NA}$.

Figure 1 illustrates Eq. (15). In most experiments, the momentum transfer between the axial components of the wavevectors is assumed to be always fulfilled so that only the transverse components are accounted for in Eq. (15). In particular, this condition is satisfied for thin samples (axial extension $< \lambda_{aS}$).

We conclude this section with a comment on folded box illumination configurations [11,14–17]. From Fig. 1 as well as Eq. (14), it is evident that a simultaneous illumination with two pump (probe) beams with wavevectors $\mathbf{k}_{p1}$ and $\mathbf{k}_{p2}$ featuring different incident angles leads to mixing terms in the far-field amplitude so that $\mathbf{e}(\mathbf{k}_{aS})$ is now related to $2\tilde{N}(\mathbf{k}_{aS} + \mathbf{k}_{p1} + \mathbf{k}_{p2} - \mathbf{k}_S) + \tilde{N}(\mathbf{k}_{aS} + \mathbf{k}_{p1} + \mathbf{k}_{p1} - \mathbf{k}_S) + \tilde{N}(\mathbf{k}_{aS} + \mathbf{k}_{p2} + \mathbf{k}_{p2} - \mathbf{k}_S)$. Thus, the image will be composed of the coherent superposition of these three band-passes which may results in artifacts if the absolute values of sample spectrum are not sufficiently low for high spatial frequencies. We now focus on one possible technique for retrieving the sample spectrum on a large Fourier domain, CARS Fourier ptychography microscopy. To this aim, we first derive a comprehensive vectorial model of the CARS images obtained in a wide-field microscope which will be the basis of the reconstruction procedure.

3. Modeling the CARS image of a widefield microscope

We consider an imaging configuration similar to that of the previous section, see Fig. 5, in which the sample is excited by a pump and Stokes beams that are approximated by plane waves. The CARS radiation is recorded at the image plane of the microscope by propagating through an objective (L1) with focal f_1 and numerical aperture NA and a tube lens (L2) with focal f_2 placed

Optics EXPRESS

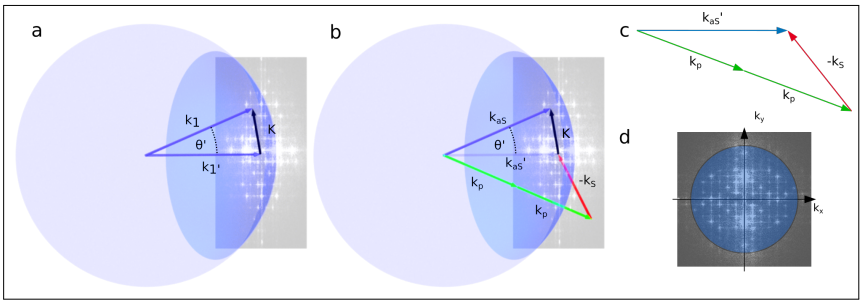

Fig. 1. Phase-matching and lens transfer: a) Linear scattering: the incident plane wave of wave vector $\mathbf{k}_1'$ is scattered into direction $\mathbf{k}_1$ if the object contains the spatial frequency vector $\mathbf{K}$ following $\mathbf{k}_1' + \mathbf{K} = \mathbf{k}_1$. The scattered wave is collected through the pupil of the microscope if its transverse component, $\mathbf{k}_{\parallel,1}$ satisfies, $k_{\parallel,1} \leq k_1\mathrm{NA}$, *i.e.* if $\mathbf{k}_1$ ends on the cap of the sphere outlined in dark blue. b) Nonlinear four-wave-mixing: the effective incident wave vector in direction $\mathbf{k}_{aS}' = \mathbf{k}_p + \mathbf{k}_p - \mathbf{k}_S$ for an homogeneous infinite non-linear medium is scattered in direction $\mathbf{k}_{aS} = \mathbf{k}_{aS}' + \mathbf{K}$ if the sample contains the spatial frequency vector $\mathbf{K}$. The scattered anti-Stokes wave is collected by the microscope objective if $k_{\parallel,aS} \leq k_{aS}\mathrm{NA}$. c) Classical phase-matching condition for a homogenous sample, *i.e.* $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ under plane-wave excitation. d) Conventional representation of the transfer function displaying the k_z-projection of the Ewald's spheres of sub-Figs. a) and b).

in a $4f$ configuration (see Fig. 2). Hereafter, we denote by object space the semi-infinite medium before the objective and by image space the semi-infinite medium after the tube lens. The optical axis z is oriented from the object to the image space and we note $\mathbf{r}_\parallel = (x, y)$ the transverse coordinates. For convenience, the phase origin in the object space is taken at the intersection of the optical axis and the object focal plane while the phase origin in the image plane is taken at the intersection of the optical axis and the image focal plane. Last, we assume that the background medium of the image space is the same as that of the object space.

3.1. Modeling the CARS radiation in the object space

To model the anti-stokes field recorded at the image plane of the microscope, one needs to evaluate the radiated field at $\mathbf{R}$ in the object space comprised between the sample and the microscope objective [12, 31, 32]. As shown in the previous section, the CARS radiation satisfies Eq. (5). The observation point being now a few wavelength away ($>\lambda_{aS}$) from the sample it is appropriate to use the angular spectrum representation of the Green tensor [27, 31, 33], restricted to the plane waves propagating in the forward direction,

$$\overleftrightarrow{\mathbf{G}}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \approx \frac{i}{8\pi^2} \int \mathrm{d}\mathbf{k}_\parallel h(\mathbf{k}_\parallel) \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS}) \exp[i\mathbf{k}_{aS} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r})], \tag{16}$$

where $\mathbf{k}_{aS} = \mathbf{k}_\parallel + \gamma\mathbf{z}$ with $\gamma = \sqrt{k_{\mathrm{as}}^2 - k_\parallel^2}$ and h equal to $1/\gamma$ if $k_\parallel < k_{\mathrm{aS}}$ and 0 elsewhere.

Introducing Eq. (16) into Eq. (5) yields, after some reordering,

$$\mathbf{E}_{aS}(\mathbf{R}) = \frac{ik_{aS}^2}{8\pi^2} \int \mathrm{d}\mathbf{k}_\parallel h(\mathbf{k}_\parallel) \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS}) \exp(i\mathbf{k}_{aS} \cdot \mathbf{R}) \int \mathrm{d}\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k}_{aS} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{P}_{aS}^{(3)}(\mathbf{r}). \tag{17}$$

Then, the right-hand side of Eq. (17) can be rewritten as a sum of plane waves whose amplitude

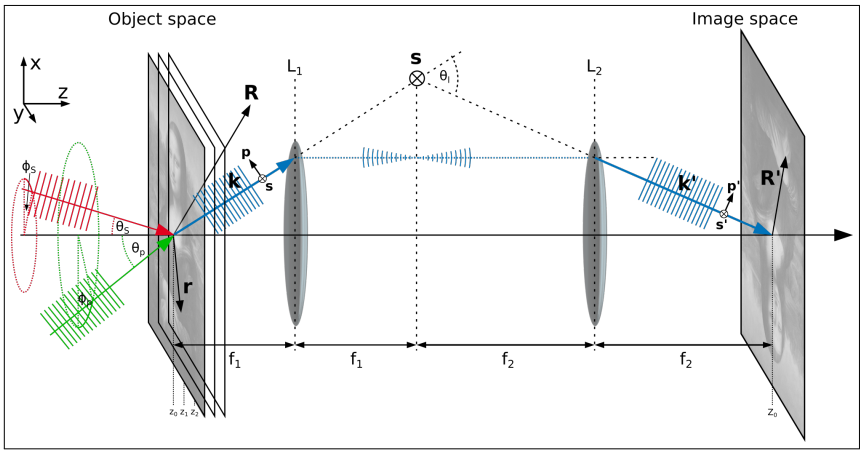

Fig. 2. Declaration of variables: $\mathbf{r}$ coordinates of the object; $\mathbf{R}$ coordinates of the far-field; $\mathbf{R}'$ coordinates of the image plane; $\mathbf{k}$ wavevector in the object space; $\mathbf{k}$' wavevector in the image space; $\mathbf{p}^{(')}$, $\mathbf{s}^{(')}$ unit vectors of plane wave polarization; θ_S polar angle of the Stokes beam; θ_P polar angle of the pump beam; ϕ_S azimuth angle of the Stokes beam; ϕ_P azimuth angle of the pump beam; θ_l polar angle alteration after both lenses; f_1 focal length of lens L_1; f_2 focal length of lens L_2; z_0, z_1, z_2 axial sample coordinates; Z_0 axial image coordinates.

are related to the 3D Fourier transform of the anti-Stokes polarization,

$$\mathbf{E}_{aS}(\mathbf{R}) = i\pi k_{aS}^2 \int \mathrm{d}\mathbf{k}_\parallel \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS}) e^{i\mathbf{k}_{aS}\cdot\mathbf{R}} h(\mathbf{k}_\parallel) \tilde{\mathbf{P}}_{aS}^{(3)}(\mathbf{k}_{aS}). \tag{18}$$

3.2. Modeling the CARS radiation at the image plane

We now study the field in the image space of the microscope. The plane waves forming the field in the object space are modified by the imaging system because of the magnification M brought by the objective and tube lens, $M = -f_2/f_1$ [31].

1. First, the wavevectors of the plane waves forming the field in the object space are changed from $\mathbf{k}_{aS}$ to $\mathbf{k}'_{aS} = \mathbf{k}_\parallel/M + \gamma'\mathbf{z}$ with $\gamma' = \sqrt{k_{aS}^2 - k_\parallel^2/M^2}$.

2. Second, the vectorial amplitude of the plane wave is rotated to remain normal to the novel direction of propagation $\mathbf{k}'_{aS}$ and dimmed to ensure energy conservation. Introducing the $(\mathbf{s}, \mathbf{p})$ basis related to $\mathbf{k}_{aS}$, $\mathbf{s} = \mathbf{z} \times \mathbf{k}_{aS}/k_{aS}$ and $\mathbf{p} = \mathbf{s} \times \mathbf{k}_{aS}/k_{aS}$, when the plane wave direction $\mathbf{k}_{aS}$ is changed into $\mathbf{k}'_{aS}$, the field amplitude $\mathbf{E} = E^s\mathbf{s} + E^p\mathbf{p}$ is transformed into $\mathbf{E}' = M^{-1}\sqrt{\gamma/\gamma'}(E^s\mathbf{s} + E^p\mathbf{p}')$ where $\mathbf{p}' = \mathbf{s} \times \mathbf{k}'_{aS}/k_{aS}$ and the coefficient $M^{-1}\sqrt{\gamma/\gamma'}$ ensures the energy conservation. To perform this rotation we introduce the tensor, $\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}'_{aS}, \mathbf{k}_{aS})$ which rotates vectors by an angle θ_l defined as $\sin\theta_l = |\mathbf{k}_{aS} \times \mathbf{k}'_{aS}|/k_{aS}^2$ about the axis $(\mathbf{k} \times \mathbf{z})/|\mathbf{k} \times \mathbf{z}|$.

3. Third, some plane waves of the field in the object space are blocked by the diaphragm at the pupil plane. h is now replaced by h_{NA} which verifies $h_{\mathrm{NA}}(\mathbf{k}_\parallel) = 1/\gamma$ for $k_\parallel < k_{aS}\mathrm{NA}$ and 0 elsewhere.

Optics EXPRESS

4. Fourth, our imaging system is aplanatic (the objective satisfies the Sine-Abbe condition). In other word, the lenses have been optimized so that plane waves that interfere constructively at a point of the object focal plane will interfere constructively at a point of the image focal plane (See appendix A for the transition **R**→**R**').

Under these four conditions, the field at $\mathbf{R}'$ in the image plane, stemming from Eq. (18) becomes a sum of plane waves with wavevector $\mathbf{k}'_{aS}$ and amplitude proportional to $\tilde{\mathbf{P}}^{(3)}_{aS}(\mathbf{k}_{aS})$,

$$\mathbf{E}_{aS}(\mathbf{R}') = i\pi\frac{k_{aS}^2}{M}\int \mathrm{d}\mathbf{k}_\parallel e^{i\mathbf{k}'_{aS}\cdot\mathbf{R}'}\sqrt{\frac{\gamma}{\gamma'}}h_{\mathrm{NA}}(\mathbf{k}_\parallel)\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}'_{aS},\mathbf{k}_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\tilde{\mathbf{P}}^{(3)}_{aS}(\mathbf{k}_{aS}). \tag{19}$$

At the image plane, $\mathbf{R}' = (M\mathbf{R}_\parallel, 0)$, one can write Eq. (19) in a way that facilitates its interpretation [27]. Introducing the three dimensional pupil function,

$$\mathcal{P}(\mathbf{k}) = \mathcal{H}(\mathbf{k}_\parallel)\delta[k_z - \gamma(\mathbf{k}_\parallel)] \text{ where } \mathcal{H}(\mathbf{k}_\parallel) = \frac{k_{aS}^2}{M}\sqrt{\frac{\gamma}{\gamma'}}h_{\mathrm{NA}}(\mathbf{k}_\parallel) \tag{20}$$

with $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\parallel + k_z\mathbf{z}$, Eq. (19) reads,

$$\mathbf{E}_{aS}(M\mathbf{R}_\parallel) = i\pi\mathcal{F}^{-1}_{3D}[\mathcal{P}(\mathbf{k})\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k})\tilde{\mathbf{P}}^{(3)}_{aS}(\mathbf{k})](\mathbf{R}_\parallel). \tag{21}$$

Recalling Eq. (13) in Eq. (21), we observe that, the anti-Stokes field at the image plane of the microscope permits to recover the sample density spectrum $\tilde{N}$ on a cap of sphere (of radius k_{aS} with transverse projection the disk of radius k_{aS}NA) translated by $2\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_S$. We retrieve the Fourier analysis provided in the first section, Fig. 1.

Equation (19) is convenient for linking the image field to the three-dimensional sample. Yet, to simulate the field at the image plane on the regular square meshing of the camera pixels, it is more interesting to rewrite the expression so as to use two-dimensional fast Fourier transforms [34].

$$\mathbf{E}_{aS}(M\mathbf{R}_\parallel) = \frac{i}{2}\int \mathrm{d}z\mathcal{F}^{-1}_{2D}\left[\mathcal{H}(\mathbf{k}_\parallel)e^{-i\gamma z}\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}'_{aS},\mathbf{k}_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\mathcal{F}_{2D}\left[\mathbf{P}^{(3)}_{aS}(\mathbf{r}_\parallel,z)\right]\right], \tag{22}$$

where we have used that $\tilde{\mathbf{P}}^{(3)}_{aS}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\pi}\int e^{-i\gamma z}\mathcal{F}_{2D}\left[\mathbf{P}^{(3)}_{aS}(\mathbf{r}_\parallel,z)\right](\mathbf{k}_\parallel)\mathrm{d}\mathbf{k}_z$. With the definition of the 2D Fourier transform:

$$\mathcal{F}_{2D}(f) = \frac{1}{4\pi^2}\int f(\mathbf{r}_\parallel)e^{-i\mathbf{k}_\parallel\cdot\mathbf{r}_\parallel}\mathrm{d}\mathbf{r}_\parallel \text{ and } \mathcal{F}^{-1}_{2D}(g) = \int g(\mathbf{k}_\parallel)e^{i\mathbf{k}_\parallel\cdot\mathbf{r}_\parallel}\mathrm{d}\mathbf{k}_\parallel \tag{23}$$

4. Inversion procedure for CARS Fourier ptychography microscopy (CARS FPM)

The link between the field at the image plane and the sample being established, we now consider an imaging approach where the scatterer density is reconstructed from several CARS images obtained under L different excitations with various pump and Stokes wavevectors. If the complex field $\mathbf{E}_{aS}$ is recorded at the image plane (using an interferometric set-up similar to that used in tomographic diffraction microscopy [30, 35] for example), a direct linear reconstruction of the sample complex density can be developed easily using Eqs. (21) and (13) as in Tomographic Diffraction Microscopy [30].

On the other hand, if only the intensity $|\mathbf{E}_{aS}|^2$ is recorded at the image plane, the reconstruction issue resembles better that of Optical Fourier Ptychography Microscopy (FPM) where the complex index of refraction is retrieved numerically from several intensity images of the sample obtained under various angles of illumination in a transmission microscope [25, 36–41].

Unfortunately, the direct adaptation of the FPM inversion algorithms to CARS FPM is impossible for one major reason. In transmission FPM, the scattered field carrying the sample

information interferes with the specularly transmitted beam. This interference brings important clues on the scattered field phase. In CARS FPM on the contrary, there is no reference field at the anti-Stokes wavelength with which the emitted CARS field could interfere (in this work we neglect the possible non-resonant radiation of the glass slide holder and assume that the sample is floating in air). We have thus derived an original intensity-based reconstruction algorithm, inspired from [42].

The inversion scheme is based on Eq. (22). To simplify its presentation, we restrict here the sample to a thin slice of material at $z = z_0$. The unknown third order susceptibility is thus written as, $\overleftrightarrow{\chi}^{(3)}(\mathbf{r}) \approx N(\mathbf{r}_\parallel)\delta(z - z_0)\overleftrightarrow{\chi}^{(3)\prime}$ where $\overleftrightarrow{\chi}^{(3)\prime}$ is known. The inversion scheme aims at reconstructing the scatterer density $N(\vec{r}_\parallel)$ at the plane $z = z_0$.

The scatterer density is estimated iteratively so as to minimize the distance between the recorded image data I_l^{mes} for the $l = 1, \cdots, L$ illuminations conditions (pump or Stokes varying incident angle) and the simulated intensity at the camera plane,

$$F(N) = W^{-1} \sum_{l=1}^{L} \int \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel) \left| I_l^{\text{mes}} - |\mathbf{E}_{aS,l}[N]|^2 \right|^2 \tag{24}$$

where $W = \sum_l \int \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel)|I_l^{\text{mes}}|^2$ and the dependence of I_l^{mes} and $\mathbf{E}_{aS,l}$ with respect to $M\mathbf{R}_\parallel$ and N will be made implicit. A conjugate gradient method is used to minimize the cost functional, Eq. (24). At iteration n, N can be updated using the formula,

$$N^n(\mathbf{r}_\parallel) = N^{n-1}(\mathbf{r}_\parallel) + \alpha_{\text{eff}} d^n(\mathbf{r}_\parallel) \tag{25}$$

where α_{eff} is a real derived in appendix D and d_n is the Polak-Ribière descent [43] provided by,

$$d^n(\mathbf{r}_\parallel) = g^n(\mathbf{r}_\parallel) + \frac{\int \mathrm{d}\mathbf{r}_\parallel g^n (g^n - g^{n-1})^*}{\int \mathrm{d}\mathbf{r}_\parallel g^{n-1} (g^{n-1})^*} d^{n-1} \tag{26}$$

The gradient at iteration n, g^n, is provided by (see appendix C for its derivation)

$$g^n(\mathbf{r}_\parallel, z_0) = \frac{4i}{W} \sum_l \mathbf{u}_l^*(\mathbf{r}_0) \cdot \mathcal{F}_{2D}^{-1} \left\{ e^{i\gamma z_0} \mathcal{H}(\mathbf{k}_\parallel) \overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}_{aS}, \mathbf{k}'_{aS}) \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}'_{aS}) \mathcal{F}_{2D} \left[t_l \mathbf{E}_{aS,l} \right] \right\} (\mathbf{r}_\parallel) \tag{27}$$

where $t_l^{n-1} = I_l^{\text{mes}} - |E_{aS,l}^{n-1}|^2$ is the residue at the $(n-1)^{th}$ iteration. The inversion scheme is easily extended to samples that are made of J slices along the z axis by introducing $\{N_1 .... N_J\}$ the unknown densities at each slice. At iteration n, N_j is modified using Eqs. (25) and (27) where we recall that the field at the image plane $\mathbf{E}_{aS,l}^{n-1}$ is calculated with Eq. (22) with the estimations of the J scatterer densities $\{N_j\}$ obtained at the previous iteration.

5. Synthetic CARS Fourier ptychography

To test the reconstruction scheme, we consider the CARS FPM experiment depicted in Fig. 5 in which the Stokes and Pump angles defined by $\mathbf{k}_{p,S} = k_{p,S,}[\sin\theta_{p,S,} \cos\phi_{p,S}\mathbf{x} + \sin\theta_{p,S} \sin\phi_{p,S}\mathbf{y} + \cos\theta_{p,S}\mathbf{z}]$ can be modified. To this aim, we consider two beams at $\lambda_S = 1030$ nm and $\lambda_p = 796$ nm whose incidence angles are controlled by laser-scanning mirrors in combination with a $4f$-lens system [2]. Before the mirrors, the polarization of the beams is fixed along the x direction. After the mirrors, the excitation fields at the sample become [2],

$$\mathbf{E}_{p,S}(\mathbf{r}, \phi_{p,S}, \theta_{p,S}) = E_0 \sqrt{n_{p,S} \cos\theta_{p,S}} \begin{bmatrix} \cos^2\phi_{p,S} \cos\theta_{p,S} + \sin^2\phi_{p,S} \\ -(1 - \cos\theta_{p,S}) \sin\phi_{p,S} \cos\phi_{p,S} \\ -\sin\theta_{p,S} \cos\phi_{p,S} \end{bmatrix} \exp\left[i\mathbf{k}_{p,S} \cdot \mathbf{r} \right]. \tag{28}$$

Optics EXPRESS

The CARS radiation at $\lambda_{aS} = 649$ nm corresponding to a Raman shift of 2850 cm^{-1} is collected by a microscope objective of numerical aperture NA = 0.2 and magnification $M = 10$ after a polarizer which detects only the x component of the field. Note that, the observation angles being small, the x-component of the CARS field depends essentially on the x-component of the polarization $\mathbf{P}^{(3)}$. We consider two different scanning schemes, the pump (Stokes) beam is fixed and the Stokes (pump) beam is varied. In all cases, the fixed beam is x-polarized and directed along the optical axis. In the Stokes scanning configuration, because of the properties of the third order susceptibility tensor $\overleftrightarrow{\chi}^{(3)\prime}$ the x-component of the polarization will depend only the first coefficient $\chi^{(3)}_{1111}$ as shown in appendix B. On the contrary, in the pump scanning configuration, it will depend on $\chi^{(3)}_{1111}$, $\chi^{(3)}_{1221}$ and $\chi^{(3)}_{1331}$. For computation we set $\chi^{(3)}_{1111} = 1$ while $\chi^{(3)}_{1221} = 1/3$ and $\chi^{(3)}_{1331} = 1/3$.

The CARS images are simulated on 201×201 pixels with stepsize 500 nm at the image plane using Eqs. (25)–(28) and deteriorated with Poisson noise assuming a maximum mean value of 1000 photons for the brightest pixel (which corresponds to a noise standard deviation of 3.2 %).

The sample is a 2D spoke-pattern placed at $z_0 = 20$ μm. This kind of sample is particularly convenient for investigating the resolution in the transverse plane [44, 45], see Fig. 4(a) for the real and imaginary (Fig. 4(e)) parts of the ground truth image.

All reconstructions are launched with an initial estimate, $N^0 = 0.01 + i0.01$ and the iterations are stopped after 400 iterations. The matlab inversion algorithm was run on an Intel(R) Xeon(R) CPU E5-1620 v4 @ 3.50 GHz. The computation time is estimated to 8 min, 18 min, 58 min for 9, 49, 169 images, respectively. A video (Visualization 1) is provided within the supplemental material showing the development of the real and imaginary part of the scatterer distribution after each iteration. The matlab script for the computation of wide-field CARS images and the sample reconstruction will be provided on demand - please contact the corresponding authors.

In a first experiment, the Stokes angles are varied so that $\mathbf{k}_{\parallel S}$ points on a regular square grid with step $0.06k_{aS}$ while the pump angle is kept at $\theta_p = 0°$. Figure 3 shows several synthetic images obtained for different illuminations. Introducing Eq. (13) in Eq. (19) shows that, for each illumination, the CARS image yields information on a specific portion of $\tilde{N}$. In the bottom plot, we display $|\tilde{N}|$ and indicate with blue circles the Fourier domain that is scanned when varying the Stokes angle according to Eq. (19) and Eq. (13). The disk of radius k_{aS}NA corresponds to the region covered when varying the observation wavevector $\mathbf{k}_\parallel$ while its center is given by the transverse component of $2\mathbf{k}_p - \mathbf{k}_S$ which simplifies to $-\mathbf{k}_{\parallel S}$ in the Stokes scanned configuration. The overlapping between these disks is about 75% as required in ptychography [41].

In the first experiment, only 9 images at low Stokes angles, NA = 0.26, feed the inversion scheme. The reconstruction displayed in Figs. 4(b) and 4(f) shows that both the real and imaginary part of N are recovered. In Figs. 4(c) and 4(g), 49 images are taken in the inversion scheme with increased Stokes angles, NA = 0.4, and yield better resolved reconstruction. Last, we improve further the resolution, by considering the pump scanning configuration, Figs. 4(d) and 4(h). In this configuration, the maximum angular excursion of the pump beam is taken similar to that of the Stokes scanning experiment. Yet, each disk in the Fourier plane being translated by $2\mathbf{k}_{\parallel p}$, the accessible Fourier domain in the pump scanning technique is much larger than that of the Stokes configuration and corresponds to NA = 0.7. Note that to ensure the same overlapping, 13×13 images were taken in this case.

The sensitivity to noise is studied in Fig. 4 where the residue of the cost functional F is plotted at the end of Fig. 4 for images with 3.2 %, 10 % and 31.6 % shot noise levels. Unsurprisingly, the larger the number of images taken in the reconstruction, the better the robustness to noise. Once the complex density has been retrieved, the amplitude and phase of the wide-field CARS images at the camera plane can be simulated, as seen in Figs. 4(i) and 4(j). Thus, reference-less phase-retrieval comes as a natural byproduct of CARS FPM. This property is important as the

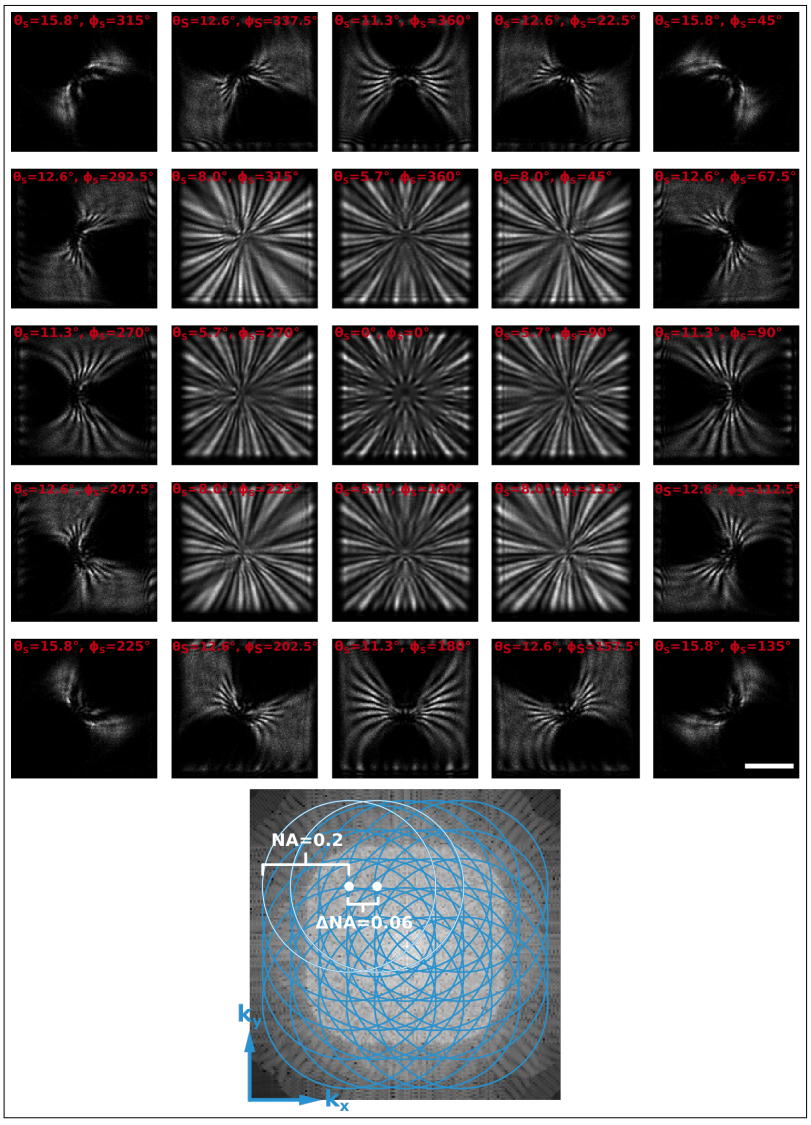

Fig. 3. Simulated 25 wide-field CARS images for different illumination angles of the Stokes beam and normal pump beam incidence. The images were calculated using Eq. (22). Parameters - Raman shift: 2850 cm^{-1}, λ_S = 1030 nm, λ_p = 796 nm λ_{aS} = 649 nm, magnification: 10x, defocus: z_0 = 20 μm, detection NA: 0.2. While normal incidence of the pump beam is assumed the illumination angles of the Stokes beam are outlined within each image (θ_S polar angle, ϕ_S azimuthal angle). The imaginary and real part of the ground truth (GT) of the 2D sample is displayed in Fig. 4 a and e. Poisson noise was added assuming that the brightest pixel on the camera collects a mean value of 1000 photons. The scale bar equals 200 μm. The blue circles on top of the Fourier images of the anti-Stokes polarization is intended as a guide to the eye to estimate the overlap of neighboring illuminations.

Optics EXPRESS

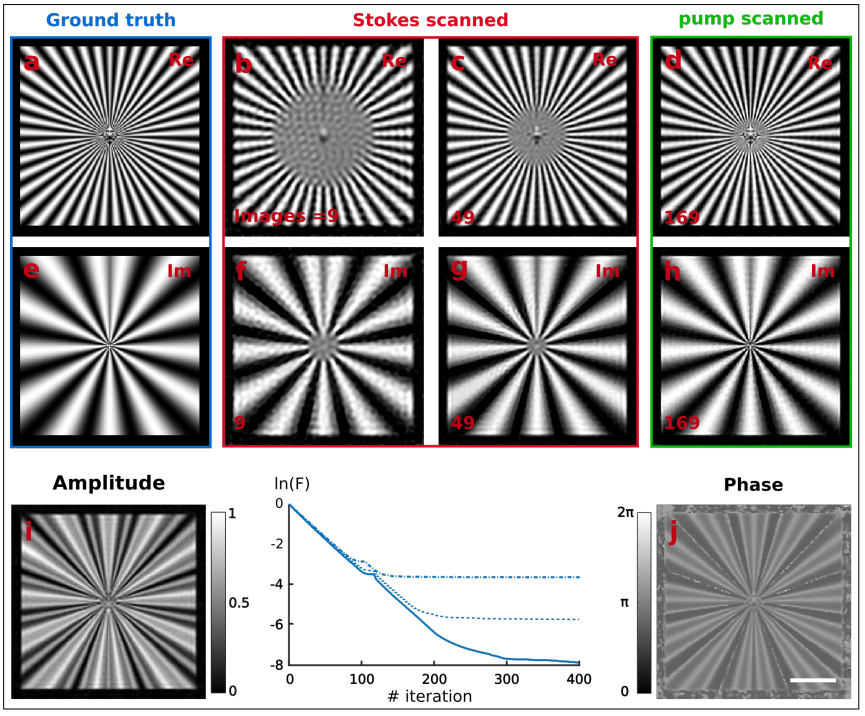

Fig. 4. Reconstruction results: The real and imaginary part of the sample's ground truth (GT) are displayed in the sub-Figs. a and e, respectively. The images b and f were reconstructed from the center 9 wide-field CARS images presented in Fig. 3. Sub-Figs. c and g display the corresponding reconstruction results for 49 wide-field CARS images. Scanning the pump beam the images d and h were obtained. Note that though more images were included in the reconstruction the maximum excitation angle θ_p equals the maximum excitation angle in Stokes scanned configuration in sub-Figs. c and g. The added Poisson noise assumes 1000 photons for the brightest image pixel, *i.e.* a standard deviation of 3.2 %. Sub-Figs. i and j display the calculated in-focus amplitude and phase images resulting from the reconstructed complex sample structure of sub-Figs. c and g. The natural logarithm of the residue of the cost functional F as defined in Eq. (24) is plotted in the lower center of the Fig. as a function of the iteration number for 49 Stokes scanned wide-field CARS images. The continuous, dotted and dash-dotted lines account for a standard deviation of 3.2 %, 10 % and 31.6 % of added Poisson noise, respectively. The blue and white scale bar equal 10 μm and 100 μm, respectively.

imaginary part of the third order susceptibility is proportional to the Raman polarization and follows linearly the scatterer concentration [46].

This simulated experiment shows that CARS FPM is able to recover the complex nature of N with improved resolution, even though it does not benefit from the interference with a reference field as in linear FPM. However, CARS FPM is not always successful. An important condition is that the images should vary significantly with the Stokes (or pump) illumination angles. In the Visualization 1 (supplementary information), one observes that the reconstruction starts at points where the intensity variation with changing illumination angle is the most pronounced. When the sample is made of large homogeneous regions or, conversely, of sparse in-focus single emitters, the images do not depend on the incident angles and we have observed (not shown) the reconstruction algorithm fails. The variation of the intensity with respect to the angles of illumination is essentially due to the interference phenomenon between the fields radiated by the scatterers. A gentle defocusing and low detection NA may benefit to the reconstruction scheme by increasing the domain over which the fields interfere. In addition, the intensity variations should be different for the real and imaginary scatterer density $N = N' + iN''$ for the inversion scheme to distinguish the two contributions. Obviously, if $N'(\mathbf{r}) = aN''(\mathbf{r})$, CARS FPM will not be able to extract the complex value of N.

Although not universal, CARS FPM is expected to be particularly efficient for imaging thin tissue sections as in [9] addressing CH-stretching vibrations. Obviously, these samples do not suffer from sparsity. Further, the nuclei, cytoplasm and the cell walls are made of different densities of CH_2 and CH_3 groups which are currently used to generate virtual H&E images [47]. Apart from the ever present nonresonant background, the methylene and methyl groups display different amount of real and imaginary contributions for a given Raman shift so that a sufficient spatially varying distribution of real and imaginary scatterer density should be provided.

We finish this theoretical and numerical study with some considerations on the feasibility of this widefield technique and an estimation of the required laser parameters.

6. Designing the implementation of CARS FPM, study of the field of view

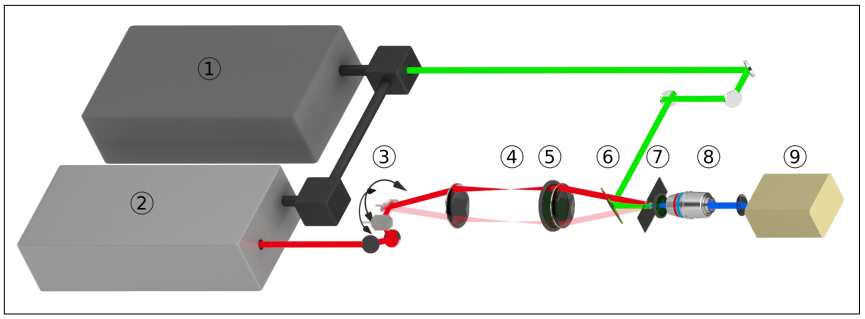

Fig. 5. Proposed experimental implementation:1 High power pump laser at 1029-1065 nm (FWHM <2 nm) with a repetition rate 10 kHz - 1 MHz and a pulselength 1 ps, 2 Optical parametric amplifier (OPA) tunable within 730 - 1010 nm (200 - 4000 cm^{-1}), 3 laser-scanning mirrors, 4 $4f$-imaging system, 5 linear polarizer, 6 dichroic beam combiner, 7 sample and linear polarizer as well as dielectric filters, 8 low NA $4f$-system, 9 low noise (cooled) CCD camera.

An outline for a possible experimental configuration of CARS FPM is displayed in Fig. 5. Here, a dual-color laser system is employed for excitation of wide-field CARS radiation. The

Optics EXPRESS

radiation of the Stokes (or pump) beam is angle-scanned at the position of the sample using a combination of laser scanning mirrors and a $4f$-imaging system, e.g. composed of 2 lenses. Alternatively, the Stokes beam could be scanned with laser scanning mirrors and an array of mirrors as demonstrated for linear FPM [48] to avoid aberrations introduced by the lenses.

The pump (or Stokes) beam is adapted in size, e.g. by means of a telescope, and superimposed with the Stokes beam in time and space using a delay stage. A dielectric and a linear polarization filter is positioned just after the sample to collect only x-polarized radiated CARS light and to prevent the radiation of the excitation laser from entering the collection objective lens with potential multi-color generation while interacting with the glass, e.g. by means of four-wave-mixing or auto-fluorescence. For collecting the anti-Stokes radiation a low NA objective lens is used in combination with a second lens to form an image at a low noise CCD camera.

The major crux of the implementation lays in the definition of the parameters of the lasers for a given field of view (FOV). The peak power and repetition rate have to be optimized to activate the third-order nonlinear excitation on the FOV while minimizing sample damage mechanism as heating or multi-photon-absorption. As a reference, we consider the widefield experiment conducted in [21]. Using a laser with repetition rate ρ = 76 MHz, pulse full width at half maximum τ = 3 ps, λ_{aS}: 600 nm (2850 cm^{-1}), average power $P_{p,(S)}$=150 mW, the authors were able to image test samples up to 33 frames-per-second (fps) and biological samples up to 2 fps with a FOV $S = 20 \times 20$ μm^2. Now, the CARS signal per unit area (SPUA) is linked to these parameters as,

$$\mathrm{SPUA} = \frac{\eta\rho}{\lambda_{\mathrm{aS}}^4} \frac{\mathrm{P_p^2 P_S}}{(\mathrm{S}\rho\tau)^3}, \tag{29}$$

the coefficient η depending on the image integration time, the quantum yield and the collection objective. We propose to upgrade this experiment in order to image a larger FOV. We consider a realistic Yb-fiber laser system with an optical parametric amplifier (OPA) meeting the key parameters: ρ=10 kHz, τ=3 ps, λ_{aS}: 650 nm (2850 cm^{-1}), $P_{p,(S)}$=1 W. To compute the expected FOV for the second system these parameters are inserted into Eq. (29) assuming the same SPUA and η as the reference experiment. With such a kHz ps laser system, a FOV of about 1 mm^2 could possibly be achieved with the same frame rates and image quality as in the reference experiment [21].

7. Conclusion

In conclusion, we proposed and derived a novel CARS wide field imaging scheme referred as CARS Fourier ptychography (CARS FPM). By scanning the incident angles of the incoming Stokes or pump beams, we show that it is possible to retrieve a wide field chemical image featuring an improved resolution as compared to a single illumination as previously reported in the literature. For this we have developed a full vectorial model of the wide field CARS image of a microscope in a $4f$ configuration together with a novel inversion procedure able to reconstruct the sample density from several CARS images recorded for various excitations angles. We have shown that CARS FPM allows the reconstruction of both real and imaginary parts of the complex third order susceptibility, the latter being linear with the chemical concentration and giving directly access to the Raman information. We have finally proposed a realistic experimental scheme that would be suitable to perform CARS FPM. Possible extensions of this work could include a 3D sample reconstruction that is possible using a modified inversion algorithm and the reconstruction of the pupil function [40] allowing aberration-free wide field CARS images.

Appendix A - phase acquisition of planes waves passing a $4f$ system

The phase acquired by the plane wave propagating from $\mathbf{r}$ to $\mathbf{R}'$ (see Fig. 6) in paraxial approximation is provided by :

$$\begin{aligned}\phi_{4f} =& \mathbf{k}\left(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}\right) + \mathbf{k}\left(\mathbf{u} - \mathbf{r}_1\right) + \mathbf{k}'\left(\mathbf{R}_1 - \mathbf{u}\right) + \mathbf{k}'\left(\mathbf{R}' - \mathbf{R}_1\right)\\ =& \mathbf{k}'\mathbf{R}' - \mathbf{k}\mathbf{r} + \mathbf{k}\mathbf{u} - \mathbf{k}'\mathbf{u}\\ =& \mathbf{k}'\mathbf{R}' - \mathbf{k}\mathbf{r} + \underbrace{2f_1k_0 + 2f_2k_0}_{\text{const } \forall\, \mathbf{k}}\end{aligned} \tag{30}$$

where it was used that

$$\mathbf{k} \approx \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{\parallel} \\ k_0\left(1 - \frac{\mathbf{k}_{\parallel}^2}{2k_0}\right)\end{bmatrix} \qquad \mathbf{k}' \approx \begin{bmatrix} \mathbf{k}'_{\parallel} \\ k_0\left(1 - \frac{\mathbf{k}'^2_{\parallel}}{2k_0}\right)\end{bmatrix} \qquad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \frac{f_1\mathbf{k}_{\parallel}}{k_0} \\ 2f_1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{f_2\mathbf{k}'_{\parallel}}{k_0} \\ 2f_2\end{bmatrix} \tag{31}$$

Thus, the phase relation between any point $\mathbf{r}_1$ and $\mathbf{R}'$ is provided by a constant plus $\mathbf{k}'\mathbf{R}' - \mathbf{k}\mathbf{r}$. If the constant term is neglected Eq. (30) results the missing link for the transition from the far field coordinate $\mathbf{R}$ to the image space coordinate $\mathbf{R}'$ (see Eqs. (18) and (19)).

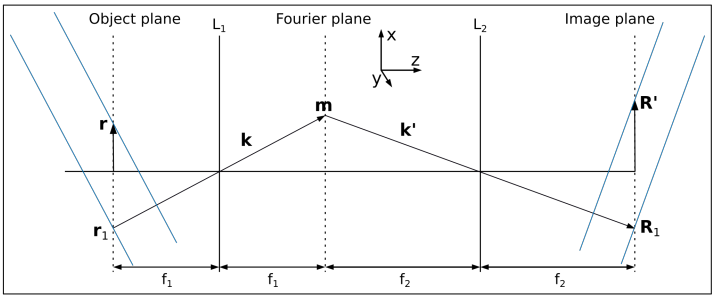

Fig. 6. Declaration of variables: $\mathbf{r}$ coordinate at the object plane; $\mathbf{r}_1$ coordinates of the intersection of the object plane and the center ray (L_1) with propagation direction $\mathbf{k}$; $\mathbf{R}'$ coordinate of the image plane; $\mathbf{R}_1$ coordinates of the intersection of the image plane and the center ray (L_2) with propagation direction $\mathbf{k}$'; $\mathbf{m}$ coordinates of the intersection of the Fourier plane and the center ray (L_1) with propagation direction $\mathbf{k}$.

Appendix B - analysis of the third order susceptibility tensor

In this appendix we detail some properties of $\overleftrightarrow{\chi}^{(3)}_{aS}$. In general, the nonlinear susceptibility comprises 81 elements. For an isotropic medium only 21 elements are non-zero and they satisfy [49]:

$$\begin{aligned}&\chi_{1111} = \chi_{2222} = \chi_{3333}\\ &\chi_{1122} = \chi_{1133} = \chi_{2211} = \chi_{2233} = \chi_{3311} = \chi_{3322}\\ &\chi_{1212} = \chi_{1313} = \chi_{2323} = \chi_{2121} = \chi_{3131} = \chi_{3232}\\ &\chi_{1221} = \chi_{1331} = \chi_{2112} = \chi_{2332} = \chi_{3113} = \chi_{3223}\end{aligned} \tag{32}$$

where $\chi_{aS,p,P,S}$ links the aS component of the anti-Stokes polarization to the, (p, P, S) components of the (pump, Probe, Stokes) fields and $(1, 2, 3) = (x, y, z)$. Thus, there are in total 4 independent elements, which are further linked by the relation:

$$\chi_{1111} = \chi_{1122} + \chi_{1212} + \chi_{1221} \tag{33}$$

Optics EXPRESS

In the experiment, we have placed an x-oriented polarization filter in front of the detector and use a low NA collection objective. Thus, we can assume that the image depends essentially on the x component of the anti-Stokes polarization, which means that we do not probe the susceptibility components that start with 2 or 3. In the Stokes scanning configuration, the pump beam impinging on the sample is x-polarized while the Stokes polarization may exhibit (x, y, z) components. Yet, because of the tensor property, only the $\chi 1111$ is involved in the image formation. In the pump scanning configuration, the Stokes field is x-polarized while the polarization of the pump may vary. In this case, χ_{1111}, χ_{1221} and χ_{1331}, are involved in the image formation. In the synthetic experiments, we set χ_{1111} to 1 and $\chi_{1221} = \chi_{1331}$ to $1/3$.

Appendix C - derivation of the gradient g

The expression for the gradient g is derived in [42] for any intensity imaging scheme. Here, we propose a less conceptual approach based on the variation of the cost functional when the scatterer density $N(\mathbf{r})$ is modified at $\mathbf{r}_0 = (\mathbf{r}_{\|0}, z_0)$. We introduce $\Delta N(\mathbf{r}) = \delta N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ where δN is complex and the variation of N. The gradient g at point $\mathbf{r}_0$ is defined via,

$$F(N + \Delta N) - F(N) = \mathrm{Re}[\delta N g^*(\mathbf{r}_0)] + o(\delta N). \tag{34}$$

We first derive the expression of the field variation when N is changed to $N + \Delta N$, using Eq. (21), its linearity with respect to $N(r)$ and (12):

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{E}_{aS,l}(M\mathbf{R}_\|) &= \mathbf{E}_{aS,l}[N + \Delta N](M\mathbf{R}_\|) - \mathbf{E}_{aS,l}[N](M\mathbf{R}_\|) \\ &= \frac{i}{2}\frac{\delta N}{4\pi^2}\int \mathrm{d}\mathbf{k}_\| e^{i\mathbf{k}_\|\cdot(\mathbf{R}_\| - \mathbf{r}_{\|0}) - i\gamma z_0}\mathcal{H}(\mathbf{k}_\|)\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}'_{aS}, \mathbf{k}_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\mathbf{U}_l(\mathbf{r}_0). \end{aligned} \tag{35}$$

where $\mathbf{U}_l(\mathbf{r}_0) = \overleftrightarrow{\chi}^{(3)\prime}\mathbf{E}^2_{p,l}(\mathbf{r}_0)\mathbf{E}^*_{S,l}(\mathbf{r}_0)$ and we recall that $\mathbf{k}_{aS} = \mathbf{k}_\| + \gamma\mathbf{z}$ while $\mathbf{k}'_{aS} = \mathbf{k}_\|/M + \gamma'\mathbf{z}$. Then, we calculate the variation of the cost functional using Eq. (35),

$$\begin{aligned}F(N + \Delta N) &= W^{-1}\sum_l \int \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\|)\left|I_l^{\mathrm{mes}} - |\mathbf{E}_{aS,l}[N + \Delta N]|^2\right|^2 \\ &= W^{-1}\sum_l \int \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\|)|I_l^{mes} - (\mathbf{E}_{aS,l}\mathbf{E}^*_{aS,l} + 2Re(\mathbf{E}^*_{aS,l}\Delta\mathbf{E}_{aS,l}) + \Delta\mathbf{E}_{aS,l}\Delta\mathbf{E}^*_{aS,l})|^2 \\ &= F(N) - 4W^{-1}\mathrm{Re}\sum_l \int \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\|)\left[t_l\mathbf{E}^*_{aS,l}\cdot\Delta\mathbf{E}_{aS,l}\right] + o(\delta N)\end{aligned} \tag{36}$$

where $t_l = I_l^{\mathrm{mes}} - |\mathbf{E}_{aS,l}[N]|^2$ is the residue at previous iteration and the dependence of I_l^{mes}, $\mathbf{E}_{aS,l}$, $\Delta\mathbf{E}_{aS,l}$ with respect to $M\mathbf{R}_\|$ and N is implicit. Introducing Eq. (35) in Eq. (36) yields,

$$\begin{aligned}F(N + \Delta N) - F(N) &= -4W^{-1}\mathrm{Re}\Big(\frac{i\delta N}{4\pi^2}\sum_l \int \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\|)\int \mathrm{d}\mathbf{k}_\|\mathcal{H}(\mathbf{k}_\|)e^{i\mathbf{k}_\|\cdot(\mathbf{R}_\| - \mathbf{r}_{\|0}) - i\gamma z_0} \\ &\quad t_l\mathbf{E}^*_{aS,l}(M\mathbf{R}_\|)\cdot\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}'_{aS}, \mathbf{k}_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\mathbf{U}_l(\mathbf{r}_0)\Big) + o(\delta N)\end{aligned} \tag{37}$$

which yields, after reordering the integrals and conjugating the expression,

$$\begin{aligned}F(N + \Delta N) - F(N) &= -4W^{-1}\mathrm{Re}\Big(\delta N^*\sum_l \int \mathrm{d}\mathbf{k}_\| e^{i\mathbf{k}_\|\cdot\mathbf{r}_{\|0}}e^{i\gamma z_0}\mathcal{H}(\mathbf{k}_\|) \\ &\quad \overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}'_{aS}, \mathbf{k}_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\mathbf{U}^*_l(\mathbf{r}_0)\cdot\frac{-i}{4\pi^2}\int \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\|)e^{-i\mathbf{k}_\|\cdot\mathbf{R}_\|}t_l\mathbf{E}_{aS,l}\Big)^* \\ &= 4W^{-1}\mathrm{Re}\Big(i\delta N^*\sum_l \\ &\quad \mathbf{U}^*_l(\mathbf{r}_0)\cdot\mathcal{F}^{-1}_{2D}\left\{e^{i\gamma z_0}\mathcal{H}(\mathbf{k}_\|)\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}_{aS}, \mathbf{k}'_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}'_{aS})\mathcal{F}_{2D}[t_l\mathbf{E}_{aS,l}]\right\}\Big)^*\end{aligned} \tag{38}$$

where we have used the property $\mathbf{v} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}'_{aS}, \mathbf{k}_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_{aS})\mathbf{U} = \mathbf{U} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}_{aS}, \mathbf{k}'_{aS})\overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}'_{aS})\mathbf{v}$ and $\overleftrightarrow{\mathbf{Q}}\overleftrightarrow{\mathbf{M}}$ as well as $\mathcal{H}$ and t_l are real. Comparing Eq. (34) and Eq. (38), one obtains the gradient,

$$g(\mathbf{r}_0) = \frac{4i}{W} \sum_l \mathbf{U}_l^*(\mathbf{r}_0) \cdot \mathcal{F}_{2D}^{-1} \left\{ e^{i\gamma z_0} \mathcal{H}(\mathbf{k}_\parallel) \overleftrightarrow{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}_{aS}, \mathbf{k}'_{aS}) \overleftrightarrow{\mathbf{M}}(\mathbf{k}'_{aS}) \mathcal{F}_{2D} \left[t_l \mathbf{E}_{aS,l} \right] \right\} (\mathbf{r}_0) \tag{39}$$

Appendix D - derivation of the scaling factor α

Once the search direction is established, the scaling factor α has to be optimized. We start from Eq. (34),

$$F(N + \Delta N) = W^{-1} \sum_l \int \left| t_l - 2\mathrm{Re}(\mathbf{E}^*_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}_{aS,l}) - \Delta\mathbf{E}_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}^*_{aS,l} \right|^2 \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel). \tag{40}$$

We introduce the polynomial coefficients,

$$\begin{aligned}
P_l^{00} &= \int |t_l|^2 \, \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel) \\
P_l^{11} &= \int \left| 2\mathrm{Re}(\mathbf{E}^*_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}_{aS,l}) \right|^2 \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel) \\
P_l^{22} &= \int \left| \Delta\mathbf{E}_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}^*_{aS,l} \right|^2 \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel) \\
P_l^{01} &= \int t_l 2\mathrm{Re}(\mathbf{E}^*_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}_{aS,l}) \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel) \\
P_l^{02} &= \int t_l \Delta\mathbf{E}_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}^*_{aS,l} \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel) \\
P_l^{12} &= \int 2\mathrm{Re}(\mathbf{E}^*_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}_{aS,l}) \Delta\mathbf{E}_{aS,l} \cdot \Delta\mathbf{E}^*_{aS,l} \mathrm{d}(M\mathbf{R}_\parallel)
\end{aligned} \tag{41}$$

At the n-th iteration, the scatterer density is modified by $\Delta N_n = \alpha_n g_n$ so that Eq. (40) becomes,

$$F(\alpha_n) \approx W^{-1} \sum_l \left(P_l^{00} + \alpha_n^2 P_l^{11} + \alpha_n^4 P_l^{22} - 2\alpha_n P_l^{01} - 2\alpha_n^2 P_l^{02} + 2\alpha_n^3 P_l^{12} \right) \tag{42}$$

Then, α_n is determined so as to minimize the polynomial $F(\alpha_n)$. It was found that the speed of reconstruction can be improved by multiplying α_n with a factor l to yield $\alpha_{\mathrm{eff}} = l\alpha_n$. After each iteration l is reduced or increased in dependence whether $F_{n-1}/F_n - 1$ is larger or smaller than 4%.

Funding

Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS); Aix-Marseille University A*Midex (ANR-11-IDEX-0001-02, A-M-AAP-ID-17-13-170228-15.22-Rigneault); ANR grants France Bio Imaging (ANR-10-INSB-04-01) and France Life Imaging (ANR-11-INSB-0006) infrastructure networks; Plan cancer INSERM (PC201508, 18CP128-00).

References

1. A. Zumbusch, G. R. Holtom, and X. S. Xie, "Three-dimensional vibrational imaging by coherent anti-stokes raman scattering," Phys. Rev. Lett. **82**, 4142–4145 (1999).
2. J.-X. Cheng and X. S. Xie, eds., *Coherent Raman Scattering Microscopy (Series in Cellular and Clinical Imaging)* (Chemical Rubber Company, 2013), 1st ed.
3. H. Rigneault and P. Berto, "Tutorial: Coherent raman light matter interaction processes," APL Photonics **3**, 091101 (2018).

Optics EXPRESS

4. W. Min, C. W. Freudiger, S. Lu, and X. S. Xie, "Coherent nonlinear optical imaging: Beyond fluorescence microscopy," Annu. Rev. Phys. Chem. **62**, 507–530 (2011).
5. J. P. R. Day, K. F. Domke, G. Rago, H. Kano, H. Hamaguchi, E. M. Vartiainen, and M. Bonn, "Quantitative coherent anti-stokes raman scattering (CARS) microscopy," J. Phys. Chem. B **115**, 7713–7725 (2011).
6. M. T. Cicerone and C. H. Camp, "Histological coherent raman imaging: a prognostic review," Analyst **143**, 33–59 (2018).
7. T. W. Bocklitz, F. S. Salah, N. Vogler, S. Heuke, O. Chernavskaia, C. Schmidt, M. J. Waldner, F. R. Greten, R. Bräuer, M. Schmitt, A. Stallmach, I. Petersen, and J. Popp, "Pseudo-HE images derived from CARS/TPEF/SHG multimodal imaging in combination with raman-spectroscopy as a pathological screening tool," BMC Cancer **16**, 534 (2016).
8. O. Chernavskaia, S. Heuke, M. Vieth, O. Friedrich, S. Schürmann, R. Atreya, A. Stallmach, M. F. Neurath, M. Waldner, I. Petersen, M. Schmitt, T. Bocklitz, and J. Popp, "Beyond endoscopic assessment in inflammatory bowel disease: real-time histology of disease activity by non-linear multimodal imaging," Sci. Rep. **6**, 29239 (2016).
9. S. Heuke, O. Chernavskaia, T. Bocklitz, F. B. Legesse, T. Meyer, D. Akimov, O. Dirsch, G. Ernst, F. von Eggeling, I. Petersen, O. Guntinas-Lichius, M. Schmitt, and J. Popp, "Multimodal nonlinear microscopy of head and neck carcinoma - toward surgery assisting frozen section analysis," Head Neck **38**, 1545–1552 (2016).
10. J. Zheng, D. Akimov, S. Heuke, M. Schmitt, B. Yao, T. Ye, M. Lei, P. Gao, and J. Popp, "Vibrational phase imaging in wide-field CARS for nonresonant background suppression," Opt. Express **23**, 10756 (2015).
11. P. Berto, A. Jesacher, C. Roider, S. Monneret, H. Rigneault, and M. Ritsch-Marte, "Wide-field vibrational phase imaging in an extremely folded box-CARS geometry," Opt. Lett. **38**, 709 (2013).
12. P. Berto, D. Gachet, P. Bon, S. Monneret, and H. Rigneault, "Wide-field vibrational phase imaging," Phys. Rev. Lett. **109** (2012).
13. Y. Shen, J. Wang, K. Wang, A. V. Sokolov, and M. O. Scully, "Wide-field coherent anti-stokes raman scattering microscopy based on picosecond supercontinuum source," APL Photonics **3**, 116104 (2018).
14. C. Heinrich, S. Bernet, and M. Ritsch-Marte, "Wide-field coherent anti-stokes raman scattering microscopy," Appl. Phys. Lett. **84**, 816–818 (2004).
15. C. Heinrich, C. Meusburger, S. Bernet, and M. Ritsch-Marte, "CARS microscopy in a wide-field geometry with nanosecond pulses," J. Raman Spectrosc. **37**, 675–679 (2006).
16. C. Heinrich, A. Hofer, S. Bernet, and M. Ritsch-Marte, "Coherent anti-stokes raman scattering microscopy with dynamic speckle illumination," New J. Phys. **10**, 023029 (2008).
17. A. Jesacher, C. Roider, S. Khan, G. Thalhammer, S. Bernet, and M. Ritsch-Marte, "Contrast enhancement in widefield CARS microscopy by tailored phase matching using a spatial light modulator," Opt. Lett. **36**, 2245 (2011).
18. I. Toytman, K. Cohn, T. Smith, D. Simanovskii, and D. Palanker, "Wide-field coherent anti-stokes raman scattering microscopy with non-phase-matching illumination," Opt. Lett. **32**, 1941 (2007).
19. I. Toytman, D. Simanovskii, and D. Palanker, "On illumination schemes for wide-field CARS microscopy," Opt. Express **17**, 7339 (2009).
20. K. Wicker and R. Heintzmann, "Resolving a misconception about structured illumination," Nat. Photonics **8**, 342–344 (2014).
21. M. Lei, "Video-rate wide-field coherent anti-stokes raman scattering microscopy with collinear nonphase-matching illumination," J. Biomed. Opt. **16**, 021102 (2011).
22. K. M. Hajek, B. Littleton, D. Turk, T. J. McIntyre, and H. Rubinsztein-Dunlop, "A method for achieving super-resolved widefield cars microscopy," Opt. Express **18**, 19263 (2010).
23. K. Shi, P. S. Edwards, J. Hu, Q. Xu, Y. Wang, D. Psaltis, and Z. Liu, "Holographic coherent anti-stokes raman scattering bio-imaging," Biomed. Opt. Express **3**, 1744 (2012).
24. A. S. Duarte, C. Schnedermann, and P. Kukura, "Wide-field detected fourier transform CARS microscopy," Sci. Rep. **6**, 37516 (2016).
25. G. Zheng, R. Horstmeyer, and C. Yang, "Wide-field, high-resolution fourier ptychographic microscopy," Nat. Photonics **7**, 739–745 (2013).
26. J.-X. Cheng, A. Volkmer, and X. S. Xie, "Theoretical and experimental characterization of coherent anti-stokes raman scattering microscopy," J. Opt. Soc. Am. B **19**, 1363 (2002).
27. N. Streibl, "Three-dimensional imaging by a microscope," J. Opt. Soc. Am. A **2**, 121 (1985).
28. S. Heuke, F. B. Legesse, A. Lorenz, T. Pascher, D. Akimov, M. Jäger, M. Schmitt, and J. Popp, "Fiber-based dual-focus time-demultiplexed second harmonic generation microscopy," Opt. Lett. **40**, 2505 (2015).
29. M. Schrader, S. W. Hell, and H. T. M. van der Voort, "Three-dimensional super-resolution with a 4pi-confocal microscope using image restoration," J. Appl. Phys. **84**, 4033–4042 (1998).
30. O. Haeberlé, K. Belkebir, H. Giovaninni, and A. Sentenac, "Tomographic diffractive microscopy: basics, techniques and perspectives," J. Mod. Opt. **57**, 686–699 (2010).
31. S. Khadir, P. C. Chaumet, G. Baffou, and A. Sentenac, "Quantitative model of the image of a radiating dipole through a microscope," J. Opt. Soc. Am. A **36**, 478 (2019).
32. D. Gachet, N. Sandeau, and H. Rigneault, "Influence of the raman depolarisation ratio on far-field radiation patterns in coherent anti-stokes raman scattering (CARS) microscopy," J. Eur. Opt. Soc. Rapid Publ. **1** (2006).
33. L. Novotny and B. Hecht, "Preface," in *Principles of Nano-Optics,* (Cambridge University Press, 2006), pp. xv–xviii.
34. D. A. Smunev, P. C. Chaumet, and M. A. Yurkin, "Rectangular dipoles in the discrete dipole approximation," J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. **156**, 67–79 (2015).

35. M. J. Huttunen, A. Abbas, J. Upham, and R. W. Boyd, "Label-free super-resolution with coherent nonlinear structured-illumination microscopy," J. Opt. **19**, 085504 (2017).
36. Z. Wen, C. Yang, X. Liu, and S. Marchesini, "Alternating direction methods for classical and ptychographic phase retrieval," Inverse Probl. **28**, 115010 (2012).
37. L. Bian, J. Suo, J. Chung, X. Ou, C. Yang, F. Chen, and Q. Dai, "Fourier ptychographic reconstruction using poisson maximum likelihood and truncated wirtinger gradient," Sci. Rep. **6**, 27384 (2016).
38. A. P. Konijnenberg, W. M. J. Coene, and H. P. Urbach, "Model-independent noise-robust extension of ptychography," Opt. Express **26**, 5857 (2018).
39. C. Zuo, J. Sun, and Q. Chen, "Adaptive step-size strategy for noise-robust fourier ptychographic microscopy," Opt. Express **24**, 20724 (2016).
40. X. Ou, G. Zheng, and C. Yang, "Embedded pupil function recovery for fourier ptychographic microscopy," Opt. Express **22**, 4960 (2014).
41. L. Tian and L. Waller, "3d intensity and phase imaging from light field measurements in an LED array microscope," Optica **2**, 104 (2015).
42. K. Unger, T. Zhang, P. C. Chaumet, A. Sentenac, and K. Belkebir, "Linearized inversion methods for three-dimensional electromagnetic imaging in the multiple scattering regime," J. Mod. Opt. **65**, 1787–1792 (2018).
43. E. Polak and G. Ribière, "Note sur la convergence de méthodes directions conjuguées," Revue française d'informatique et de recherche opérationelle **3**, 35–43 (2017).
44. D. B. Murphy and M. W. Davidson, *Fundamentals of Light Microscopy and Electronic Imaging* (John Wiley & Sons, Inc., 2012).
45. R. Horstmeyer, R. Heintzmann, G. Popescu, L. Waller, and C. Yang, "Standardizing the resolution claims for coherent microscopy," Nat. Photonics **10**, 68–71 (2016).
46. G. Eckhardt, R. W. Hellwarth, F. J. McClung, S. E. Schwarz, D. Weiner, and E. J. Woodbury, "Stimulated raman scattering from organic liquids," Phys. Rev. Lett. **9**, 455–457 (1962).
47. S. Heuke, B. Sarri, X. Audier, and H. Rigneault, "Simultaneous dual-channel stimulated raman scattering microscopy demultiplexed at distinct modulation frequencies," Opt. Lett. **43**, 3582 (2018).
48. J. Chung, H. Lu, X. Ou, H. Zhou, and C. Yang, "Wide-field fourier ptychographic microscopy using laser illumination source," Biomed. Opt. Express **7**, 4787 (2016).
49. R. W. Boyd, *Nonlinear Optics* (Academic Press, 2003).

La tomographie de diffraction optique est une technique d'imagerie dans laquelle un objet est illuminé successivement par un faisceau laser sous différents angles d'incidence avec une méthode interférométrique qui permet d'enregistrer à la fois la phase et l'intensité du champ dans l'espace image d'un microscope. La permittivité de l'objet est alors reconstruite numériquement à partir du jeu de données des champs complexes à l'aide d'une méthode d'inversion.

Dans ce tapuscript, nous étudions tout d'abord l'effet de la diffusion multiple dans l'objet sur les reconstructions obtenues, en étudiant notamment différentes possibilités d'approximation (Born) pour accélérer le calcul.

La mesure de la phase dans le domaine de l'optique étant délicate, car obtenue par une méthode interférentielle, j'ai développé une technique de reconstruction basée uniquement sur les intensités. J'ai notamment montré que les reconstructions ainsi obtenues sont proches de celles avec le jeu de données complet champ + phase.

Enfin, nous proposons de coupler la tomographie de diffraction sans mesure de phase à la microscopie de fluorescence à illumination structurée. Dans ce cadre, nous illustrons l'impact de la modélisation de l'illumination excitatrice au niveau des fluorophores sur le pouvoir de résolution de la technique d'imagerie. Par ailleurs, nous présentons une méthode d'imagerie qui estime simultanément les fluorophores et le milieu qui les entoure à partir de la mesure conjointe des intensités de diffraction et de fluorescence.

Optical diffraction tomography is an imaging technique in which a target is successively illuminated by a laser beam under different angles of incidence with an interferometric setup which enables to record both the phase and the intensity of the field in the image space of a microscope. The permittivity of the target is then numerically estimated from the complex field dataset thanks to an inversion procedure.

In this typescript, we first study the effect of multiple scattering inside the target on the obtained reconstructions by studying different approximations (Born) to speed up the computation.

The recording of the phase in the optical domain is tricky, for it requires a interferometric setup. I have built a reconstruction technique based only on the intensities. I show that the obtained reconstructions are close to those obtained with the complete dataset field + phase.

Finally, we propose to adjoin phaseless diffraction tomography to fluorescence structured illumination microscopy. In this framework, we illustrate the impact of the modelization of the illumination excitating the fluorophores on the resolving power of the imaging technique. Moreover, we demonstrate an imaging method which estimates simultaneously the fluorophores and the surrounding media from the joint recording of diffraction and fluorescence intensities.