



Méthodes de décomposition non-linéaire pour l'imagerie X spectrale

Tom Hohweiller

► To cite this version:

Tom Hohweiller. Méthodes de décomposition non-linéaire pour l'imagerie X spectrale. Traitement du signal et de l'image [eess.SP]. Université de Lyon, 2019. Français. NNT : 2019LYSEI097 . tel-02956250

HAL Id: tel-02956250

<https://theses.hal.science/tel-02956250>

Submitted on 2 Oct 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.



N°d'ordre NNT : 2019LYSEI097

THESE de DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LYON
opérée au sein de
L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon

Ecole Doctorale N°160
Electronique, Electrotechnique, Automatique

Spécialité/discipline de doctorat :
Traitement du Signal et de l'Image

Soutenue publiquement le 13/11/2019, par :
Tom Hohweiller

**Méthodes de décomposition
non-linéaire pour l'imagerie X spectrale**

Devant le jury composé de :

Thomas	RODET	Professeur	ENS Cachan	Rapporteur
Christian	MOREL	Professeur	Aix-Marseille Université	Rapporteur
Laurent	DESBAT	Professeur	Université Grenoble Alpes	Examinateur
Clarisse	FOURNIER	Ingénieur Chercheur	CEA LETI	Examinatrice
Françoise	PEYRIN	Directrice de recherche	INSERM	Examinatrice
Bruno	SIXOU	Maître de conférence	INSA Lyon	Directeur de thèse
Nicolas	DUCROS	Maître de conférence	INSA Lyon	Co-directeur de thèse

Département FEDORA – INSA Lyon - Ecoles Doctorales – Quinquennal 2016-2020

SIGLE	ECOLE DOCTORALE	NOM ET COORDONNEES DU RESPONSABLE
CHIMIE	CHIMIE DE LYON http://www.edchimie-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage secretariat@edchimie-lyon.fr INSA : R. GOURDON	M. Stéphane DANIELE Institut de recherches sur la catalyse et l'environnement de Lyon IRCELYON-UMR 5256 Équipe CDFA 2 Avenue Albert EINSTEIN 69 626 Villeurbanne CEDEX directeur@edchimie-lyon.fr
E.E.A.	ÉLECTRONIQUE, ÉLECTROTECHNIQUE, AUTOMATIQUE http://edeea.ec-lyon.fr Sec. : M.C. HAVGOUDOUKIAN ecole-doctorale.eea@ec-lyon.fr	M. Gérard SCORLETTI École Centrale de Lyon 36 Avenue Guy DE COLLONGUE 69 134 Écully Tél : 04.72.18.60.97 Fax 04.78.43.37.17 gerard.scorletti@ec-lyon.fr
E2M2	ÉVOLUTION, ÉCOSYSTÈME, MICROBIOLOGIE, MODÉLISATION http://e2m2.universite-lyon.fr Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : H. CHARLES secretariat.e2m2@univ-lyon1.fr	M. Philippe NORMAND UMR 5557 Lab. d'Ecologie Microbienne Université Claude Bernard Lyon 1 Bâtiment Mendel 43, boulevard du 11 Novembre 1918 69 622 Villeurbanne CEDEX philippe.normand@univ-lyon1.fr
EDISS	INTERDISCIPLINAIRE SCIENCES-SANTÉ http://www.ediss-lyon.fr Sec. : Sylvie ROBERJOT Bât. Atrium, UCB Lyon 1 Tél : 04.72.44.83.62 INSA : M. LAGARDE secretariat.ediss@univ-lyon1.fr	Mme Emmanuelle CANET-SOULAS INSERM U1060, CarMeN lab, Univ. Lyon 1 Bâtiment IMBL 11 Avenue Jean CAPELLE INSA de Lyon 69 621 Villeurbanne Tél : 04.72.68.49.09 Fax : 04.72.68.49.16 emmanuelle.canet@univ-lyon1.fr
INFOMATHS	INFORMATIQUE ET MATHÉMATIQUES http://edinfomaths.universite-lyon.fr Sec. : Renée EL MELHEM Bât. Blaise PASCAL, 3e étage Tél : 04.72.43.80.46 infomaths@univ-lyon1.fr	M. Luca ZAMBONI Bât. Braconnier 43 Boulevard du 11 novembre 1918 69 622 Villeurbanne CEDEX Tél : 04.26.23.45.52 zamboni@maths.univ-lyon1.fr
Matériaux	MATÉRIAUX DE LYON http://ed34.universite-lyon.fr Sec. : Stéphanie CAUVIN Tél : 04.72.43.71.70 Bât. Direction ed.materiaux@insa-lyon.fr	M. Jean-Yves BUFFIÈRE INSA de Lyon MATEIS - Bât. Saint-Exupéry 7 Avenue Jean CAPELLE 69 621 Villeurbanne CEDEX Tél : 04.72.43.71.70 Fax : 04.72.43.85.28 jean-yves.buffiere@insa-lyon.fr
MEGA	MÉCANIQUE, ÉNERGÉTIQUE, GÉNIE CIVIL, ACOUSTIQUE http://edmega.universite-lyon.fr Sec. : Stéphanie CAUVIN Tél : 04.72.43.71.70 Bât. Direction mega@insa-lyon.fr	M. Jocelyn BONJOUR INSA de Lyon Laboratoire CETHIL Bâtiment Sadi-Carnot 9, rue de la Physique 69 621 Villeurbanne CEDEX jocelyn.bonjour@insa-lyon.fr
ScSo	ScSo* http://ed483.univ-lyon2.fr Sec. : Véronique GUICHARD INSA : J.Y. TOUSSAINT Tél : 04.78.69.72.76 veronique.cervantes@univ-lyon2.fr	M. Christian MONTES Université Lyon 2 86 Rue Pasteur 69 365 Lyon CEDEX 07 christian.montes@univ-lyon2.fr

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier mes encadrants, Bruno, Nicolas et Françoise pour leurs conseils, le temps qu'ils ont pris pour m'accompagner tout au long de ces trois ans et demi. Ils m'ont permis d'être fier de ce que j'ai accompli pendant cette période et d'être arrivé au bout de cette thèse.

En premier lieu je voudrais remercier Bruno d'avoir accepté d'être mon directeur de thèse. Il a toujours su m'aider dans mes problèmes mathématiques et en me l'expliquant de manière toujours compréhensible. Je tiens aussi à le remercier pour la bienveillance qu'il a toujours eue envers moi.

Nicolas a également été d'une aide incroyable pendant ces trois ans. Il m'a permis de comprendre ce sujet qui m'a paru tellement compliqué et m'a constamment poussé pour donner le meilleur que je pouvais. Sans lui, cette thèse ne serait pas là où elle a fini.

Je tiens enfin à remercier Françoise pour m'avoir également porté ce sujet. Elle m'a tellement apporté grâce à son expérience, sur ses retours et ses conseils pendant la thèse. Ses retours resteront inégalables dans le domaine de la recherche, pour leur précision et leur pertinence.

Je tiens à remercier Olivier Beuf, directeur du laboratoire Creatis, pour m'avoir accueilli dans cet établissement qui m'a donné un cadre de travail accueillant et calme.

Je tiens également à remercier les membres du jury pour avoir accepté d'en faire partie. Je tiens à remercier spécialement Christian Morel et Thomas Rodet pour avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse de m'avoir fait des retours détaillés et constructifs. Ces derniers ont permis d'améliorer la qualité de mon manuscrit.

Je tiens à remercier toutes les personnes que j'ai pu côtoyer de près ou de loin à Creatis. L'ambiance de ce laboratoire a été propice pour me sentir bien dans cet environnement.

Je voudrais remercier mes co-bureau de stage : Emeline, Maxime, Vincent, Willy et Odran qui ne m'ont pas aidé pour faire avancer mon travail de stage mais avec qui nous avons passé de très bons moments.

Je suis reconnaissant de mes co-bureau de thèse : Florian, Paul, Rémi, Matthieu, Ruifen, Hao, Rémy, Laëticia et Charles pour l'environnement calme et respectueux. Mais également pour les moments de discussion que nous avons pu avoir. Pour les discussions sur la langue française et chinoise entre Ruifen, Matthieu et moi. Pour les grandes discussions avec Laëticia.

Je remercie également Pierre pour un support technique sans failles, Juan pour les discussions sur l'imagerie spectrale qui m'ont toujours aidé et Suzanne pour continuer ce travail ! Et à toutes les personnes que j'ai pu oublier : merci !

Je tiens également à remercier ma famille. Ma mère pour toujours avoir été là pendant ces études (et globalement tout le temps là), à ma sœur pour m'avoir montrée à quel point elle croyait en moi et à mon père qui m'a initié à la science et donné ce gout. Merci à vous, je ne l'aurai pas fait sans vous.

Je tiens à remercier le LabEx PRIMES (ANR-11-LABX-0063) pour avoir financé cette thèse.

Également pour avoir financé mes déplacements en conférence. Je tiens également à remercier le département FEDORA pour m'avoir permis de participer à l'école d'été par son financement.

Résumé

LA tomodensitométrie spectrale est une modalité d'imagerie par rayons X émergente. Si le principe de la double énergie est plus ancien, des développements récents sur des détecteurs à comptage de photons permettent d'acquérir des données résolues en énergie sur plusieurs plages. Cette modalité permet de réduire un certain nombre d'artéfacts classiques dont ceux liés au durcissement de spectre, mais surtout de remonter à la composition chimique des tissus. Les données spectrales permettent également d'utiliser de nouveaux agents de contraste (comme l'or par exemple) qui présentent des discontinuités énergétiques. La possibilité d'utiliser d'autres marqueurs et de quantifier leurs présences dans le patient donne à cette modalité un fort potentiel dans le domaine de l'imagerie médicale. Une approche classique pour le traitement des données spectrales est d'effectuer une décomposition en base de matériaux préalables à la reconstruction tomographique. Cependant, les méthodes de décomposition dans le domaine des projections avec un grand nombre de plages d'énergies n'en sont qu'à leurs débuts. Les techniques classiques par calibration, ne sont plus numériquement stables lorsqu'il y a plus de deux plages disponibles.

Le but de cette thèse est de développer de nouvelles méthodes de décomposition des données spectrales dans le domaine des projections. Après avoir formalisé le problème direct de la tomodensitométrie spectrale, le problème de décomposition en base de matériaux sera exprimé et traité comme un problème inverse non linéaire. Il sera résolu en minimisant une fonction de coût incluant un terme caractérisant la fidélité de la décomposition par rapport aux données et un *a priori* sur les cartes de matériaux projetées. Ces travaux présenteront tout d'abord une adaptation de la fonctionnelle prenant en compte la nature Poissonienne du bruit. Cette formulation permet d'obtenir de meilleures décompositions pour de forts niveaux de bruit par rapport à la formulation classique. Ensuite, deux algorithmes de minimisation incluant une contrainte de positivité additionnelle seront proposés. Le premier, un algorithme de Gauss-Newton projeté, permet d'obtenir des cartes rapidement et de meilleure qualité que des méthodes non contraintes. Pour améliorer les résultats du premier algorithme, une seconde méthode, de type ADMM, ajoute une contrainte d'égalité. Cette contrainte a permis de diminuer les artefacts présents dans l'image. Ces méthodes ont été évaluées sur des données numériques de souris et de thorax humain. Afin d'accélérer et de simplifier les méthodes, un choix automatique des hyperparamètres est proposé qui permet de diminuer fortement le temps de calcul tout en gardant de bonnes décompositions. Finalement, ces méthodes sont testées sur des données expérimentales provenant d'un prototype de scanner spectral.

Mots-clés : Imagerie par rayons X, imagerie spectrale, décomposition en matériaux, problèmes inverses, optimisation sous contrainte, régularisation

Abstract

SPECTRAL tomodensitometry is a new emerging x-ray imaging modality. If the dual-energy principle was already known for quite some time, new developments on photon-counting detectors now allowing acquiring more energy bins than before. This modality allows reducing some artifacts presents in x-ray imaging, such as beam hardening, but mostly to decompose the data into the chemical composition of the imaged tissue. It also enables the use of new markers (i.e. gold) with an energetic discontinuity. The use of these markers also allows to locate and quantify them in the patient, granting great potential for medical imaging. Decomposition in the projection domain followed by a tomographic reconstruction is a classical processing for those spectral data. However, decomposition methods in the projection domain are unstable for a high number of energy bins. Classical calibration technic is numerically unstable for more than two energy bins.

This thesis aims to developed new material decomposition methods in the projections domains. After expressing the spectral forward model, the decomposition problem is expressed and dealt as a non-linear inverse problem. It will be solved by minimizing a cost function composed by a term characterizing the fidelity of the decomposition regarding the data and an *a priori* of the decomposed material maps. We will firstly present an adaptation of the cost function that takes into account the Poissonian noise on the data. This formulation allows having better decomposed maps for a high level of noise than classical formulation. Then, two constrained algorithms will be presented. The first one, a projected Gauss-Newton algorithm, that enforces positivity on the decomposed maps, allows having better decomposed maps than an unconstrained algorithm. To improve the first algorithm, another one was developed that also used an equality constrain. The equality allows having images with fewer artifacts than before. These methods are tested on a numerical phantom of a mouse and thorax. To speed up the decomposition process, an automatic choice of parameters is presented, which allow faster decomposition while keeping good maps. Finally, the methods are tested on experimental data that are coming from a spectral scanner prototype.

Key-words : X-ray imaging, spectral imaging, material decomposition, inverse problem, constrained optimization, regularization

Sommaire

Sommaire	x
Liste des Figures	xiii
Liste des Tables	xv
Abréviations & Acronymes	xvii
Notations & Symboles	xix
Variables, Significations & Dimensions	xxi
Introduction	1
I Tomodensitométrie classique et spectrale	5
I.1 Introduction	7
I.2 Génération des rayons X	8
I.3 Interaction matière-lumière	10
I.4 Formation de l'image	12
I.5 Reconstruction tomographique	16
I.6 Décompositions dans une base	21
I.7 Approches de reconstruction en TDMS	24
I.8 Applications médicales	28
I.9 Conclusion	29
II Problèmes inverses	31
II.1 Introduction	33
II.2 Problème inverse	33
II.3 Solutions exactes	35
II.4 Algorithmes de minimisation	37
II.5 Conclusion	44
III Simulations numériques : simulation des données spectrales et critères d'évaluation des méthodes	47
III.1 Introduction	49
III.2 Données spectrales	49
III.3 Évaluation des méthodes de décomposition	55

III.4	Conclusion	56
IV	Approche de la décomposition par la divergence de Kullback-Leibler	57
IV.1	Introduction	59
IV.2	Problème discret	60
IV.3	Décomposition des matériaux	60
IV.4	Minimisation de la fonctionnelle	62
IV.5	Simulations numériques	64
IV.6	Décompositions bi-matériaux	66
IV.7	Décompositions tri-matériaux	76
IV.8	Conclusion	77
V	Décomposition sous contraintes de positivité	79
V.1	Introduction	81
V.2	Algorithme de minimisation sous contraintes	81
V.3	Simulations numériques	84
V.4	Décompositions sous contraintes fixes	85
V.5	Évolution des bornes	87
V.6	Décompositions sous contraintes évolutives	88
V.7	Conclusion	94
VI	Décompositions sous contraintes de positivité et d'égalité	95
VI.1	Introduction	97
VI.2	Décomposition des matériaux	98
VI.3	Simulations numériques	102
VI.4	Résultats et discussions	103
VI.5	Conclusion	110
VII	Choix automatiques des hyperparamètres	111
VII.1	Introduction	113
VII.2	Problème de décomposition	114
VII.3	Choix des hyperparamètres	114
VII.4	Mise en œuvre des techniques	116
VII.5	Résultats et discussions	116
VII.6	Décomposition de tous les angles avec le choix automatique	125
VII.7	Conclusion	129
VIII	Décompositions de données expérimentales	131
VIII.1	Introduction	133
VIII.2	Description de l'acquisition	133
VIII.3	Méthodes de décomposition	135
VIII.4	Paramètres des algorithmes	136
VIII.5	Décompositions sous contraintes de positivité pour les cartes de matériaux	137
VIII.6	Décompositions sous contraintes de positivité du coefficient d'atténuation linéique	142

VIII.7 Décompositions sous contraintes de positivité sur la carte du gadolinium	144
VIII.8 Conclusion	149
Conclusion et Perspectives	151
A Démonstration du terme KL	153
B Outils mathématiques	155
B.1 Développement en série de Taylor	155
B.2 Définition du gradient	155
B.3 Définition de la Jacobienne	156
B.4 Définition de la Hessienne	156
C Calcul des dérivés du terme de régularisation	157
C.1 Fonctionnelle	157
C.2 Dérivations	158
Bibliographie	159

Liste des Figures

I.1	Schéma de principe du scanner	8
I.2	Première photo par rayonnement X	8
I.3	Schéma d'un tube à rayon X	9
I.4	Illustration d'un spectre d'un rayonnement X	10
I.5	Prépondérance des différents effets d'atténuation en fonction de l'énergie pour des tissus mous	11
I.6	Schéma effets photoélectrique et Compton	11
I.7	Schéma de l'atténuation du rayonnement X dans un objet homogène	12
I.8	Schéma d'un détecteur de rayons X par conversion indirecte	13
I.9	Différentes approches pour l'imagerie spectrale	14
I.10	Différentes interactions dans un DCP	16
I.11	Schéma des différents types de faisceaux	17
I.12	Schéma projection en TDM	18
I.13	Schéma de principe du théorème de la coupe centrale	19
I.14	Exemples rétro-projection filtrée	20
I.15	Réponse d'un détecteur à comptage de photons	22
I.16	Exemple de différentes fonctions d'atténuation pour plusieurs matériaux	23
I.17	Décompositions dans des bases différentes	24
I.18	Schéma des différents domaines de décompositions	25
II.1	Problème direct et problème inverse dans le problème de décomposition en TDMS	35
II.2	Exemple d'un problème mal posé	37
II.3	Exemple de <i>LineSearch</i>	40
II.4	Comparaison de différents algorithmes de minimisation	42
II.5	Exemple de région de confiance	43
III.1	Spectre de la source utilisé pour simuler les données numériques	50
III.2	Réponse d'un détecteur à comptage de photons pour 3 et 4 plages d'énergies	51
III.3	Fonctions d'atténuation pour les tissus mous, les os et le gadolinium	52
III.4	Schéma de génération des données spectrales de DigiMouse	53
III.5	Schéma de génération des données spectrales du thorax	54
IV.1	Approximation du bruit poissonnien en bruit gaussien en fonction du nombre de photons envoyés	65

IV.2	Évolution de l'erreur moyenne en fonction du paramètre de régularisation α pour deux N^0	67
IV.3	Évolution de l'erreur ξ_θ et du SSIM en fonction du nombre de photons pour NM-MV, GN-MCP et GN-KL	68
IV.4	Cartes de matériaux décomposées par différents algorithmes pour deux angles de projection $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$ pour $N^0 = 10^{2.2}$	69
IV.5	Cartes de matériaux décomposées par différents algorithmes pour deux angles de projection $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$ pour $N^0 = 10^4$	70
IV.6	Évolution du nombre d'itérations moyen pour converger avec GN-MCP et GN-KL en fonction du nombre de photons	71
IV.7	Évolution du temps moyen pour converger avec GN-MCP et GN-KL en fonction du nombre de photons	72
IV.8	Évolution des métriques d'évaluation sur les volumes en fonction de N^0	72
IV.9	Coupes de matériaux reconstruites par différents algorithmes pour deux coupes $z = 100$ et $z = 248$ pour $N^0 = 10^{2.2}$	74
IV.10	Coupes de matériaux reconstruites par différents algorithmes pour deux coupes $z = 100$ et $z = 248$ pour $N^0 = 10^4$	75
IV.11	Cartes de matériaux décomposées par différents algorithmes pour DigiMouse composée de trois matériaux pour $\theta = 90^\circ$ pour $N^0 = 10^4$	77
V.1	Décomposition du thorax avec un algorithme sous contraintes fixes	86
V.2	Évolution, pour deux θ , de la fonction de coût, de la valeur de $\ell_{m,k}$ et de l'erreur quadratique moyenne ξ_θ	89
V.3	Carte des matériaux décomposés du thorax pour deux θ avec GN, GN-P et NM-MV	90
V.4	Erreur quadratique moyenne ξ_θ et le SSIM dans les projections pour GN, GN-P et NM-MV $\forall \theta$	91
V.5	Erreur quadratique moyenne ξ_z et le SSIM dans l'objet pour GN, GN-P et NM-MV $\forall z$	91
V.6	Cartes des matériaux reconstruits pour deux z avec GN, GN-P et NM-MV . .	93
VI.1	Évolution de la quantité c_m pour tous les matériaux pour tous les angles θ . .	103
VI.2	Carte des matériaux décomposés du thorax pour deux θ avec GN, GN-P, ADMM et NM-MV	105
VI.3	Erreur quadratique moyenne ξ_θ et le SSIM dans les projections pour GN, GN-P et NM-MV, $\forall \theta$	106
VI.4	Cartes des matériaux reconstruits pour deux z avec GN, GN-P, ADMM et NM-MV	107
VI.5	Erreur quadratique moyenne ξ_z et le SSIM dans l'objet pour GN, GN-P et NM-MV $\forall z$	108
VI.6	Quantification absolue de la diaphonie dans le volume reconstruit du thorax avec GN, GN-P et ADMM	108
VI.7	Images absolues des volumes où la diaphonie est présente	109

VII.1	Évolution, pour $\theta = 0^\circ$, de β pendant les itérations t	119
VII.2	Évolution, pour $\theta = 90^\circ$, de β pendant les itérations t	119
VII.3	Projections décomposées avec GN et GN-P pour les différents choix des hyperparamètres	122
VII.4	Projections décomposées avec GN et GN-P pour les différents choix des hyperparamètres	124
VII.5	Carte des matériaux décomposés du thorax pour deux θ avec GN, GN-P, ADMM et NM-MV avec le choix automatique des hyperparamètres	126
VII.6	Erreur quadratique moyenne ξ_θ et le SSIM dans les projections pour GN, GN-P et NM-MV, $\forall \theta$ avec le choix automatique des hyperparamètres	127
VII.7	Erreur quadratique moyenne ξ_z et le SSIM dans l'objet pour GN, GN-P et NM-MV, $\forall z$ avec le choix automatique des hyperparamètres	127
VII.8	Cartes des matériaux reconstruits pour deux z avec GN, GN-P, ADMM et NM-MV avec le choix automatique des hyperparamètres	128
VIII.1	Photo du scanner spectral de Philips installé au CERMEP	134
VIII.2	Descriptif du fantôme QRM	135
VIII.3	Sinogrammes décomposés du fantôme QRM avec différents algorithmes : GN, GN-P et ADMM, avec $\mathbf{a} \geq 0$	140
VIII.4	Coupes reconstruites à partir des projections décomposées du fantôme QRM avec différents algorithmes, avec $\mathbf{a} \geq 0$	141
VIII.5	Décompositions des sinogrammes du fantôme QRM avec différents algorithmes : GN, GN-P et ADMM, avec $\mu \geq 0$	143
VIII.6	Décompositions des sinogrammes du fantôme QRM avec différents algorithmes : GN, GN-P et ADMM, avec $\mathbf{a}_{gd} \geq 0$	146
VIII.7	Coupes reconstruites à partir des projections décomposées du fantôme QRM avec différents algorithmes, avec $\mathbf{a}_{gd} \geq 0$	147
VIII.8	Zones d'intérêt pour les tubes 1 à 7 pour le fantôme QRM	148
VIII.9	Concentrations relevées dans les tubes contenant un mélange iode-gadolinium dans le fantôme QRM.	148

Liste des Tables

VII.1	Erreur quadratique moyenne ξ_θ pour les différents choix des paramètres β	117
VII.2	Temps de calcul total, moyen et nombre d'itération pour le choix des hyperparamètres pour $\theta = 90^\circ$	118
VII.3	Temps de calcul total, moyen et nombre d'itération pour le choix des hyperparamètres pour $\theta = 0^\circ$	118

VIII.1 Concentrations en gadolinium et en iode des tubes du fantôme QRM	134
---	-----

Abréviations & Acronymes

Abréviation ou acronyme	Signification
TDM	Tomodensitométrie
TDMS	Tomodensitométrie spectrale
RX	Rayons X
CA	Coefficient d'atténuation
CAL	Coefficient d'atténuation linéique
DCP	Détecteur à comptage de photons
PI	Problème inverse
SVD	Décomposition en valeur singulière
BFGS	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno
KL	Kullback-Leibler
MCP	Moindres carrés pondérés
MV	Maximum de vraisemblance
SSIM	Structural similarity index measure
GN	Gauss-Newton
GN-P	Gauss-Newton projeté
ADMM	Alternating Direction Method of Mutlpliers

Notations & Symboles

Conventions générales

x et X	scalaires
\mathbf{x}	vecteur colonne
\mathbf{X}	matrice

Ensembles mathématiques

\mathbb{R}	ensemble des éléments réels
\mathbb{R}^+	ensemble des éléments réels positifs i.e. $\{x \in \mathbb{R} \text{ s.t. } x \geq 0\}$
\mathbb{R}^N	ensemble des vecteurs colonnes réels à N éléments
$\mathbb{R}^{N \times M}$	ensemble des matrices de N lignes et M colonnes réels

Vecteurs et matrices

x_n	n -ème élément du vecteur \mathbf{x}
$X_{n,m}$	élément de la n -ème ligne et de la m -ème colonne de la matrice \mathbf{X}
\mathbf{x}^T	transposée du vecteur \mathbf{x} (vecteur ligne)
\mathbf{X}^T	transposée de la matrice \mathbf{X}
\mathbf{X}^{-1}	inverse de la matrice \mathbf{X}
\mathbf{X}^\dagger	pseudo-inverse de la matrice \mathbf{X}

Variables, Significations & Dimensions

Variable	Signification	Dimension
M	Nombre de base	\mathbb{R}
P	Nombre de pixel	\mathbb{R}
I	Nombre de plage d'énergies	\mathbb{R}
N	Nombre de projections	\mathbb{R}
J	Nombre d'énergie	\mathbb{R}
X	Nombre de voxels	\mathbb{R}
n^0	Spectre à la sortie du tube à rayon X	\mathbb{R}
n	Spectre atténué	\mathbb{R}
ρ	Densité dans le volume	$\mathbb{R}^{M \times X}$
τ	Fonctions d'atténuations	$\mathbb{R}^{M \times J}$
μ	Coefficient d'atténuation linéaire	$\mathbb{R}^{J \times P}$ ou $\mathbb{R}^{J \times X}$
\mathbf{A}	Carte des matériaux pour tous les angles	$\mathbb{R}^{M \times P \times N}$
\mathbf{a}^{θ_n}	Carte des matériaux pour un angle	$\mathbb{R}^{M \times P}$
\mathbf{S}	Données spectrale tous les angles	$\mathbb{R}^{I \times P \times N}$
\mathbf{s}^{θ_n}	Données spectrale pour un angle	$\mathbb{R}^{I \times P}$
\mathcal{F}	Modèle direct	$\mathbb{R}^{MP} \rightarrow \mathbb{R}^{IP}$
\mathcal{C}	Fonction de coût	$\mathbb{R}^{IP} \rightarrow \mathbb{R}$
\mathcal{D}	Terme d'attache aux données	$\mathbb{R}^{IP} \rightarrow \mathbb{R}$
\mathcal{R}	Terme de régularisation global	$\mathbb{R}^{MP} \rightarrow \mathbb{R}$
\mathcal{R}_m	Terme de régularisation pour la base m	$\mathbb{R}^P \rightarrow \mathbb{R}$
α	Paramètre du terme de régularisation \mathcal{R}	\mathbb{R}
β_m	Paramètre du terme de régularisation \mathcal{R}_m	\mathbb{R}
\mathbf{g}	Gradient de la fonction de coût	\mathbb{R}^{MP}
\mathbf{H}	Hessienne de la fonction de coût	$\mathbb{R}^{MP \times MP}$
\mathbf{d}	Direction de descente	\mathbb{R}^{MP}
L_m	Borne inférieure pour la base m	\mathbb{R}
U_m	Borne supérieure pour la base m	\mathbb{R}

Introduction

LA tomodensitométrie spectrale (TDMS) est une nouvelle modalité d'imagerie par rayons X. Elle permet d'acquérir des mesures d'atténuations qui sont résolues en énergie. Outre le fait de diminuer un certain nombre d'artefacts, la TDMS nous permet de remonter à la composition chimique de l'objet imagé. Elle nous permet également d'utiliser de nouveaux marqueurs qui ne sont pas utilisés en tomodensitométrie classique, comme l'or ou le gadolinium par exemple. Ces derniers présentent des discontinuités énergétiques exploitables avec cette nouvelle modalité. Cette spécificité donne à ce type d'imagerie un fort intérêt pour le diagnostic dans le milieu médical. En effet, la possibilité de quantifier la composition chimique d'un tissu (comme l'os) permet de détecter des pathologies ([Pache *et al.* \(2010\)](#)).

Le principe de la TDMS a débuté avec les méthodes bi-énergies en considérant des acquisitions avec deux spectres à différentes énergies. [Alvarez *et Macovski* \(1976\)](#) ont introduit le principe de décomposition en double-énergie (suivant deux spectres) en calibrant le système à partir d'objets connus. Les données étaient alors décomposées en effet photoélectrique et Compton, ce qui permet de différencier la densité des matériaux et de faire un diagnostic. La limitation à deux spectres et les différentes méthodes d'acquisition (qui nécessitaient plus de dose ou d'équipement) ont fait que cette modalité n'a pas été largement utilisée dans le milieu médical. Cependant, des nouveaux détecteurs à comptage de photons (DCP) permettent maintenant d'acquérir plus de plages d'énergies ([Taguchi *et Iwanczyk* \(2013\)](#)). Cela permet de réduire la dose reçue mais ouvre également la possibilité d'avoir une plus grande résolution énergétique. Avec ces détecteurs, de nouvelles méthodes ont vu le jour, car la décomposition par calibration classique en double énergie devient instable numériquement avec plus de deux plages d'énergies ([Stenner *et al.* \(2007\)](#)). Le problème inverse non-linéaire de la TDMS consiste à reconstruire les volumes correspondant à une base (matériaux, effets photoélectrique et Compton par exemple) à partir des données spectrales. Si les méthodes par calibration restent les plus utilisées, ce problème peut également être attaqué par des approches variationnelles ([Schlomka *et al.* \(2008\)](#); [Ducros *et al.* \(2017\)](#); [Long *et Fessler* \(2014\)](#)). Différentes classes de méthodes sont généralement considérées. Nous pouvons créer les volumes spectraux (faire une reconstruction tomographique des données spectrales), puis les décomposer ([Brooks \(1977\)](#)), faire la décomposition et la reconstruction simultanément ([Mechlem *et al.* \(2018\)](#)) ou, finalement, décomposer les projections et reconstruire les volumes correspondants ([Abascal *et al.* \(2019\)](#)).

Cette thèse portera sur la décomposition des données spectrales dans une base de matériaux

dans le domaine des projections. Le fait de décomposer directement dans les projections permet de traiter la non-linéarité du problème avant de reconstruire les volumes. La décomposition se fera par une approche variationnelle pour résoudre le problème inverse et des méthodes de minimisation sous contraintes de la fonction de coût.

Cette thèse a été financée par le LabEx PRIMES¹ au sein du laboratoire CREATIS dans l'équipe "Imagerie tomographique et thérapie par radiation".

Ce manuscrit se compose de huit chapitres. Les deux premiers expliquent les principes de la tomodensitométrie classique et spectrale puis les méthodes de résolution des problèmes inverses. Les suivants exposent les différentes contributions effectuées pendant cette thèse.

Le **chapitre I** expose les principes liés à la tomodensitométrie classique et spectrale : génération des rayons X, interactions rayons X-matière, formation de l'image. Nous présenterons également différentes méthodes classiques pour la reconstruction tomographique avant d'introduire le traitement spécifique aux données spectrales.

Le **chapitre II** introduit différentes méthodes standards pour la résolution des problèmes inverses. Nous expliquons comment obtenir la solution de manière analytique puis de manière itérative par le biais d'algorithmes de minimisation.

Le **chapitre III** décrit la simulation des données numériques spectrales, qui seront utilisées pour évaluer les méthodes proposées. Nous présentons le modèle spectral (spectre source, réponse du détecteur et base de décomposition), puis les volumes numériques d'une souris et d'un thorax humain. La seconde moitié de ce chapitre décrit les méthodes d'évaluation qui seront utilisées pour comparer qualitativement les différentes approches.

Le **chapitre IV** propose une nouvelle approche de décomposition spectrale par la divergence de Kullback-Leibler afin de rendre compte plus fidèlement du bruit présent dans les données. Cette divergence sera utilisée comme terme d'attache aux données et sera comparée à un terme de moindres carrés pondérés. Ces travaux ont été présentés à la conférence SPIE (Hohweiller *et al.* (2017a)) et publiés dans le journal IRBM (Hohweiller *et al.* (2017b)).

Le **chapitre V** vise à corriger un problème apparaissant sur les cartes de matériaux décomposées. Avec les méthodes classiques, ces cartes peuvent avoir des valeurs négatives, or une masse projetée ne peut pas l'être. Nous proposons un nouvel algorithme de minimisation sous contrainte pour que les cartes décomposées soient positives. Nous utiliserons un algorithme d'ordre 2 de type Gauss-Newton pour avoir une décomposition rapide. Cet algorithme de minimisation a été présenté à la conférence IEEE ISBI (Hohweiller *et al.* (2018a)).

Le **chapitre VI** propose une nouvelle méthode de minimisation sous contrainte. En plus de s'assurer que les cartes décomposées soient positives, elle permet sur chaque projection d'imposer la quantité totale de marqueur connue dès lors que le champ de vue du détecteur est suffisamment grand. Nous avons opté pour la mise en œuvre d'un algorithme *Alternating Direction Method of Multipliers* (ADMM). Ces travaux ont été présentés à la conférence EUSIPCO (Hohweiller *et al.* (2018b)).

Le **chapitre VII** s'attaque à un problème récurrent pour les approches variationnelles régularisée qui est le choix des hyperparamètres de régularisation. Parcourir l'espace à la recherche des valeurs optimales pour les hyperparamètres de régularisation peut être très long en pratique.

1. ANR-11-LABX-0063

C'est pour cela que nous présenterons une méthode de choix automatique des paramètres qui se déroule au cours des itérations. Cette méthode repose sur le principe de balance des termes qui composent la fonction de coût et permet de réduire le nombre de paramètres à choisir. Ces travaux seront bientôt soumis en vue d'être publiés.

Le chapitre VIII est consacré à l'application de méthode classique et précédemment présentées sur des données expérimentales acquises sur un prototype de scanner spectral disponible à l'université de Lyon. Un fantôme composé de cylindres d'eau, d'iode et de gadolinium avec des concentrations connues a été utilisé. Ces travaux seront communiqués conjointement avec les résultats du chapitre précédent.

Chapitre I

Tomodensitométrie classique et spectrale

Contents

I.1	Introduction	7
I.2	Génération des rayons X	8
I.3	Interaction matière-lumière	10
I.4	Formation de l'image	12
I.4.1	TDM classique	12
I.4.2	TDM spectrale	13
I.5	Reconstruction tomographique	16
I.5.1	Transformation de Radon	17
I.5.2	Faisceau parallèle 2D	18
I.5.3	Faisceau en éventail 2D	20
I.6	Décompositions dans une base	21
I.6.1	Base Compton-photoélectrique	22
I.6.2	Base de matériaux	23
I.6.3	Images mono-énergétiques	23
I.6.4	Avantages et inconvénients des différentes bases	23
I.7	Approches de reconstruction en TDMS	24
I.7.1	Domaine objet	25
I.7.2	Décomposition directe	26
I.7.3	Domaine des projections	27
I.7.4	Avantages et inconvénients	28
I.8	Applications médicales	28
I.9	Conclusion	29

Chapitre I

La tomodensitométrie (TDM) est une technique d'imagerie utilisant les rayons X (RX). Elle permet d'imager rapidement des objets (~ 15 min pour un corps complet) avec grande précision (jusqu'à 1 mm de résolution ou mieux dans le volume). La TDM a été introduite par Godfrey Newbold [Hounsfield](#) d'après des travaux de Allan McLeod Cormack au début des années 1970. Ils ont été récompensés par le prix Nobel de Médecine en 1979. Les premières applications de leurs travaux ont été détaillées par James [Ambrose](#) en 1973. Cependant, des développements récents, dans les années ~ 2000 , sur des détecteurs résolus en énergie ont ouvert cette modalité à de nouvelles méthodes permettant de décomposer les données. Les TDM classique et spectrale (TDMS) seront décrites dans ce chapitre ainsi que les différentes méthodes et approches pour décomposer les données en TDMS. Nous détaillerons également comment reconstruire le volume à partir des projections.

I.1 Introduction

La tomodensitométrie, ou scanner, est une modalité d'imagerie par rayons X. Elle est largement utilisée en routine clinique (197 examens scanner pour 1000 habitants contre 100 pour l'IRM en France en 2015 selon un rapport de l'[OCDE \(2017\)](#)) grâce au fait que le rayonnement X à haute énergie permet de traverser les objets en étant détecté à la sortie et que cet examen est rapide. L'imagerie radiographique a été la première forme de TDM à être développée. Elle consiste à faire une acquisition de l'image des rayons X transmis qui ont été atténués par l'objet imagé. Aujourd'hui, les systèmes scanner permettent d'acquérir des signaux, appelés projections, pour plusieurs angles d'acquisition. À partir de ces signaux à différents angles, l'objet peut être reconstruit. Il y a deux possibilités pour changer d'angle de projection, soit le système tube-détecteur fait une rotation autour de l'objet, soit ce dernier tourne grâce à une plateforme. Dans le cas clinique, le patient restera immobile et le système tourne autour de lui, comme le montre la figure [I.1](#). Dans ce chapitre, nous détaillerons tout d'abord la génération de ces RX, leurs interactions avec la matière, et le mécanisme de formation de l'image radiographique en TDM classique et spectrale. Ensuite, nous introduirons les outils nécessaires pour reconstruire l'objet en trois dimensions. Nous détaillerons les différentes manières de décomposer les images avec les données spectrales acquises. Nous finirons en introduisant quelques applications médicales de cette modalité avant de conclure.

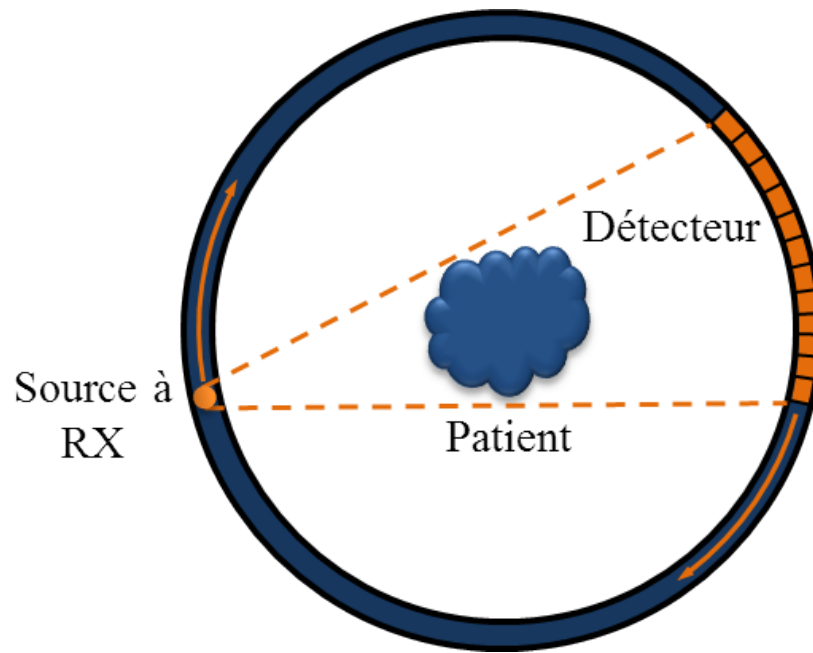


FIGURE I.1 – Schéma de principe du scanner.

I.2 Génération des rayons X

Les RX ont été découverts par le physicien Wilhelm Conrad Röntgen en 1895. Il observe que le rayonnement X traverse le corps humain, ce qu'il a pu démontrer en prenant une photo de la main de sa femme (figure I.2). Ce rayonnement électromagnétique se situe dans une gamme



FIGURE I.2 – Photo de la main de la femme de Wilhelm Röntgen, première image par rayonnement X (source wikipédia).

de longueurs d'onde entre 0.001 et 10 nm correspondant à des énergies entre 10 eV et quelques MeV¹.

Les RX sont générés par un tube à RX. Ce tube se compose de trois éléments :

1. La relation de Planck-Einstein lie l'énergie à la longueur d'onde d'un rayonnement électromagnétique par la relation $E = \frac{hc}{\lambda}$. Où $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J.s est la constante de Planck, $c = 299\,792\,458$ m.s⁻¹ et λ la longueur d'onde en mètre.

- i d'une cathode composée d'un filament (généralement en tungstène) traversée par un courant de chauffage ;
- ii d'une anode composée d'un matériau cible (tungstène, molybdène, cuivre...) ;
- iii d'un champ électrique généré par une tension d'accélération de l'ordre de la dizaine de kV.

Un schéma de principe est donné Figure I.3. Le courant de chauffage (I_{ch}) va contrôler le nombre de photons envoyés, tandis que la tension d'accélération va contrôler l'énergie des RX. L'électron-volt (eV) est la quantité d'énergie qu'à un électron accéléré par une tension de 1 V. Ainsi, lorsque nous parlons d'énergie de 100 keV par exemple, cela signifie que la tension d'accélération sera de 100 kV. Le courant de chauffage va permettre de libérer, par

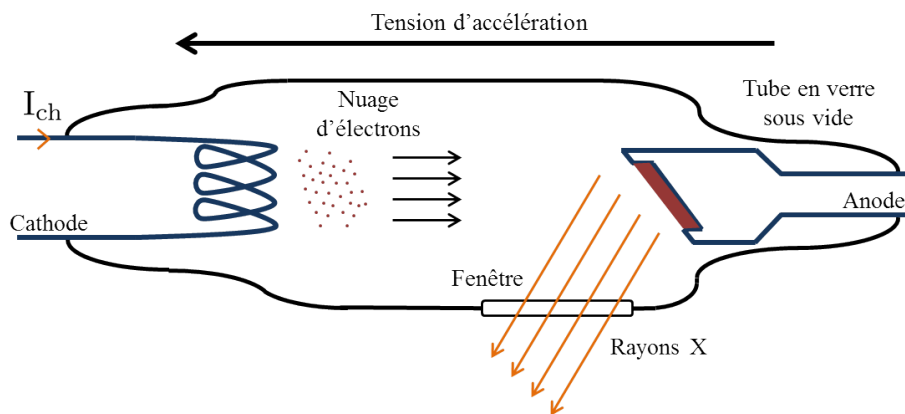


FIGURE I.3 – Schéma d'un tube à rayon X.

émission thermoionique, un nuage d'électrons au niveau du filament (cathode). Ces électrons sont accélérés par le champ électrique vers un matériau cible (l'anode). Lors de la collision entre les électrons et les atomes constituant de la cible, il y a génération de RX par la conversion d'énergie cinétique en radiation électromagnétique grâce à différentes interactions :

- i interactions des électrons avec les couches électroniques de l'atome de la cible, créant les raies caractéristiques du spectre ;
- ii interaction des électrons avec le noyau de l'atome de la cible.

Les interactions avec le noyau de l'atome de la cible sont à l'origine de la partie la plus lisse du spectre du rayonnement X montré figure I.4. Plus l'électron incident est proche du noyau, plus l'énergie du rayonnement de freinage (appelé également rayonnement de bremsstrahlung) sera élevée. L'interaction avec des électrons avec les couches électroniques crée des pics caractéristiques qui dépendent du matériau de la cible. L'électron incident va heurter l'électron de l'atome, l'éjectant. En retrouvant un état stable de l'atome (par fluorescence), il y aura émission de photons à des longueurs d'onde caractéristiques.

En imagerie médicale (Webb *et* Kagadis (2003)) seules une partie des énergies générées sont utiles. Les RX de faibles énergies ne traverseront pas le patient et ne feraient que l'irradier. C'est pourquoi un filtre est placé pour les absorber directement à la sortie du tube. Dans le cas de la figure I.4, une succession de plaques de différentes épaisseurs de béryllium, d'aluminium et de cuivre sont utilisées.

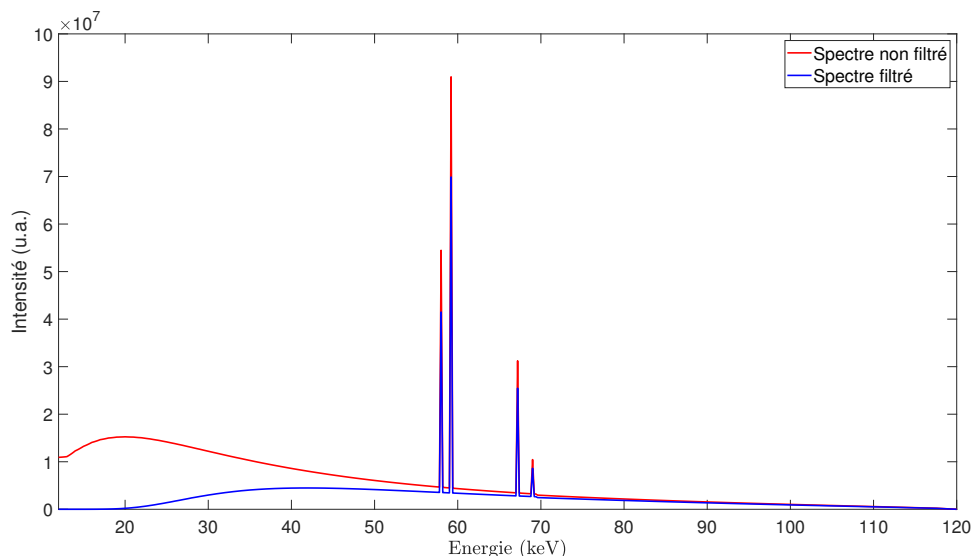


FIGURE I.4 – Illustration d’un spectre d’un rayonnement X à la sortie du tube à RX (en rouge), et son spectre après filtrage par des plaques de béryllium (0.8 mm), d’aluminium (1 mm) et de cuivre (0.11 mm) (en bleu). Généré à partir du logiciel SpekCalc de Poludniowski *et al.* (2009).

I.3 Interaction matière-lumière

Le rayonnement X émis et filtré est dirigé vers le patient. Le rayonnement X peut interagir de plusieurs manières avec la matière :

- i diffusion cohérente ;
- ii effet photoélectrique ;
- iii diffusion Compton ;
- iv production de paires (couple particule-antiparticule).

Cependant, certains effets ne se produisent pas dans la gamme énergétique des RX utilisée en imagerie médicale (10 et 150 keV). Sur la figure I.5 nous montrons la contribution des différents effets sur une grande gamme énergétique (10 keV à 10 MeV) pour des tissus mous. Nous pouvons voir que la diffusion cohérente ne devient comparable à la diffusion Compton et à l’effet photoélectrique qu’en dessous de 10 keV. Le photon X incident va être diffusé (dévié de sa trajectoire originale), tout en gardant la même énergie. Dans la gamme 10 – 150 keV les effets photoélectrique et Compton sont prépondérants. Au delà de 150 keV les différents tissus atténuent les rayons de la même manière et la distinction entre deux tissus à cette énergie n’est donc pas faisable. Ces RX sont donc inutiles et ne font qu’irradier le patient. La production de paires est présente pour des énergies > 1 MeV, hors gamme de la tomodensitométrie. Les effets photoélectrique et Compton sont détaillés dans la suite et illustrés sur la figure I.6.

L’effet photoélectrique est le principal effet d’atténuation des RX par la matière en tomodensitométrie. Cet effet se produit lorsqu’un photon X incident arrive et interagit avec une couche atomique. Si l’énergie du photon incident est plus grande que l’énergie de liaison de l’électron (énergie minimum pour arracher un électron à sa couche électronique), le photon X est totalement absorbé tandis que l’électron est éjecté. La couche atomique devenue non pleine va être remplie. Par effet de cascade (une couche supérieure va devenir non pleine, et

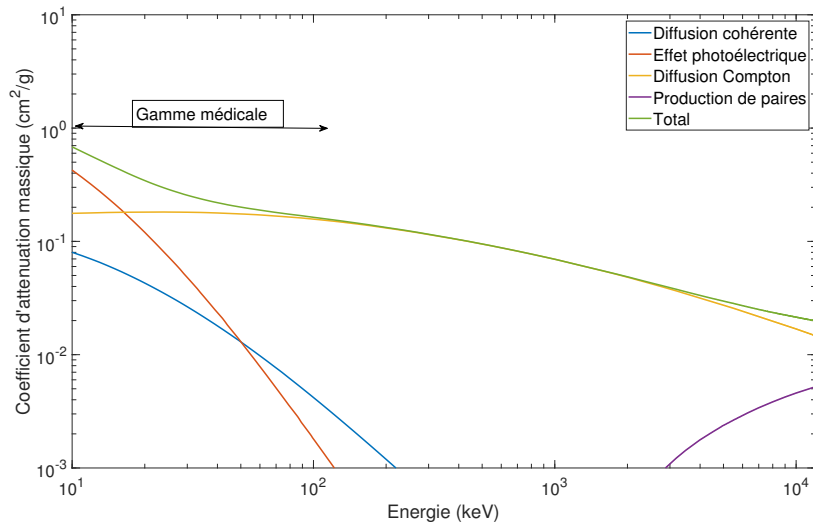


FIGURE I.5 – Prépondérance des différents effets d’atténuation en fonction de l’énergie pour des tissus mous. Données à partir du logiciel SpekCalc de Poludniowski *et al.* (2009).

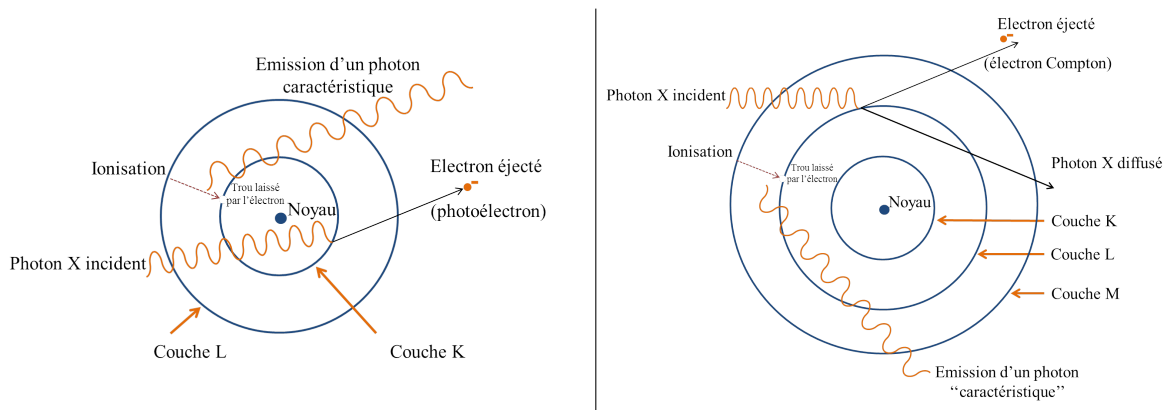


FIGURE I.6 – Effet photoélectrique (gauche) et effet Compton (droite).

ainsi de suite) il y aura une émission de photons caractéristique de l’atome par fluorescence ou émission d’électrons Auger. L’énergie des photons caractéristiques est faible, ils n’arriveront pas à sortir du corps du patient pour être détectés. Cet effet est responsable de l’atténuation du rayonnement X par absorption de certains des photons. La probabilité d’absorption augmente très fortement avec le numéro atomique. Ainsi, les os composés à $\sim 20\%$ de calcium ($Z = 20$) auront plus de chances d’absorber les RX que les tissus mous qui sont composés à $\sim 80\%$ d’oxygène ($Z = 8$).

L’effet Compton, ou diffusion incohérente, est le résultat de la collision d’un photon X et d’un électron d’une couche électronique faiblement liée. Un électron va, comme pour l’effet photoélectrique, être éjecté. Cependant, un photon X va être diffusé dans une autre direction.

L’effet Compton est responsable de la présence de bruit sur les images. Ce bruit vient du fait que les photons n’arriveront pas dans la direction source-détecteur, ce qui créera un biais lors de la reconstruction tomographique, car cette direction inaltérée est une hypothèse de la formation d’image. Contrairement à l’effet photoélectrique, il ne dépend pas du numéro ato-

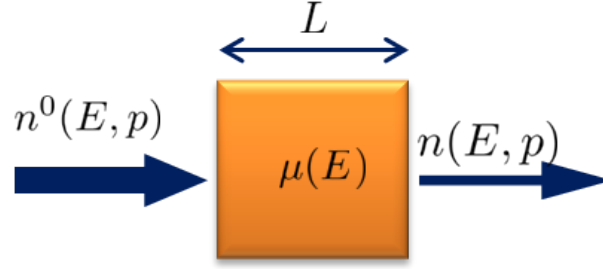


FIGURE I.7 – Schéma de l'atténuation du rayonnement X dans un objet homogène de coefficient d'atténuation linéique $\mu(E)$.

mique, mais sa probabilité diminue en même temps que l'énergie des RX augmente.

Les effets photoélectrique et Compton sont responsables de l'atténuation des RX lorsqu'ils traversent de la matière. En considérant un objet homogène de coefficient d'atténuation linéique (CAL) μ spatialement constant (la généralisation de ce cas très particulier sera décrite par la suite) et en notant $n^0(E, p)$ le nombre de photons à la sortie du tube à RX à une énergie E en direction du pixel p du détecteur, nous pouvons écrire la fraction de photons absorbés :

$$\frac{n(E, p) - n^0(E, p)}{n^0(E, p)} = -\mu(E)dL \quad (\text{I.1})$$

avec $n(E, p)$ le nombre de photons à la sortie de l'objet à l'énergie E pour ce pixel, $\mu(E)$ (en cm^{-1}) est le CAL de l'objet à l'énergie E et L est la longueur de cet objet.

En résolvant cette équation différentielle, nous trouvons la loi de Beer-Lambert qui décrit l'atténuation des ondes électromagnétiques à travers un milieu homogène d'épaisseur L :

$$n(E, p) = n^0(E, p) \exp(-\mu(E)L) \quad (\text{I.2})$$

I.4 Formation de l'image

I.4.1 TDM classique

Historiquement, les RX étaient détectés par un film composé d'un matériau devenant opaque à l'exposition du rayonnement (typiquement de l'halogénure d'argent). Au début des années 1990 le développement des détecteurs à panneaux plats a permis d'avoir des images sans pour autant devoir développer les films. De plus, ces détecteurs étant numériques, cela a permis d'utiliser les outils numériques du traitement de l'image. Ils ont également permis une diminution de la dose. En effet, ces détecteurs ont une meilleure efficacité quantique de détection que les films. Celle-ci correspond au rapport entre le nombre de photons incidents et celui de charges électroniques collectées. Nous pouvons distinguer les panneaux à conversion indirecte et directe (Kalender (2006)). Les premiers dénombrent des photons-électrons générés par les photons X incidents (conversion indirecte) et les seconds ont la capacité de capter et quantifier les photons X directement.

La conversion indirecte utilise un scintillateur composé la plupart du temps d'iodure de césium dopé au thallium (CsI(Tl)), qui convertit les photons X incidents. Ceux-ci interagissent

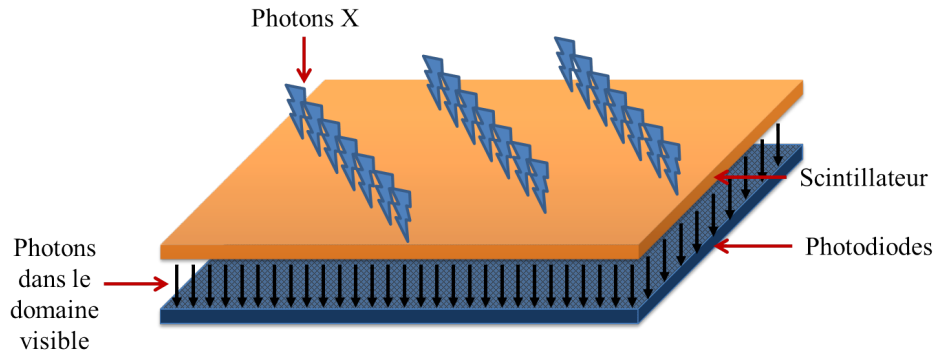


FIGURE I.8 – Schéma d'un détecteur de rayons X par conversion indirecte des photons X.

majoritairement par effet photoélectrique. Comme vu précédemment, cette interaction ionise des électrons atomiques qui génèrent d'électrons-trous qui vont exciter des niveaux atomiques des ions thallium en se recombinant. La relaxation des niveaux excités va émettre des photons dans le domaine du visible par effet de fluorescence. Ces derniers peuvent être détectés par des photo-diodes, comme décrit sur la figure I.8.

La conversion directe convertit les photons X en charges électriques (électrons ou trous) qui seront collectées. Les photons X interagissent avec une couche de semi-conducteur (dont le plus répandu est composé de sélénium amorphe), créant des paires électron-trou. Les électrons ou les ions positifs (trous) ainsi libérés sont accélérés par un champ électrique pour être collectés.

Ces principes décrivent le type de conversion pour un pixel d'un détecteur. Un détecteur linéaire peut être créé en constituant une ligne avec différents pixels. Cette acquisition 1D permet en TDM de reconstruire une coupe. Une matrice peut également être formée pour faire de l'imagerie multi-coupes. Il y aura cependant un effet limitant le nombre d'images qu'un détecteur peut former. Cet effet dépend de la période de fluorescence des matériaux. Il faut qu'entre chaque acquisition le détecteur soit au repos pour pouvoir accepter de nouveaux photons X.

I.4.2 TDM spectrale

En TDM, le spectre transmis est collecté par des détecteurs de RX qui intègrent le spectre atténué. En TDMS, il est possible d'acquérir deux spectres à différentes énergies ou d'utiliser un seul spectre d'énergie et de le subdiviser en plages d'énergies. Les données spectrales peuvent être acquises de plusieurs manières :

- i double sources ;
- ii changement de kVp (tension du tube à RX) ;
- iii détecteurs en couches ;
- iv filtrage du spectre ;
- v détecteurs à comptage de photons.

Les quatre premières méthodes sont généralement utilisées pour acquérir des données en bi-énergie, c'est-à-dire avec deux spectres (un à haute et un à basse énergie), ou deux plages

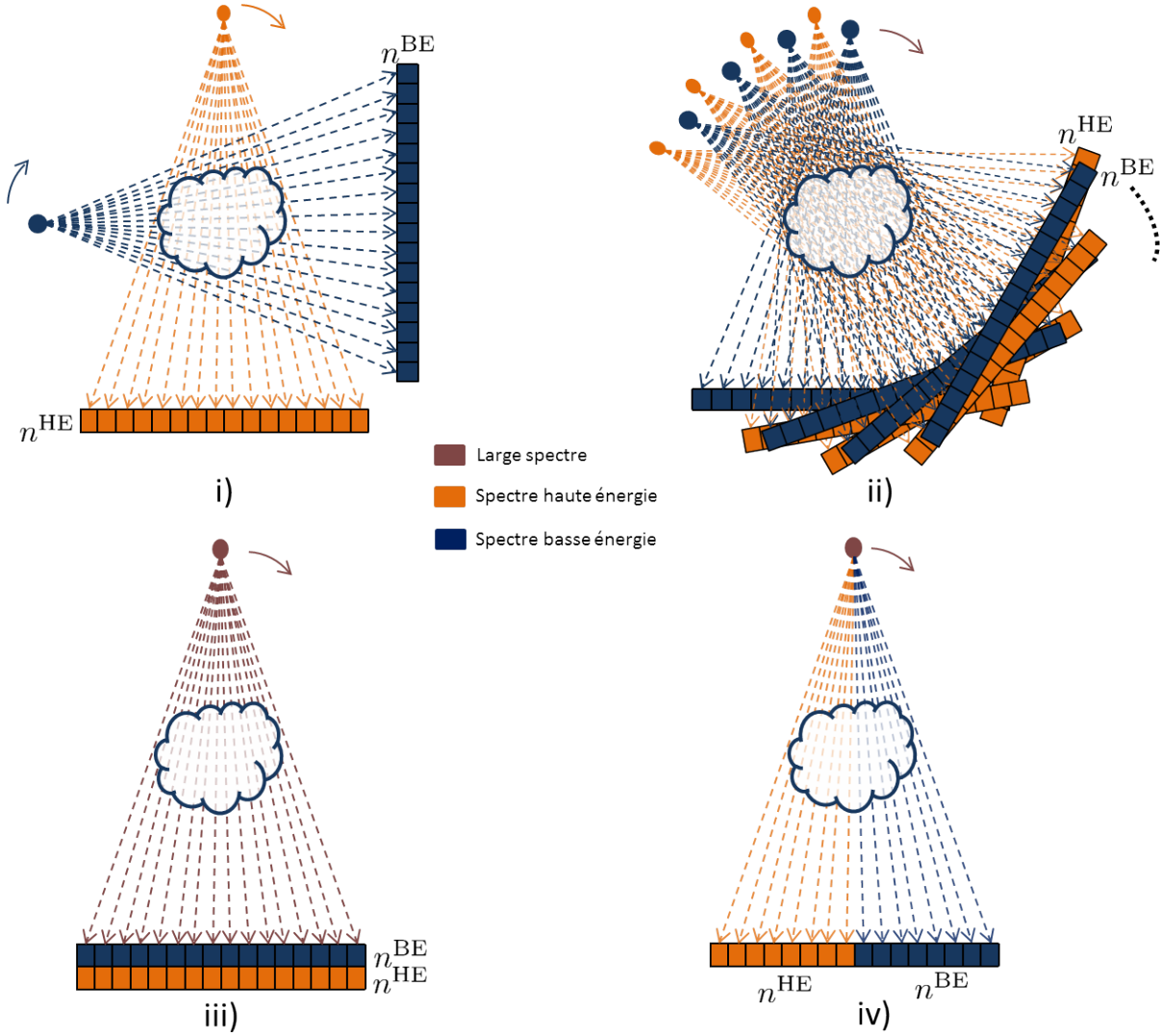


FIGURE I.9 – Différentes approches possibles pour l'imagerie spectrale. Avec : i) double sources, ii) changement de kVp, iii) détecteurs en couches et iv) filtrage du spectre.

d'énergies. Elles sont représentées sur la figure I.9. Les détecteurs à comptage de photons ont quant à eux une plus grande flexibilité dans le choix du nombre de plages d'énergies acquises. Nous détaillons les différentes méthodes, les trois premières se situant au niveau du tube à RX, les suivantes se faisant sur le détecteur.

Les doubles sources reposent sur l'acquisition simultanée du même objet par plusieurs sources (Petersilka *et al.* (2008)) (Fig. I.9, i)). Chaque source a une tension d'accélération différente, changeant l'énergie maximale des photons sortants. En effectuant une rotation autour du patient, nous obtenons un sinogramme par spectre, *i.e.* un à haute et l'autre à basse énergie. Cette méthode a été l'une des premières utilisées (Genant *et Boyd* (1977)), mais elle double la dose reçue par le patient et des artefacts de mouvement peuvent apparaître. En effet, comme les sources sont généralement positionnées à 90° l'une de l'autre, pour un angle donné, le patient peut facilement bouger entre le passage de chaque source (Johnson *et al.* (2007)). L'angle entre les sources est grand pour réduire le nombre de photons X diffusés vers le détecteur de l'autre

source.

Le changement de kVp a pour but de pallier au problème des artefacts de mouvement en modifiant l'énergie du spectre très rapidement (*Kalender et al. (1986)*) (Fig. I.9, ii)). La source tourne autour du patient et pour chaque projection la tension va être modifiée. Ainsi, en considérant deux spectres, une projection sur deux est à basse énergie et les autres sont à haute énergie. Cette technique supprime les artefacts de mouvement (*Silva et al. (2011)*). Elle a cependant comme inconvénient d'être plus lente par rapport aux doubles sources.

Le filtrage du spectre consiste à placer un filtre à la sortie du tube à RX (*Almeida et al. (2017)*) (Fig. I.9, iv)) afin de modeler le spectre d'énergie du faisceau en deux parties distinctes. D'un côté du faisceau, les hautes énergies vont être bloquées, tandis que de l'autre ce sont les basses énergies qui vont être absorbées grâce à l'utilisation d'un filtre composé par exemple d'or d'un côté et d'étain de l'autre. Le détecteur aura une moitié d'image correspondante au spectre à basse énergie et l'autre moitié à haute énergie. Cette méthode est facile à mettre en place (il suffit de changer le filtre), mais n'est pas facilement généralisable à plus de deux spectres. Un autre inconvénient de cette méthode est que seule une moitié de l'objet est acquise pendant l'acquisition. Il est donc nécessaire d'effectuer une autre prise d'image pour compléter les images.

Les détecteurs en couches sont des détecteurs contenant plusieurs matériaux (scintillateurs) qui convertissent ou non les photons X incidents en fonction de leur énergie (*Vlassenbroek (2011)*) (Fig. I.9, iii)). Chaque scintillateur va créer une image pour une plage d'énergie correspondant à celle où il répond le plus efficacement. Cette méthode est assez simple à mettre en place et est intéressante, car seul le détecteur change. Cependant, il est difficile d'obtenir plus de deux spectres. En augmentant les couches (et donc le nombre de plages d'énergies), les premières couches vont absorber une partie du spectre des détecteurs qui sont placés en dessous, limitant le nombre de couches possibles. De plus, les matériaux composants les détecteurs ne doivent absorber qu'une partie du spectre et laisser passer le reste, ils doivent donc être complémentaires. Cependant, le choix de ces matériaux est limité. Ainsi, il est difficile d'avoir un grand nombre de plages d'énergies avec cette méthode.

L'acquisition de plusieurs plages d'énergies avec les techniques précédentes présente beaucoup d'inconvénients. Les doubles sources ou le changement de kVp vont induire une forte dose, tandis que le filtrage de spectre n'est pas pratique car il divise à chaque fois l'image détectée en deux côtés (gauche et droite). Les problèmes liés aux détecteurs en couches ont été discutés. Une nouvelle technologie a été développée récemment (années ~ 2000) et permet quant à elle d'obtenir beaucoup plus de plages d'énergie.

Les détecteurs à comptage de photons (DCP) sont capables de compter les photons arrivant dans une certaine plage d'énergie (*Taguchi et Iwanczyk (2013)*). Ils s'inspirent de la conversion directe des photons décrite précédemment (I.3), sauf que les circuits récupérant le nuage d'électron fonctionnent en mode comptage (*Cassol Brunner et al. (2012)*). Un photon X incident interagit avec un cristal, créant un nuage électronique qui va migrer vers un circuit qui va convertir cette charge électrique en signal. Chaque circuit a un ou plusieurs seuils, qui vont permettre de classer les photons X incidents dans des plages d'énergies. Ainsi ces détecteurs ont la capacité d'acquérir jusqu'à 32 plages d'énergies pour certains modèles (*Xu*

et al. (2013)). Idéalement, le phénomène d'ionisation du semiconducteur est proportionnel à l'énergie du photon incident. Mais en réalité plusieurs phénomènes physiques intrinsèques à la conversion directe interviennent :

- i) partage de charge ;
- ii) empilement (ou *pile-up*) ;
- iii) mauvaise détection ;
- iv) interaction photoélectrique.

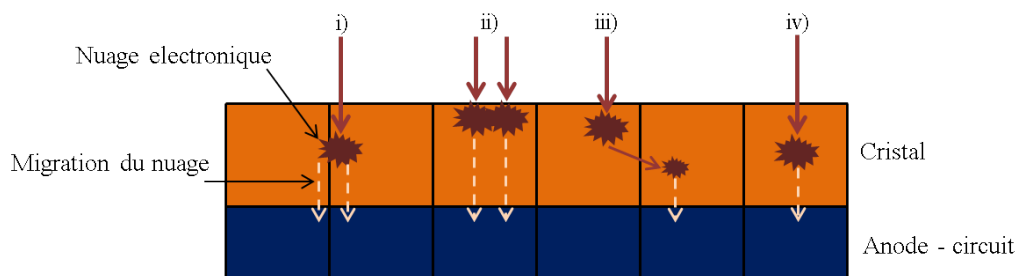


FIGURE I.10 – Différentes interactions présentes dans un DCP : i) partage de charge, ii) empilement (ou *pile-up*), iii) mauvaise détection et iv) interaction photoélectrique.

Les différentes interactions sont décrites sur la figure I.10. Le partage de charge s'effectue quand un photon X incident interagit avec le cristal à la bordure du pixel. Une fraction du nuage électronique est collecté par le pixel adjacent, ce qui peut induire soit une absence de déclenchement du seuil dans le pixel ou un déclenchement à double par le pixel et son voisin suivant que l'énergie du photon incident est faiblement, respectivement largement, supérieure à celle du seuil. Lorsque les pixels sont petits ($< 50 \mu\text{m}$), le partage de charge peut avoir lieu entre plusieurs pixels, ce qui nécessite un traitement spécifique a par l'électronique d'acquisition du détecteurs à comptage de photons (i). L'empilement (ou *pile-up*) s'effectue lorsque des nuages électroniques, générés par plusieurs photons X incident, sont détectés simultanément par le même pixel. La détection sera faussée car cela correspondra à plusieurs photons X et non pas aux individuels. Si le photon X incident interagit par effet Compton, le photon diffusé peut s'échapper du pixel. De plus, dans les semiconducteurs à haute densité (CdTe, CZT), il est possible que des photons X de fluorescence s'échappent du pixel. C'est le cas pour les photons des raies K_α du Cd (27 keV) et du Te (23 keV) lorsque l'énergie des photons X incidents est supérieure aux K-egdes du Cd et du Te. Dans ces deux cas d'échappement, il en résulte une mauvaise détection peut ainsi être effectuée (iii). Le photon généré dans le cristal sera diffusé et détecté par un pixel adjacent. Enfin, l'interaction prépondérante est l'effet photoélectrique (iv), le photon X incident interagit avec le cristal créant un nuage électronique qui sera complètement détecté par le circuit. La détection est donc directement proportionnelle à l'énergie du photon X incident.

I.5 Reconstruction tomographique

Les détecteurs précédemment présentés nous permettent d'acquérir le spectre atténué par le patient. En TDM, le signal acquis est appelé projection. Cette acquisition peut être effectuée

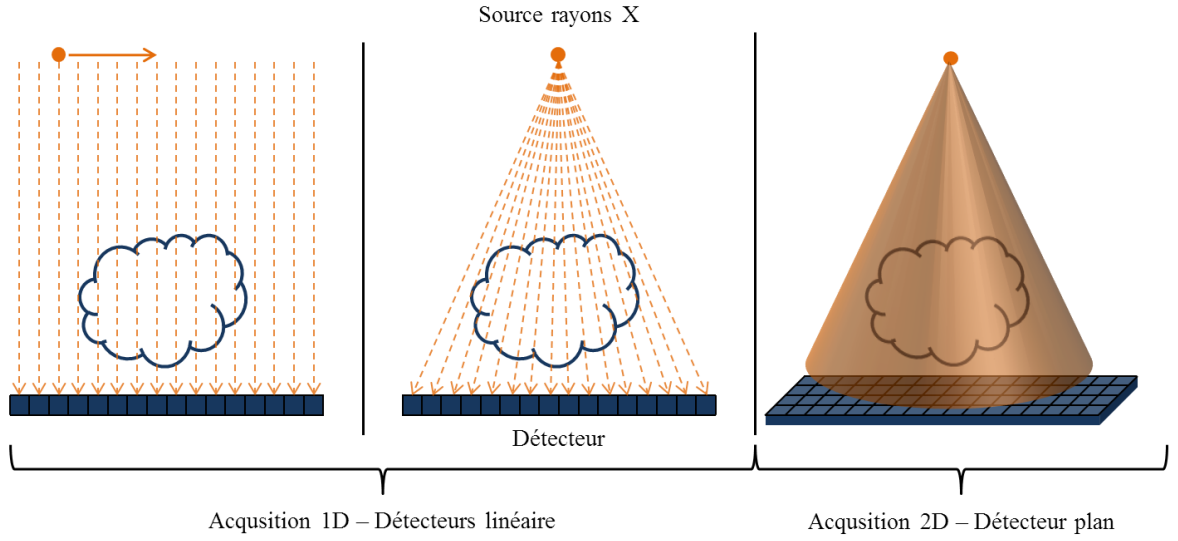


FIGURE I.11 – Schéma des différents types de faisceau : parallèle 2D (gauche), en éventail 2D (milieu) et conique 3D (à droite).

en utilisant plusieurs type de faisceau. Sur la figure I.11, nous montrons différentes géométries : parallèle, en éventail ou conique. Dans les deux premiers cas, les détecteurs sont linéaires, l'acquisition est 1D et la reconstruction 2D. Dans le dernier cas, celui de la géométrie conique, nous avons un signal 2D (détecteur plan) qui peut être reconstruit comme un objet 3D. La projection au pixel de détection p est notée $s^\theta(p)$, où θ est l'angle d'acquisition formé entre un axe de référence du scanner et l'axe source-détecteur. Nous pouvons également définir (utile pour la suite) la distance t entre un rayon X et l'origine du repère du scanner (voir figure I.12). La projection peut s'exprimer mathématiquement comme l'intégrale du spectre d'énergie atténué détecté par chaque pixel p du détecteur :

$$s^\theta(p) = \int_{\mathbb{R}} n^\theta(E, p) dE \quad (\text{I.3})$$

où $n^\theta(E, p)$ est le spectre d'énergies atténué arrivant au pixel p pour l'angle θ . En réalisant plusieurs acquisitions autour du patient nous pouvons reconstruire une coupe dans le cas où le détecteur est linéaire et un volume lorsqu'il est plan. Ce passage entre les projections (1D ou 2D) et ce qui a été imagé (2D ou 3D) s'appelle la reconstruction tomographique. Nous détaillerons donc la transformation de Radon et le théorème de la coupe centrale qui sont à la base des méthodes des reconstruction 2D, puis les méthodes classiques pour reconstruire l'objet imagé.

I.5.1 Transformation de Radon

Notons $g(x, y, z)$ un objet 3D, où le triplet (x, y, z) définit un point dans l'espace, et $f(x, y)$ une coupe 2D pour z fixé. La projection $s^\theta(p)$ est donnée par la transformée de Radon (voir Fig. I.12). Nous paramétrons la position du pixel p en fonction de la distance t , telle que la transformée est la suivante

$$s^\theta(t) = \int_{\mathcal{L}} f(x, y) d\ell \quad (\text{I.4})$$

où ℓ désigne l'abscisse curviligne le long de la droite \mathcal{L} . Nous pouvons également écrire l'équation de la droite que forme t , telle que $t = x \cos(\theta) + y \sin(\theta)$ et δ la distribution de Dirac, nous avons :

$$s^\theta(t) = \int \int_{\mathbb{R}^2} f(x, y) \delta(x \cos(\theta) + y \sin(\theta) - t) dx dy \quad (\text{I.5})$$

La suite présentera les méthodes analytiques qui sont utilisées pour reconstruire la coupe

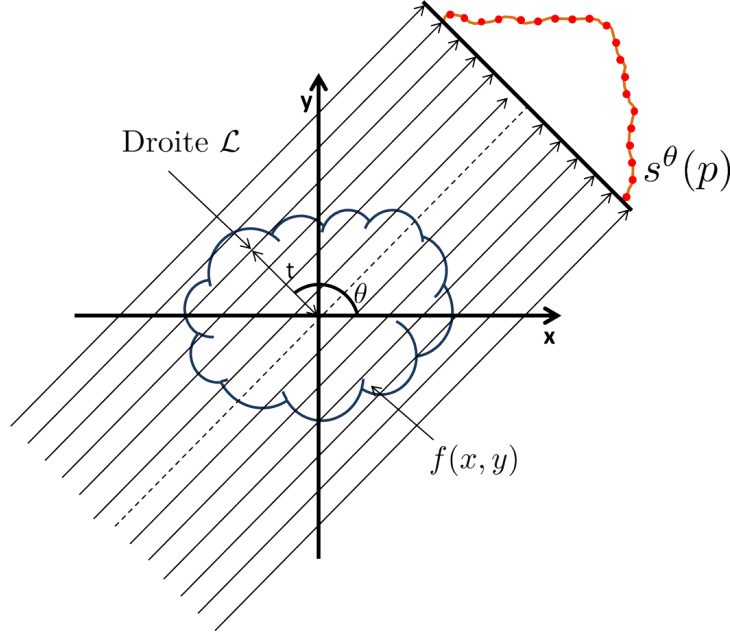


FIGURE I.12 – Projection d'un objet sur un détecteur en TDM.

$f(x, y)$ à partir des projections $s_\theta(t)$. Cependant, des méthodes itératives existent également comme par exemple ART, SART (Kak *et al.* (2002); Beister *et al.* (2012)). Comme montré par Desai *et al.* (2010), où des méthodes analytiques et itératives sont comparées, ART permet souvent une meilleure reconstruction que les méthodes analytiques. Cependant, nous développerons ici seulement les méthodes analytiques, qui sont très classiques.

I.5.2 Faisceau parallèle 2D

Nous nous intéresserons ici au faisceau dit parallèle 2D. Les rayons émis par la source sont parallèles entre eux, comme montré Fig. I.12. Le théorème de la coupe centrale (Radon, Bracewell (1956)) est important, car c'est le théorème qui pose les bases de la reconstruction tomographique, les méthodes analytiques utilisant de près ou de loin ce principe.

Le théorème de la coupe centrale vient de la relation entre la transformée de Radon et celle de Fourier. Ainsi, en notant $F(u, v)$ et $S^\theta(q)$ les transformées de Fourier de $f(x, y)$ et $s_\theta(t)$, respectivement, nous avons :

$$F(u, v) = \int \int_{\mathbb{R}^2} f(x, y) \exp(-2\pi j(ux + vy)) dx dy \quad (\text{I.6})$$

$$S^\theta(q) = \int_{\mathbb{R}} s^\theta(t) \exp(-2\pi jqt) dt \quad (\text{I.7})$$

En utilisant un point particulier, $v = 0$, nous avons :

$$F(u, 0) = \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} f(x, y) dy \right] \exp(-2\pi j u x) dx \quad (\text{I.8})$$

nous pouvons nous rendre compte que cela est égal à la transformée de Fourier de la projection pour $\theta = 0$, ($S^{\theta=0}(q)$). Cette remarque est généralisable pour tous les angles θ . En passant en coordonnées polaires nous avons la relation suivante :

$$S^{\theta}(q) = F(q \cos(\theta), q \sin(\theta)) \quad (\text{I.9})$$

Il est donc facile de connaître la transformée de Fourier de l'objet, et donc de la retrouver par transformée inverse. L'espace de Fourier de $F(u, v)$ sera rempli comme sur le schéma de la figure I.13. À partir de l'équation (I.9) nous pouvons voir que pour reconstruire complètement la transformée de Fourier de $f(x, y)$ nous avons seulement besoin de $\theta \in [0, \pi)$ (cette condition est vraie uniquement pour des faisceaux parallèles).

Dans la réalité, c'est-à-dire en discrétisant l'équation (I.9), plusieurs problèmes interviennent. Les basses fréquences sont plus représentées que les hautes fréquences. De plus, il se peut quand certaines d'entre elles ne soient pas calculées, il y aura donc besoin de faire une interpolation pour combler l'espace. Enfin, une petite erreur dans le domaine de Fourier aura un impact sur la coupe reconstruite en créant des artefacts de stries.

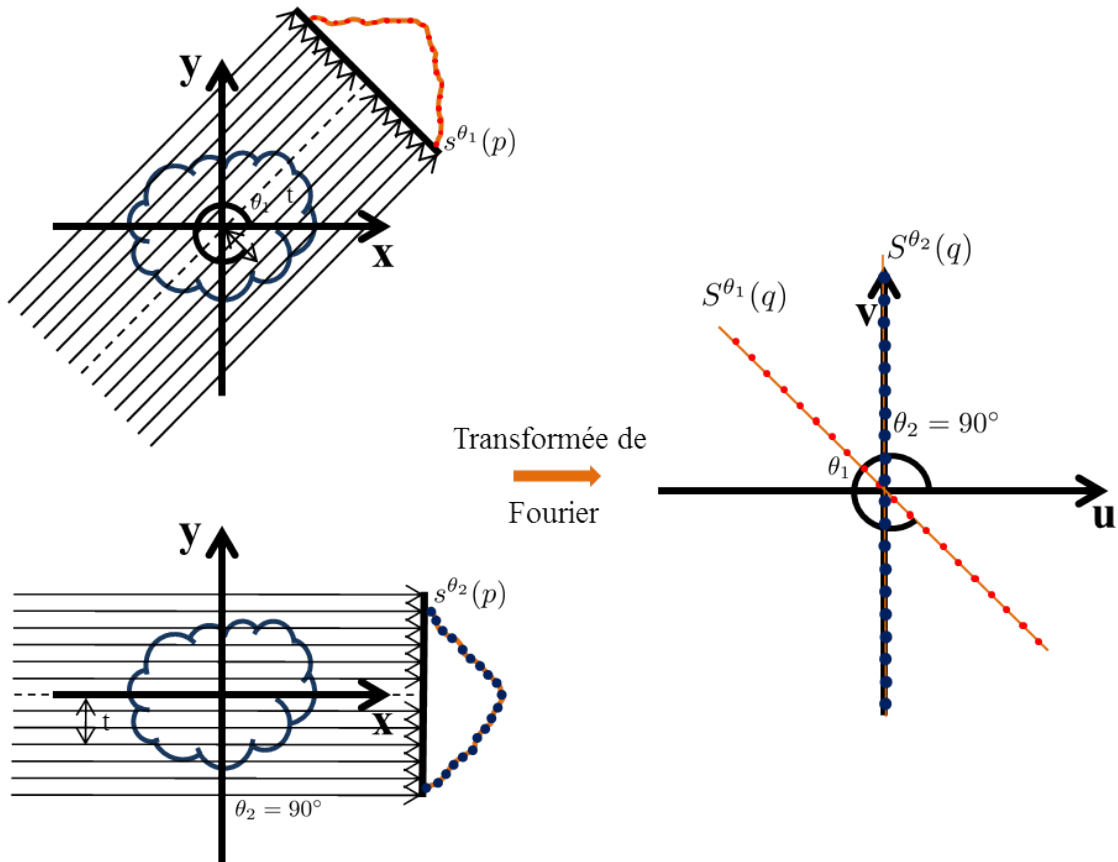


FIGURE I.13 – Schéma du théorème de la coupe centrale. Deux projections sont acquises aux angles θ_1 et θ_2 . Leurs transformées de Fourier remplissent l'espace de Fourier à droite.

La rétro-projection filtrée est la méthode qui va pallier ces problèmes. En partant de la formulation de la transformée de Fourier inverse :

$$f(x, y) = \int \int_{\mathbb{R}^2} F(u, v) \exp(2\pi j(ux + vy)) du dv \quad (\text{I.10})$$

et en passant aux coordonnées polaires nous avons

$$f(x, y) = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty F(q \cos(\theta), q \sin(\theta)) \exp(2\pi j q (\cos(\theta)x + \sin(\theta)y)) q dq d\theta \quad (\text{I.11})$$

En utilisant (I.9) nous avons :

$$\begin{aligned} f(x, y) &= \int_0^\pi \int_0^\infty S^\theta(q) \exp(2\pi j q (\cos(\theta)x + \sin(\theta)y)) q dq d\theta \\ &\quad + \int_0^\pi \int_0^\infty S^{\theta+\pi}(q) \exp(2\pi j q (\cos(\theta + \pi)x + \sin(\theta + \pi)y)) q dq d\theta \end{aligned} \quad (\text{I.12})$$

Or en faisceau parallèle $S^{\theta+\pi}(q) = S^\theta(-q)$. Nous avons finalement :

$$f(x, y) = \int_0^\pi \int_{-\infty}^\infty S^\theta(q) \exp(2\pi j q (\cos(\theta)x + \sin(\theta)y)) |q| dq d\theta \quad (\text{I.13})$$

L'intégrale interne est la transformée de Fourier inverse des projections filtrée dans le domaine fréquentiel par le filtre rampe $|q|$, ce qui permet de diminuer le poids des basses fréquences et d'accentuer celui des hautes fréquences. La qualité de la reconstruction par rétro-projection filtrée augmente avec le nombre d'angles, étant donné que plus de lignes vont être comblées dans l'espace de Fourier.

La figure I.14 montre un objet numérique (à gauche) qui va être reconstruit à partir de projections bruitées par un bruit Gaussien. Les reconstructions sont faites à partir de 18, 45 et 180 projections (de gauche à droite) à des angles espacés régulièrement entre $[0, \pi]$. Nous pouvons voir qu'en augmentant le nombre de projections, la qualité est meilleure. Cela vient du fait que l'espace de Fourier de $F(u, v)$ sera le plus rempli lorsqu'il y aura un plus grand nombre d'angles. Les vides laissés dans l'espace de Fourier créent ces artefacts en étoile lors de la reconstruction.

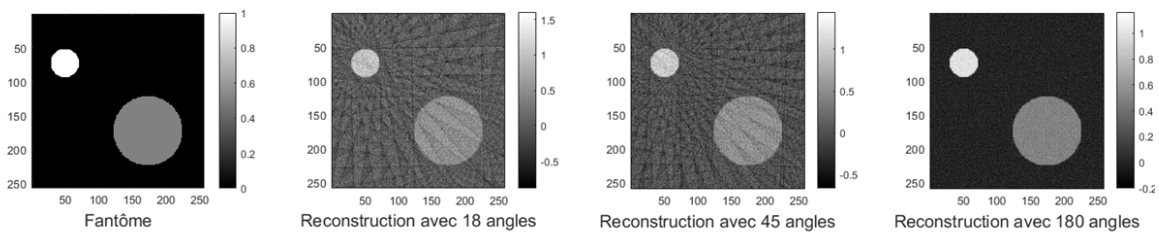


FIGURE I.14 – Exemples rétro-projection filtrée avec un filtre rampe. À gauche fantôme composé de deux cercles de valeur 1 et 0.5, puis de gauche à droite : reconstruction à partir de 18, 45 et 180 projections bruitées par un bruit Gaussien.

I.5.3 Faisceau en éventail 2D

La géométrie parallèle n'est pas la seule utilisée pour l'imagerie médicale. Les faisceaux en éventail sont plus simples techniquement, car la forme naturelle en sortie du tube à RX

est en éventail et permettent un gain de temps conséquent sur l'acquisition. Les méthodes (analytiques) de reconstruction tomographique reposent tout de même sur les mêmes principes énoncés dans la partie précédente. En plus d'une nouvelle géométrie de faisceau, deux types de détecteurs peuvent être utilisés : équidistant (chaque élément est à la même distance de la source) ou équiangulaire (angle constant entre deux faisceaux pour des pixels voisins). Dans le premier cas, le détecteur est circulaire, dans l'autre il est plat. Des méthodes ont été développées pour intégrer la géométrie du faisceau et la forme du détecteur aux méthodes décrites précédemment (You *et al.* (2005)). Il est également possible de changer d'espace pour revenir à des faisceaux parallèles et appliquer ces méthodes, ce qui est décrit en détail par Hsieh *et al.* (2009).

I.6 Décompositions dans une base

Nous allons maintenant nous intéresser à la spécificité de la TDMS. Les données spectrales apportent une information supplémentaire quant à la nature de l'objet. Alvarez *et Macovski* (1976) décrivent le principe de décomposition des données dans une certaine base. Cette base $\tau_m(E)$ peut décrire par exemple l'importance d'un phénomène physique ou l'atténuation d'un matériau particulier, à une énergie précise E . Cette fonction d'atténuation se retrouve dans la modélisation du CAL, comme étant :

$$\mu(\mathbf{x}, E) = \sum_m \rho_m(\mathbf{x}) \tau_m(E) \quad (\text{I.14})$$

où $\mu(\mathbf{x}, E)$ est le CAL à l'énergie E pour le voxel \mathbf{x} de l'objet, $\rho_m(\mathbf{x})$ la densité volumique associée à la base m et $\tau_m(E)$ la fonction de base de l'élément m . Cette modélisation peut donc être réinjectée dans l'équation (I.2) de Beer-Lambert. La reconstruction des données en TDMS consistera à retrouver la valeur des coefficients $\rho_m(\mathbf{x})$ dans le volume à partir des projections spectrales ou plus généralement du CAL $\mu(\mathbf{x}, E)$ (Long *et Fessler* (2014)).

Pour cela, nous devons également modéliser la détection des photons X avec un DCP. Du fait des interactions décrites précédemment, un photon X incident à une énergie E peut être détecté à une mauvaise énergie. Notons $d(\zeta, E)$ la probabilité que ce photon arrivant à l'énergie ζ soit détecté à l'énergie E . Le nombre de photons d'énergie E détectés dans la i -ème plage d'énergies comprise entre $[\zeta_i, \zeta_{i+1}]$ est :

$$d_i(E) = \int_{\zeta_i}^{\zeta_{i+1}} d(\zeta, E) d\zeta \quad (\text{I.15})$$

où $d_i(E)$ est la réponse du détecteur pour la plage i . La figure I.15 montre un exemple de cette réponse pour quatre plages d'énergies. L'équation (I.3) devient donc :

$$s_i(p) = \int_{\mathbb{R}} d_i(E) n(E, p) dE \quad (\text{I.16})$$

où $s_i(p)$ est le nombre de photons comptés dans la plage d'énergie i pour le pixel p du détecteur. En remplaçant (I.2) et (I.14) dans (I.16), nous avons l'équation de la formation de l'image en TDMS :

$$s_i(p) = \int_{\mathbb{R}} d_i(E) n^0(E) \exp\left(-\sum_m a_m(p) \tau_m(E)\right) dE \quad (\text{I.17})$$

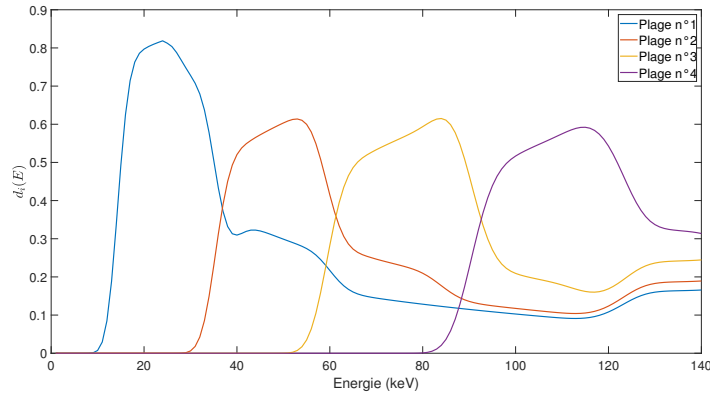


FIGURE I.15 – Réponse d'un détecteur à comptage de photons avec quatre plages d'énergies : 15 – 35, 36 – 59, 60 – 90 et 91 – 140 keV, calculée à partir des travaux de [Schlomka et al. \(2008\)](#).

où

$$a_m^\theta(p) = \int_{\mathcal{L}} \rho_m(\mathbf{x}) d\ell \quad (\text{I.18})$$

est la projection de $\rho_m(\mathbf{x})$ sur le détecteur au pixel p le long du trajet \mathcal{L} du RX à l'angle d'acquisition θ .

Il est possible de faire une décomposition dans différentes bases : effet Compton et photoélectrique ou de matériaux. À partir de ces dernières nous pouvons également obtenir des images mono-énergétiques.

I.6.1 Base Compton-photoélectrique

L'atténuation des photons X dans la matière provient principalement des effets photoélectriques et Compton. [Alvarez et Macovski \(1976\)](#) ont proposés une méthode pour décomposer les données spectrales dans une base représentant ces deux effets, ce qui revient à choisir dans l'équation (I.14) les fonctions d'atténuation ([Ehn et al. \(2016\)](#)) :

$$\tau_{\text{photo}}(E) = \frac{1}{E^3} \quad (\text{I.19})$$

$$\tau_{\text{Compton}}(E) = \frac{1 + \epsilon}{\epsilon^2} \left[\frac{2(1 + \epsilon)}{1 + 2\epsilon} - \frac{1}{\epsilon} \ln(1 + 2\epsilon) \right] + \frac{1}{2\epsilon} \ln(1 + 2\epsilon) - \frac{1 + 3\epsilon}{(1 + 2\epsilon)^2} \quad (\text{I.20})$$

où $\epsilon = E/510.975$ keV. $\tau_{\text{Compton}}(E)$ est la fonction de Klein-Nishina ([Klein et Nishina \(1929\)](#)), qui décrit le comportement de la diffusion par effet Compton. Cette décomposition a été l'une des premières utilisées et l'est toujours. La décomposition est très pertinente en imagerie diagnostique, car l'image qui montre l'effet photoélectrique dépend fortement du numéro atomique efficace de l'élément à chaque voxel, et donc de sa composition ([Phelps et al. \(1975\)](#)). Tandis que l'image de l'effet Compton dépend de la densité électronique, donc de la densité massique. Ces différences sont utilisables pour différencier des cas de lésions, qui seraient difficiles à identifier en imagerie X classique.

I.6.2 Base de matériaux

Une autre manière d'écrire le CAL consiste à décrire la contribution des différents matériaux. Dans ce cas, $\tau_m(E)$ est l'atténuation linéaire du matériau m et $\rho_m(\mathbf{x})$ sa densité volumique à chaque voxel \mathbf{x} . Les fonctions d'atténuation de différents matériaux sont connues. Il est donc possible de décomposer les données spectrales dans une base de matériaux composée des matériaux du corps humain (tissus mous, tissus adipeux, os cortical, etc.) ou de marqueurs injectés (iode, gadolinium, etc.) (Liu *et al.* (2009)). Ces différentes fonctions d'atténuation en fonction de l'énergie sont décrites sur la figure I.16. Cette décomposition est beaucoup utilisée car elle permet la quantification des matériaux, mais aussi de certains marqueurs injectés au patient lors de l'examen.

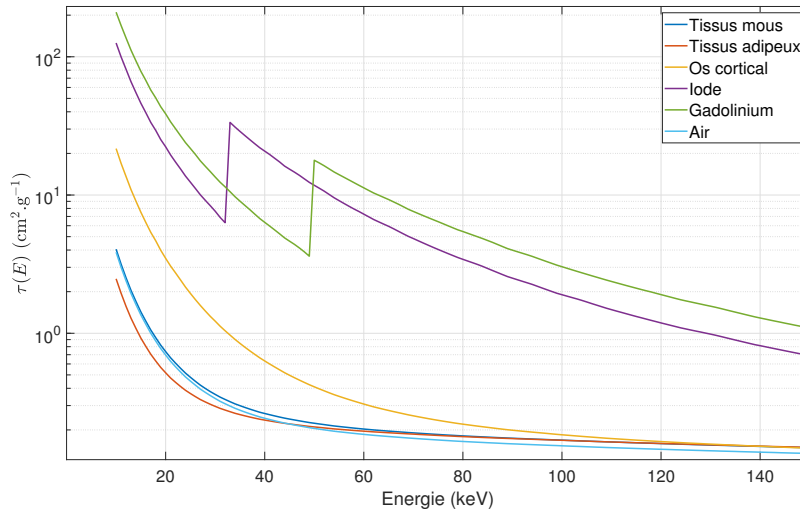


FIGURE I.16 – Exemple de différentes fonctions d'atténuation pour plusieurs matériaux : tissus mous, tissus adipeux, os cortical, iode, gadolinium et air.

I.6.3 Images mono-énergétiques

À partir des décompositions présentées précédemment, nous pouvons également avoir les images correspondantes à $\mu(\mathbf{x}, E)$ pour une énergie E donnée pour tout \mathbf{x} . Il suffit d'écrire l'équation du CAL (I.14) pour une énergie précise pour avoir cette décomposition. De manière générale, il suffit d'avoir un *a priori* sur les matériaux présents dans l'objet. Ce genre de décomposition permet d'avoir des précisions quant aux matériaux présents ou pas (Hickethier *et al.* (2017)).

I.6.4 Avantages et inconvénients des différentes bases

La décomposition des données spectrales dépend de ce que nous recherchons. Sur la figure I.17, nous montrons la décomposition dans différentes bases pour un fantôme composé de tissus mous avec des tubes d'iode. La décomposition en effet photoélectrique et Compton permet de voir la différence entre la densité des matériaux et leur nature. En effet, l'effet photoélectrique est plus important pour des matériaux plus denses alors que l'effet Compton est

plus important lorsque la densité des atomes est plus grande. C'est pour cela que les tubes d'iode sont présents sur l'image photoélectrique et non sur l'image Compton. La décomposition en matériaux permet quant à elle une quantification de la densité volumique de chaque matériau. Enfin, les images mono-énergétiques permettent de voir où sont certains matériaux dans l'image. En effet, certains matériaux possèdent un *K-edge*, comme montré dans la figure I.16 pour le gadolinium et l'iode. Ce *K-edge* est un changement d'atténuation brutal, qui correspond à l'énergie de liaison de la couche K de l'atome en question. Le *K-edge* de l'iode se situe entre 33 et 34 keV. En ce mettant de part et d'autre de cette énergie, nous pouvons voir que l'iode apparaît et peut être facilement localisée dans l'image. À noter qu'il est facile de passer d'une base à une autre.

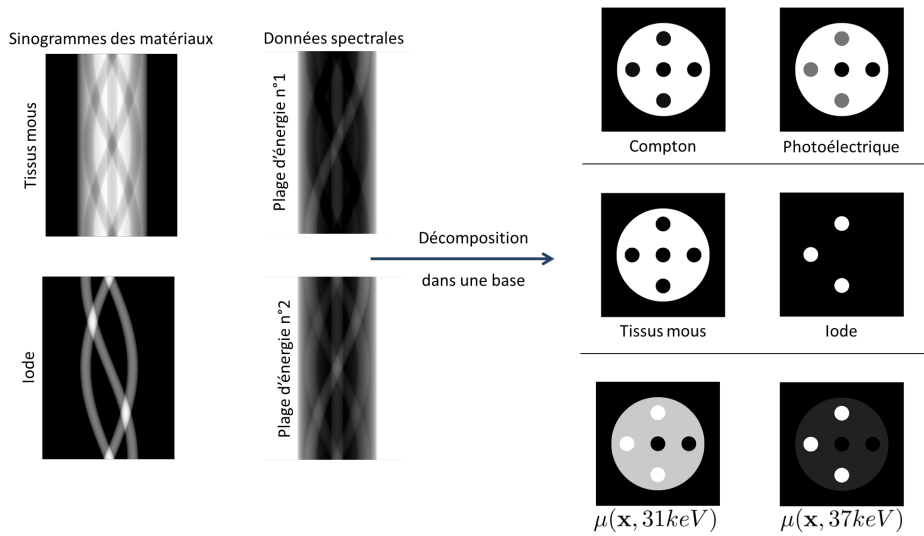


FIGURE I.17 – Décompositions dans des bases différentes d'un fantôme composé de tissus mous et de tubes d'iode. A gauche, spectre à partir de deux plages d'énergies. A droite, de haut en bas, décomposition dans une base photoélectrique-Compton, base de matériaux tissus mous / iode et images mono-énergétique à 31 et 37 keV.

I.7 Approches de reconstruction en TDMS

La reconstruction en TDMS consiste à passer des projections spectrales aux volumes composés des coefficients $\rho_m(\mathbf{x})$ ou directement au CAL $\mu(\mathbf{x}, E)$. Pour ce faire, plusieurs approches existent. Elles sont décrites dans la figure I.18 dans le cas d'une décomposition en base de matériaux (tissus mous et iode). Nous pouvons tout d'abord faire une reconstruction tomographique des données spectrales, puis les décomposer dans le domaine de l'objet. La reconstruction tomographique peut également se faire après avoir décomposé les matériaux dans le domaine des projections. Et enfin, la reconstruction tomographique et la décomposition dans une base peuvent être fait simultanément dans une approche directe.

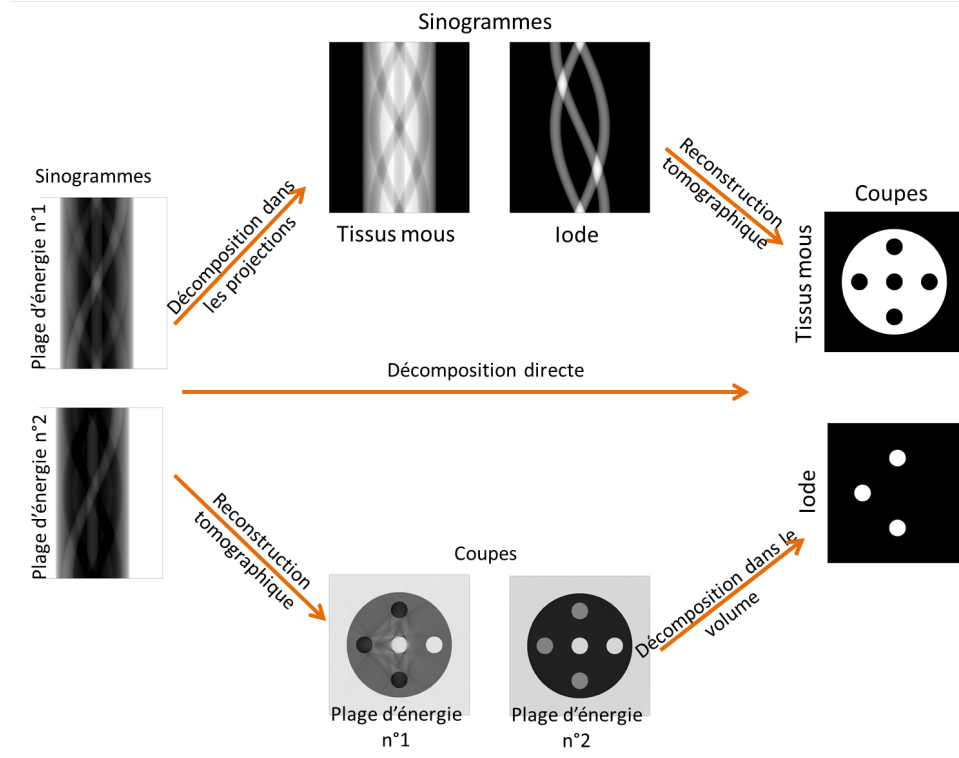


FIGURE I.18 – Différents domaines de décompositions en TDMS. De bas en haut : dans le domaine objet (sur le volume), directement et dans le domaine des projections (sur les sinogrammes).

I.7.1 Domaine objet

La décomposition dans le domaine objet (sur le volume) a été initialement développée pour des acquisitions en bi-énergie (Brooks (1977)), mais a rapidement été étendue à des cas où plus de deux spectres sont disponibles. L'idée est de premièrement faire une reconstruction tomographique sur les données acquises dans différents canaux en créant un volume par canal d'énergie.

$$s_i^\theta(p) \xrightarrow{\text{Reconstruction tomographique}} v_i(\mathbf{x}) \xrightarrow{\text{Décomposition dans une base}} \rho_m(\mathbf{x}) \text{ ou } \mu(\mathbf{x}, E)$$

À partir de ces volumes, une décomposition dans une base est effectuée. À noter que la plupart du temps la décomposition dans le domaine objet est faite pour obtenir des images mono-énergétiques, mais comme vu précédemment, le passage d'une base à une autre est faisable. Cette technique est beaucoup utilisée (Mendonça *et al.* (2010, 2014); Le *et* Molloy (2011); Maaß *et al.* (2009); Bateman *et al.* (2018)) car elle permet de formuler le problème de décomposition de manière linéaire. Avec $\mu(\mathbf{x}, E)$ les coupes reconstruites, nous avons :

$$\mu(\mathbf{x}, E) = \mathbf{T}(E)\boldsymbol{\rho}(\mathbf{x}) \quad (\text{I.21})$$

où

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{x}, E) = [\mu(\mathbf{x}, e_1), \dots, \mu(\mathbf{x}, e_J)]^T \quad (\text{I.22})$$

$$\boldsymbol{\rho}(\mathbf{x}) = [\rho_1(\mathbf{x}), \dots, \rho_M(\mathbf{x})]^T \quad (\text{I.23})$$

et

$$\mathbf{T}(E) = \begin{bmatrix} \tau_1(e_1) & \tau_2(e_1) & \dots & \tau_M(e_1) \\ \tau_1(e_2) & \tau_2(e_2) & \dots & \tau_M(e_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tau_1(e_I) & \tau_2(e_I) & \dots & \tau_M(e_I) \end{bmatrix} \quad (\text{I.24})$$

où e_i est le i -ème canal d'énergie dans le domaine discret.

Dans certains cas où il peut être admis que les spectres sont monochromatiques, typiquement dans des images synchrotron ([Torikoshi et al. \(2003\)](#)), la matrice \mathbf{T} sera constituée des fonctions d'atténuation des matériaux. Dans un cas où les spectres sont polychromatiques, la matrice peut être étalonnée par des acquisitions de matériaux connus au préalable ([Ronaldson et al. \(2012\)](#); [Clark et Badea \(2014\)](#)).

Avoir un problème linéaire permet une résolution plus simple. Plusieurs méthodes existent (décrites dans le [chapitre II](#)), qui sont connues pour leur efficacité. Cependant, [Taguchi et al. \(2018\)](#) ont montré que la décomposition dans le domaine objet est sujette aux artefacts de stries (leur étude est basée sur un cas de scanner crânien pour lesquels ils sont particulièrement présents). Mais par modification de (I.14), l'utilisation d'algorithmes adaptés contenant un modèle pour traiter ces artefacts, de bons résultats ont été obtenus ([Maaß et al. \(2009\)](#)). Ces méthodes peuvent également utiliser un *a priori* sur les images. Comme par exemple avec [Ding et al. \(2017\)](#), qui ont ajouté des termes pour obtenir des images parcimonieuses spatialement et limiter l'effet du bruit dans la décomposition.

I.7.2 Décomposition directe

La décomposition directe vise à récupérer directement $\rho_m(\mathbf{x})$ à partir des projections spectrales $s_i^\theta(p)$.

$$s_i^\theta(p) \xrightarrow[\text{décomposition dans une base}]{\text{Reconstruction tomographique et}} \rho_m(\mathbf{x}) \text{ ou } \mu(\mathbf{x}, E)$$

Cette méthode vise à résoudre simultanément le problème de décomposition de l'image en TDMS (I.17) et celui de reconstruction tomographique. En utilisant ce modèle direct et en incorporant l'opérateur de projection du voxel x au pixel de détection p à l'angle θ , $f_p^\theta(x)$, le modèle discret est ([Mechlem et al. \(2018\)](#)) :

$$s_i^\theta(p) = \sum_j d_i(e_j) n^0(e_j) \exp \left(- \sum_m \tau_m(e_j) \sum_x f_p^\theta(x) \rho_m(x) \right) \quad (\text{I.25})$$

La résolution simultanée de la décomposition spectrale et de la reconstruction permet d'avoir une meilleure gestion des artefacts. En effet, l'ensemble de l'information nécessaire est présente pour la décomposition et la reconstruction. Cela permet de réduire les effets des différents artefacts. De plus, comme précédemment, l'ajout d'un *a priori* dans le domaine objet peut être fait. Ce qui est judicieux, car cet *a priori* est facilement connu et permet une décomposition plus fidèle.

Cependant, la décomposition directe est un problème d'optimisation difficile. Elle peut être lourde à résoudre et les algorithmes ont tendance à prendre du temps pour converger. Pour réduire ces temps, des pré-conditionneurs ont été proposés. Ces fonctions visent à changer les

fonctions d'atténuation $\tau_m(E)$ pour qu'elles soient orthogonales (Mory *et al.* (2018); Sidky *et al.* (2018); Rodesch (2018)). Une base orthogonale génère des volumes différents (Barber *et al.* (2016)), car chaque base est alors une combinaison des bases initiales. Cela permettra également de réduire la diaphonie. Cet effet courant en TDMS revient à estimer $\rho_m(\mathbf{x})$ pour une base qui n'est pas correcte. Par exemple, dans une base de matériau : tissus, os et gadolinium (comme marqueur injecté), la diaphonie serait d'avoir de l'os dans l'image du gadolinium. Ce matériau n'existe pas dans cette image de gadolinium, mais va quand même y être reconstruit. Des coefficients apparaissent là où ils ne devraient pas.

I.7.3 Domaine des projections

La dernière possibilité de décomposer les données spectrales est de le faire dans le domaine des projections, puis de faire la reconstruction tomographique sur ces données.

$$s_i^\theta(p) \xrightarrow{\text{Décomposition dans une base}} a_m^\theta(p) \xrightarrow{\text{Reconstruction tomographique}} \rho_m(\mathbf{x}) \text{ ou } \mu(\mathbf{x}, E)$$

La décomposition dans le domaine des projections peut se faire en apprenant une fonction polynomiale. Les coefficients du polynôme sont appris par étalonnage (Alvarez *et Macovski* (1976); Stenner *et al.* (2007)). Elle se fait en imageant un objet de matériaux connus de différentes épaisseurs. Les données s^{calib} permettent d'apprendre une fonction polynomiale $\mathcal{F}(\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ qui modélise l'atténuation des matériaux pour cette acquisition. Avec les coefficients α_n connus, la décomposition peut se faire très rapidement. Les coefficients représentent le comportement de chaque matériau pour chaque énergie incidente. Cependant en pratique, un faible nombre de coefficients peut suffire (Potop *et al.* (2014)) ($N = 7$ en bi-énergie). Des polynômes de plus grand ordre peuvent aussi être appris par réseau de neurones (Zimmerman *et Schmidt* (2015)). La décomposition par fonction polynomiale est rapide, mais demande un étalonnage régulier. De plus, en augmentant le nombre de plages d'énergies, le nombre de coefficients augmente également, donnant lieu à des instabilités et une propagation des erreurs d'étalonnage.

Une manière de s'affranchir de la limite du nombre de plages d'énergies est de résoudre le problème inverse. Ainsi, nous cherchons $a_m^\theta(p)$ à partir des données spectrales $s_i^\theta(p)$ à chaque projection d'angle θ :

$$s_i^\theta(p) = \sum_j d_i(e_j) n^0(e_j) \exp \left(- \sum_m a_m^\theta(p) \tau_m(e_j) \right) \quad (\text{I.26})$$

Cette méthode permet de décomposer fidèlement les données spectrales, comme montré par Alvarez *et Macovski* (1976) par étalonnage. Néanmoins, cette méthode est limitée par le nombre de plages d'énergies qui peuvent être utilisées. De plus, ces travaux ont présenté une décomposition en effet photoélectrique et Compton, ce qui ne permet pas d'expliquer correctement certains matériaux (comme ceux à *K-edge*). Depuis, Schlomka *et al.* (2008) ont pu améliorer les décompositions en utilisant des détecteurs à comptage de photons avec des approches variationnelles, qui permettent l'utilisation d'un plus grand nombre de plages d'énergies. La décomposition dans le domaine des projections se distingue par sa bonne quantification des matériaux décomposés (Roessl *et Proksa* (2007)). Dans ces derniers travaux, le problème de décomposition en TDMS était posé comme un problème de minimisation d'une fonctionnelle. Ainsi, Ducros *et al.* (2017)

ont pu améliorer les décompositions (en qualité de décomposition et rapidité) en utilisant des algorithmes de minimisation d'ordres supérieurs (précédemment d'ordre 0, maintenant ordre 2). En travaillant directement sur les données, le bruit peut être mieux connu qu'avec les autres approches (Roessl *et Herrmann* (2009)). En améliorant son estimation, une meilleure décomposition peut alors être faite. Un *a priori* peut également être apporté dans le domaine des projections, qui peuvent être supposées lisses, pour lesquelles Ducros *et al.* (2017) a également présenté une régularisation spatiale.

La décomposition des projections est avantageuse, car la reconstruction tomographique est parfaitement adaptée puisque celles-ci sont spectralement indépendantes, ce qui évite l'apparition d'artefacts. Cela vient du fait que la non-linéarité de la décomposition spectrale est prise en amont de la reconstruction tomographique. Ainsi, les erreurs sur les données spectrales ne seront pas amplifiées par la reconstruction, ni prises en compte lors de la décomposition. De plus, chaque projection étant indépendante spatialement et spectralement, la décomposition des projections peut se faire en parallèle.

I.7.4 Avantages et inconvénients

Chaque manière de traiter les données spectrales permet d'obtenir un volume composé des coefficients $\rho_m(\mathbf{x})$. Cependant, elles ne sont pas équivalentes. La décomposition directe permet d'obtenir des images qui sont un peu plus fidèles par rapport aux autres méthodes, mais cette méthode a besoin de beaucoup de temps et a un fort coût informatique. Les matrices sont de taille importante et la convergence des algorithmes est lente par rapport aux autres méthodes. De plus, résoudre les deux problèmes (de décomposition et de reconstruction), peut engendrer des erreurs importantes dans le volume. La décomposition dans le domaine objet est pratique car rapide et il existe de nombreuses méthodes très bien connues pour résoudre ce genre de problème linéaire. Cependant, les erreurs spectrales sont amplifiées lors de la reconstruction tomographique (artefacts de stries notamment). En plus des méthodes de décomposition, des corrections sur la reconstruction sont nécessaires. La décomposition dans les projections permet quant à elle de limiter ces problèmes. Dans ce domaine, la décomposition dans une base peut être effectuée indépendamment des projections. Elles peuvent toutes être faites en même temps. De plus, les algorithmes récemment proposés montrent des temps de convergence satisfaisants. Même si une régularisation spatiale est plus fidèle dans le domaine objet elle a pu montrer son intérêt dans le domaine des projections en améliorant la qualité des décompositions. Elle a aussi pour avantage de ne pas introduire d'artefacts de stries comme les autres méthodes.

I.8 Applications médicales

Dans ce chapitre, nous avons montré comment se faisait l'imagerie TDMS. L'information apportée par cette nouvelle modalité permet de décomposer les images et de créer des volumes dans certaines bases. Cet ajout d'information fait de cette modalité un outil idéal pour l'imagerie diagnostique. En TDM, la quantification de la densité des matériaux peut être limitée, tandis qu'en TDMS nous pouvons avoir précisément cette information. Cela peut s'avérer très utile lors du diagnostic de l'arthrose ou de lésions de la moelle osseuse pour lesquelles la quantification

de la densité osseuse est importante (Pache *et al.* (2010)).

Nous avons également la possibilité d'utiliser de nouveaux marqueurs comportant un K -edge comme l'or, le gadolinium, l'iode, l'yttrium, etc. Ceux-ci permettent d'avoir un choix important dans l'injection et sur la fixation dans le corps. De ce fait, la détection de certaines pathologies est plus facile avec cette modalité. En ajoutant un produit de contraste (Pan *et al.* (2012)), comme l'iode par Silva *et al.* (2011) pour de l'imagerie abdominale, un apport conséquent a pu être constaté. La quantification de la masse graisseuse dans le foie pour le diagnostic stéatose hépatique (lésion du foie suite à de trop gros dépôt de gras) est cruciale et peut être faite en TDMS (Kriston *et al.* (2011); Wang *et al.* (2003)). La TDMS permet d'avoir une meilleure résolution spatiale (Kalender *et al.* (2008)) avec des DCP, ce qui rend le diagnostic de plaque chez le patient très avantageux (plaque osseuse avec Vlassenbroek (2011)).

La possible différenciation de certains tissus rend également la TDMS meilleure dans le domaine médical que pouvait l'être la TDM. Une telle décomposition en matériaux par exemple, peut permettre de diagnostiquer des maladies qui n'étaient pas visible en TDM, comme par exemple la goutte tophacée, ce qui a été montré par Desai *et al.* (2011).

I.9 Conclusion

Nous avons décrit dans ce chapitre comment les RX sont générés et la manière dont ils interagissent avec la matière. Comprendre comment le spectre transmis est modifié est primordial pour le traitement de l'image résultante, tout comme sa formation décrite par la suite. Nous avons également détaillé le principe de formation de l'image en TDMS, modalité qui permet d'acquérir des données résolues en énergie pour plusieurs spectres à différentes énergies ou pour un spectre d'énergie subdivisé en différentes plages d'énergies. Cette nouvelle dimension dans l'image peut être obtenue par différentes méthodes, mais les DCP ont depuis peu pris le dessus sur les autres. En effet, ils permettent d'obtenir simplement beaucoup de plages d'énergies sans changer le détecteur. Modifier le nombre de plages s'obtient en modifiant les valeurs des seuils de détection en énergie.

Ensuite, à partir des projections acquises sous plusieurs angles, les outils de reconstruction tomographique permettant d'obtenir une coupe 2D ou un volume 3D ont été décrits. Grâce à la discrétisation des données en énergie, il est alors possible de les décomposer dans une base : photoélectrique-Compton, matériaux ou mono-énergétique. Cette décomposition peut être effectuée de plusieurs manières : dans le domaine de l'objet après une reconstruction tomographique des données ou directement à partir des données ou dans les projections suivie d'une reconstruction tomographique pour obtenir des volumes.

Nous pouvons changer aisément de base, chacune donnant une information différente. Cependant, la méthode de traitement choisie joue beaucoup sur les artefacts ou les erreurs. Tandis que la décomposition dans le domaine objet est sujette aux artefacts de stries, la décomposition dans le domaine des projections ne présente pas de tels artefacts. Cependant, traiter la non-linéarité de la décomposition dans les projections peut être difficile. Si la décomposition dans ce domaine est correctement faite, bien la traiter permet d'améliorer la reconstruction des images spectrales.

La TDM est une modalité d'imagerie très répandue. Aujourd'hui, la taille des pixels de l'image reconstruite est de l'ordre du millimètre et nous n'avons besoin que de quelques minutes pour imager un corps entier. Cependant, cette modalité est souvent critiquée sur son aspect irradiant. Ainsi, les développements récents cherchent à extraire le plus d'information sur le patient imagé avec la même dose. Grâce à la résolution en énergie des données en TDMS, il est possible de décomposer les images dans une certaine base. La décomposition permet de nombreuses applications médicales, tout en gardant un niveau de dose équivalent à la TDM classique.

Chapitre II

Problèmes inverses

Contents

II.1	Introduction	33
II.2	Problème inverse	33
II.3	Solutions exactes	35
II.4	Algorithmes de minimisation	37
II.4.1	Méthodes de descente non contraintes	38
II.4.2	Méthodes de descente sous contraintes	42
II.5	Conclusion	44

Chapitre II

L'ACQUISITION de données spectrales en TDMS rend la décomposition dans une base possible. L'obtention des volumes décomposés se fait en posant un problème inverse. Dans ce chapitre, nous décrirons ce qu'est un problème inverse et les méthodes classiques pour le résoudre. Nous présenterons également comment obtenir une solution qui respecte des contraintes prédéfinies, leur incorporation et la résolution du problème associé.

II.1 Introduction

La tomodensitométrie spectrale conduit à différents problèmes inverses. À partir des données spectrales, nous avons vu qu'il est possible soit de i) faire une reconstruction tomographique puis de décomposer les données, ii) faire la décomposition et la reconstruction en même temps et iii) faire la décomposition dans les projections puis reconstruire les cartes de matériaux obtenues. En pratique, la reconstruction tomographique est un problème linéaire et la décomposition dans une base est non-linéaire, mais qui peut éventuellement être linéarisée [5].

Dans ce chapitre nous montrerons comment il est possible de résoudre un problème inverse (celui de reconstruction ou de décomposition), qu'il soit linéaire ou non. Nous commencerons par montrer la formulation générale de ce problème, puis nous présenterons ses caractéristiques. Ensuite, des méthodes pour résoudre ce problème seront détaillées. Premièrement nous verrons comment, dans certains cas, la solution peut être obtenue explicitement. Cependant, comme la plupart des problèmes sont non-linéaires, leur résolution se fait alors en minimisant une fonctionnelle. Nous détaillerons des algorithmes dits de descente qui en premier lieu ne contraindront pas la solution. Pour finir, nous présenterons les différentes possibilités qui existent pour incorporer des contraintes au problème de minimisation.

II.2 Problème inverse

Dans ce chapitre, nous chercherons à résoudre le système suivant :

$$\mathbf{s} = \mathcal{F}(\mathbf{y}) \quad (\text{II.1})$$

où \mathbf{s} sont les données, \mathcal{F} un opérateur et \mathbf{y} la solution. Dans le cas de la décomposition en TDMS, l'opérateur \mathcal{F} peut être non-linéaire (cas de la décomposition des données spectrales dans une base) ou linéaire (cas de la reconstruction tomographique ou de la décomposition linéarisée [5]). Le problème inverse consiste à trouver la solution \mathbf{y} à partir des données \mathbf{s} (ce qui est illustré sur la figure II.1). Un problème inverse est dit mal-posé [55] si l'une des trois conditions suivantes n'est pas respectée :

- i une solution existe ;
- ii la solution est unique ;
- iii la stabilité de la solution par rapport à des petites perturbations sur les données est garantie.

La plupart des problèmes inverses sont mal-posés. Dans le cas où l'opérateur est linéaire, en dimension finie, cela correspond au fait que certaines colonnes de la matrice sont des combinaisons linéaires d'autres colonnes. Le problème peut cependant être mal conditionné si les valeurs propres de la matrices sont très faibles. En dimension infinie, entre deux espaces de Hilbert X et Y par exemple, on a les décompositions : $X = \mathcal{N}(A) + \overline{\mathcal{R}(A^*)}$, $Y = \mathcal{N}(A^*) + \overline{\mathcal{R}(A)}$ et si l'image n'est pas fermée, cela génère une instabilité. Il y a donc une relation entre un problème mal-posé et le bon conditionnement de l'opérateur linéaire. En notant σ_i les valeurs singulières de la matrice \mathbf{F} , son nombre de conditionnement est donné par :

$$\kappa(\mathbf{F}) = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}} \quad (\text{II.2})$$

où σ_{\max} et σ_{\min} sont les valeurs singulières maximales et minimales. Avec un grand nombre de conditionnement, une erreur dans les données produira une solution avec une erreur grande.

La résolution de ce problème peut se faire en formant une fonctionnelle \mathcal{C} qu'il faudra minimiser. La solution $\hat{\mathbf{y}}$ sera obtenue comme :

$$\hat{\mathbf{y}} = \underset{\mathbf{y}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{C}(\mathbf{y}) \quad (\text{II.3})$$

où

$$\mathcal{C}(\mathbf{y}) = \mathcal{D}(\mathbf{y}) + \alpha \mathcal{R}(\mathbf{y}) \quad (\text{II.4})$$

avec $\mathcal{D}(\mathbf{y})$ terme d'attache aux données, correspondant à une distance entre les données \mathbf{s} et leur estimation à partir de la solution \mathbf{y} grâce à l'opérateur \mathcal{F} . Un terme de régularisation $\mathcal{R}(\mathbf{y})$ est présent pour ajouter un *a priori* sur la solution. Ce terme peut promouvoir une solution lisse, parcimonieuse, etc. Enfin, le paramètre de régularisation α permet d'ajouter un poids pour ajuster l'effet de $\mathcal{R}(\mathbf{y})$. Dans la suite, nous présenterons des algorithmes de minimisation qui permettent d'estimer la solution \mathbf{y} .

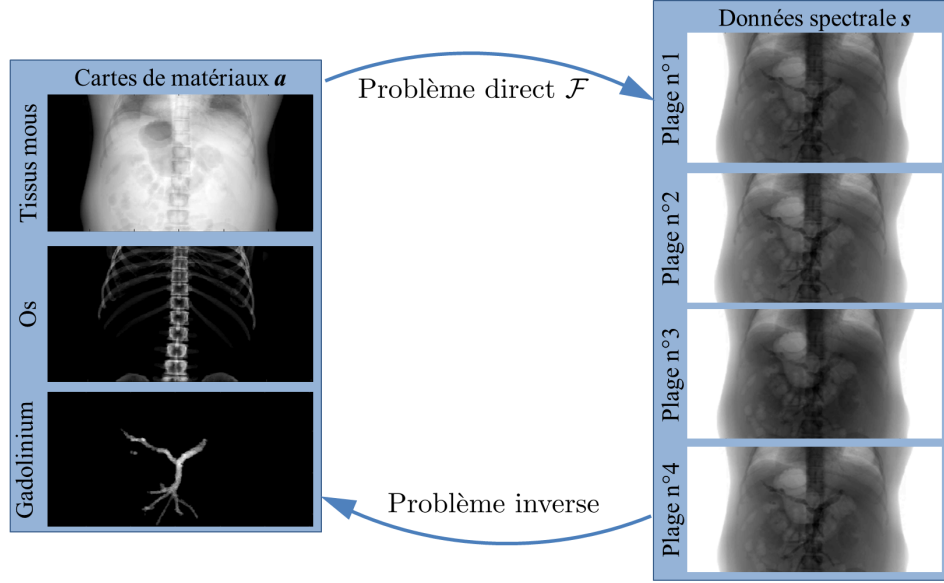


FIGURE II.1 – Problème direct et problème inverse dans le problème de décomposition en TDMS dans le domaine des projections.

II.3 Solutions exactes

Dans les cas simples, il est possible d'exprimer la solution \mathbf{y} à partir de la formulation précédente. Cette solution est analytique et nous disposons d'une expression pour elle. Il est seulement possible d'avoir ce genre de solution dans le cas où le passage de la solution $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ aux données $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ se fait par un opérateur linéaire $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Nous considérons ici le problème de minimisation quadratique suivant :

$$\mathcal{C}(\mathbf{y}) = \|\mathbf{s} - \mathbf{F}\mathbf{y}\|_2^2 \quad (\text{II.5})$$

À noter qu'ici aucun *a priori* n'est utilisé, c'est-à-dire $\alpha\mathcal{R}(\mathbf{y}) = 0$. Dans le cas où ces conditions (\mathbf{F} linéaire et problème quadratique) ne sont pas réalisées, une formulation analytique de la solution n'est pas triviale. Il sera nécessaire de faire appel à d'autres méthodes, qui seront détaillées dans la prochaine section.

Si \mathbf{F} n'est pas inversible, nous pouvons calculer sa pseudo-inverse de Moore-Penrose [78; 89] $\mathbf{F}^\dagger = (\mathbf{F}^T \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T$ (si son rang est égal à son nombre de colonnes), la solution du problème de minimisation au sens des moindres carrés (MC) est

$$\hat{\mathbf{y}}_{\text{MC}} = \mathbf{F}^\dagger \mathbf{s} \quad (\text{II.6})$$

$$\hat{\mathbf{y}}_{\text{MC}} = (\mathbf{F}^T \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{s} \quad (\text{II.7})$$

Cette solution est très sensible au bruit sur les données \mathbf{s} lorsque le problème est mal-posé. Dans la suite, nous verrons qu'il est possible de décomposer la matrice \mathbf{F} pour obtenir une meilleure solution que l'expression analytique ci-dessus, c'est-à-dire une solution moins sensible au bruit.

La décomposition en valeurs singulières (SVD) [54] est l'une des méthodes les plus

classiques qui permet de décomposer une matrice $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ sous la forme :

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \\ &= \sum_i^n \mathbf{u}_i \sigma_i \mathbf{v}_i^T\end{aligned}\tag{II.8}$$

où $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ et $\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sont des matrices orthogonales (telles que $\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{I}_m$ et $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}$) et $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ est une matrice diagonale avec comme éléments σ_i , tels que :

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_K > 0\tag{II.9}$$

où K est le rang de \mathbf{F} et les vecteurs \mathbf{u}_k et \mathbf{v}_k sont appelés vecteurs singuliers gauche et droit, respectivement, tandis que les σ_k sont les valeurs singulières de \mathbf{F} . S'il existe au moins une valeur singulière nulle, alors la solution \mathbf{y} ne sera pas unique. Si \mathbf{F} est inversible nous avons :

$$\mathbf{F}^{-1} = \sum_i^n \mathbf{v}_i \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{u}_i^T\tag{II.10}$$

Pour une matrice de rang K , nous aurons donc dans l'équation (II.8) $\mathbf{F} = \sum_i^K \mathbf{u}_i \sigma_i \mathbf{v}_i^T$, car σ_K est la dernière valeur singulière non nulle et sa pseudo-inverse est donnée par :

$$\mathbf{F}^\dagger = \sum_i^K \mathbf{v}_i \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{u}_i^T\tag{II.11}$$

La solution au sens des moindres carrés sera donc

$$\hat{\mathbf{y}}_{\text{MC}} = \mathbf{F}^\dagger \mathbf{s} = \sum_i^K \frac{\mathbf{u}_i^T \mathbf{s}}{\sigma_i} \mathbf{v}_i\tag{II.12}$$

Or, en pratique les données sont bruitées, ici nous considérons un bruit additif tel que $\mathbf{s} = \mathbf{s}^* + \delta$, où \mathbf{s}^* représentent les données non bruitées et δ le bruit. De plus, les valeurs singulières non nulles peuvent être très faibles et donc provoquer une instabilité sur la solution. Nous pouvons le voir en développant l'équation précédente telle que

$$\hat{\mathbf{y}}_{\text{MC}} = \sum_i^K \frac{\mathbf{u}_i^T (\mathbf{s}^* + \delta)}{\sigma_i} \mathbf{v}_i\tag{II.13}$$

$$= \mathbf{y}^* + \sum_i^K \frac{\mathbf{u}_i^T \delta}{\sigma_i} \mathbf{v}_i\tag{II.14}$$

où \mathbf{y}^* désigne la solution idéale (pour laquelle il n'y a pas de bruit). La deuxième partie de la solution $\sum_i^K \frac{\mathbf{u}_i^T \delta}{\sigma_i} \mathbf{v}_i$ va devenir très grande si $\sigma_k \ll 1$, ce qui est le cas pour des matrices mal conditionnées ($\kappa(\mathbf{F}) \gg 1$). Afin de contrer cet effet, il est possible de supprimer les valeurs singulières σ_k en dessous d'un certain seuil. Cette méthode s'appelle la SVD tronquée (Hanson (1971)). Un exemple de résolution par une méthode analytique est donné dans la figure II.2. Elle présente a) les données bruitées et non bruitées (\mathbf{s} et \mathbf{s}^* , respectivement), b) la solution analytique au sens des moindres carrés $\mathbf{F}^\dagger \mathbf{s}$, c) les valeurs singulières σ_i obtenues par SVD et d) la solution au sens des moindres carrés par SVD tronquée. La solution $\hat{\mathbf{y}}^k$ correspond au cas où la troncature est effectuée à partir de la k -ème valeur et \mathbf{y}^* est la solution du problème. Nous

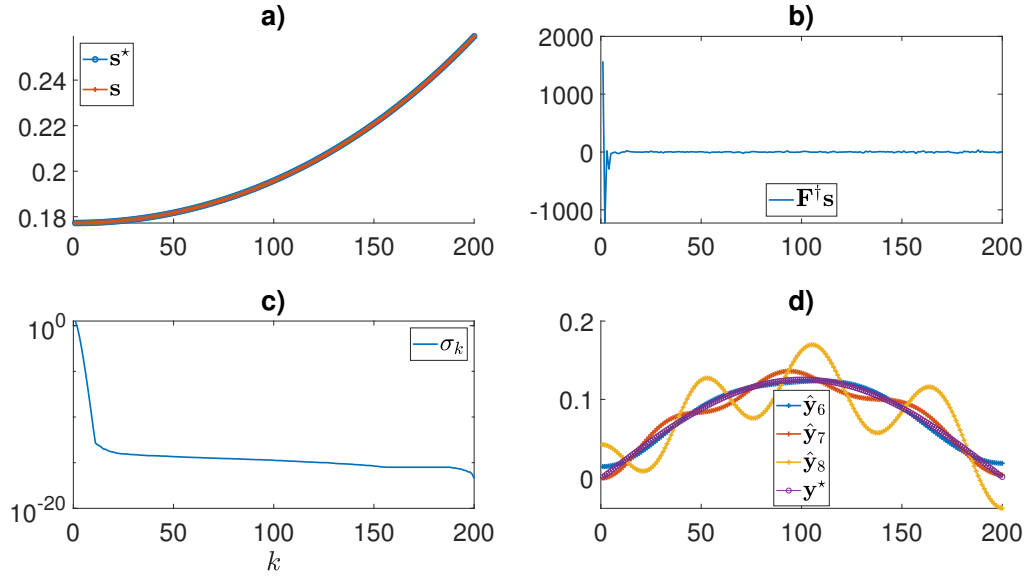


FIGURE II.2 – Exemple d'un problème mal posé dans le cas du problème **baart** de RegTools (Hansen (2002)). a) données bruitées et non bruitées (\mathbf{s} et \mathbf{s}^* , respectivement), b) solution analytique au sens des moindres carrés $\mathbf{F}^+\mathbf{s}$, c) valeurs singulières σ obtenues par SVD et d) solution au sens des moindres carrés par SVD tronquée, où la solution $\hat{\mathbf{y}}^k$ correspond à la solution où la troncature est effectuée à partir de la k -ème valeur et \mathbf{y}^* est la solution du problème.

pouvons voir à partir de cet exemple qu'il est important de supprimer une partie des valeurs singulières, car elles peuvent amplifier le bruit.

Afin de contrer l'impact du bruit sur la solution, il est également possible de filtrer les valeurs singulières au lieu de les supprimer complètement comme dans la SVD tronquée. Ainsi, en considérant un paramètre de régularisation (car nous régularisons la solution par rapport au bruit) α , une possibilité est de remplacer σ_k par :

$$\frac{\sigma_k}{\sigma_k^2 + \alpha} \quad (\text{II.15})$$

ce qui est équivalent à une régularisation de Tikhonov [39] où $\mathcal{R}(\mathbf{y}) = \|\mathbf{y}\|_2^2$ permet de stabiliser la solution par rapport au bruit. Nous pouvons voir cette équivalence en écrivant la solution au sens des moindres carrés avec une SVD :

$$\hat{\mathbf{y}}_{\text{MC}} = \mathbf{V}(\mathbf{\Sigma}^T \mathbf{\Sigma} + \alpha \mathbf{I})^{-1} \mathbf{\Sigma}^T \mathbf{U}^T \mathbf{s} \quad (\text{II.16})$$

avec \mathbf{I} la matrice identité, nous aurons donc en développant :

$$\hat{\mathbf{y}}_{\text{MC}} = \sum_i^K \frac{\sigma_i(\mathbf{u}_i^T \mathbf{s})}{\sigma_i^2 + \alpha} \mathbf{v}_i \quad (\text{II.17})$$

où nous retrouvons la formule (II.15).

II.4 Algorithmes de minimisation

Nous avons présenté des méthodes pour trouver la solution de manière analytique. Cependant cela était limité à certains cas simples (opérateur linéaire et problème quadratique). Dans

cette section, nous présenterons des algorithmes de minimisation d'une fonctionnelle afin de trouver la solution \mathbf{y} du problème inverse $\mathbf{s} = \mathcal{F}(\mathbf{y})$. Les méthodes décrites ici peuvent être utilisées pour un opérateur linéaire ou non-linéaire. Nous présenterons ces différents algorithmes en fonction de la possibilité de calculer les dérivées de la fonctionnelle : ordre 0 où seule la valeur de \mathcal{C} peut être connue, ordre 1 où son gradient peut être également calculé et ordre 2 où les valeurs du gradient et de la Hessienne sont accessibles.

Algorithmes d'ordre 0

Les algorithmes d'ordre 0 sont des méthodes d'optimisation ne nécessitant pas de calculer les dérivées de \mathcal{C} , notamment dans le cas de fonctions non-différentiables. L'idée est de calculer des points successifs qui vont minimiser la fonction de coût. Ces solutions seront annotées \mathbf{y}_k où k sera l'itération de l'algorithme.

L'une des manières de minimiser \mathcal{C} est de chercher empiriquement la valeur de la solution. Pour chaque valeur de la variable \mathbf{y} , l'algorithme va essayer de minimiser \mathcal{C} en modifiant la valeur de cet élément jusqu'à ce que le minimum soit atteint. Cette méthode est la recherche de coordonnées [117]. Elle est pratique, car elle ne demande aucune dérivée ni approximation quadratique. Cependant, pour des problèmes de grandes dimensions cette méthode n'est pas du tout efficace.

La méthode de Nelder-Mead [80] ou méthode du simplexe n'utilise que l'information sur la valeur de \mathcal{C} . Cette méthode vise à explorer également l'espace des solutions, mais ne le fait pas élément par élément. L'algorithme commence en prenant $N + 1$ points de l'espace (où N est la dimension de la solution), formant un simplexe (triangle de dimension $N + 1$). Il sera composé des variables y_1, y_2, \dots, y_{N+1} . Après avoir calculé la valeur de la fonctionnelle en chaque point et les avoir trié de telle sorte que $\mathcal{C}(y_1) \leq \mathcal{C}(y_2) \leq \dots \leq \mathcal{C}(y_{N+1})$, le centre de gravité du simplexe y_1, \dots, y_N est calculé et noté y_0 . À partir de ce moment, plusieurs cas de figures sont à distinguer et sont affichés sur l'Algorithme 1, où $\alpha, \gamma, \rho, \sigma$ sont des coefficients tels que $\alpha > 0$, $\gamma > 1$, $0 < \rho \leq 0.5$ et $\sigma \in \mathbb{R}$. À chaque itération, l'algorithme va chercher le point qui donne la plus grande valeur de \mathcal{C} et va modifier cet élément pour qu'il donne une valeur plus petite.

II.4.1 Méthodes de descente non contraintes

Dans cette partie nous décrirons les méthodes qui visent à produire une séquence de points \mathbf{y}_k , $k = 1, \dots$, tels que

$$\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k \quad (\text{II.18})$$

où $\lambda_k > 0$ est le pas de descente, \mathbf{d}_k est la direction de descente et k est le nombre d'itérations de l'algorithme. Les méthodes de descentes créent une séquence de solutions telle que :

$$\mathcal{C}(\mathbf{y}_{k+1}) < \mathcal{C}(\mathbf{y}_k) \quad (\text{II.19})$$

sauf lorsque \mathbf{y}_k est optimal. Cette séquence se répète jusqu'au moment où un critère d'arrêt du type $(\mathcal{C}(\mathbf{y}_{k+1}) - \mathcal{C}(\mathbf{y}_k)) / \mathcal{C}(\mathbf{y}_k) \leq \epsilon$ ($\epsilon \ll 1$) est satisfait. À ce point, il y a convergence de l'algorithme. Ce type de méthode est décrite dans l'Algorithme 2.

Algorithme 1 : Algorithme de Nelder-Mead (ou méthode simplexe)

```

tant que Des critères d'arrêt ne sont pas respectés faire
  % Réflexion de  $y_{N+1}$ 
   $y_r = y_0 + \alpha(y_0 - y_{N+1})$ 
  si  $\mathcal{C}(y_1) \leq \mathcal{C}(y_r) < \mathcal{C}(y_N)$  alors
    |  $y_{N+1} = y_r$ 
  fin
  si  $\mathcal{C}(y_r) < \mathcal{C}(y_1)$  alors
    % Expansion de  $y_r$ 
     $y_e = y_0 + \gamma(y_r - y_0)$ 
    si  $\mathcal{C}(y_e) \leq \mathcal{C}(y_r)$  alors
      |  $y_{N+1} = y_e$ 
    sinon
      |  $y_{N+1} = y_r$ 
    fin
  fin
  si  $\mathcal{C}(y_r) \geq \mathcal{C}(y_N)$  alors
    % Contraction de  $y_{N+1}$ 
     $y_c = y_0 + \rho(y_{N+1} - y_0)$ 
    si  $\mathcal{C}(y_c) < \mathcal{C}(y_{N+1})$  alors
      |  $y_{N+1} = y_c$ 
    sinon
      | % Homothétie de rapport  $\sigma$  et de centre  $y_1$  pour chaque variable  $y_i$ 
      |  $y_i = y_1 + \sigma(y_i - y_1)$ 
    fin
  fin
fin

```

Nous allons tout d'abord étudier comment le pas λ_k peut être calculé.

LineSearch

Les critères de [Wolfe \(1969\)](#) donnent les conditions nécessaires pour le choix d'un bon pas λ telles que :

$$\mathcal{C}(\mathbf{y}_k + \lambda \mathbf{d}_k) \leq \mathcal{C}(\mathbf{y}_k) + c_1 \lambda \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \quad (\text{II.20})$$

$$\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{d}_k \geq c_2 \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \quad (\text{II.21})$$

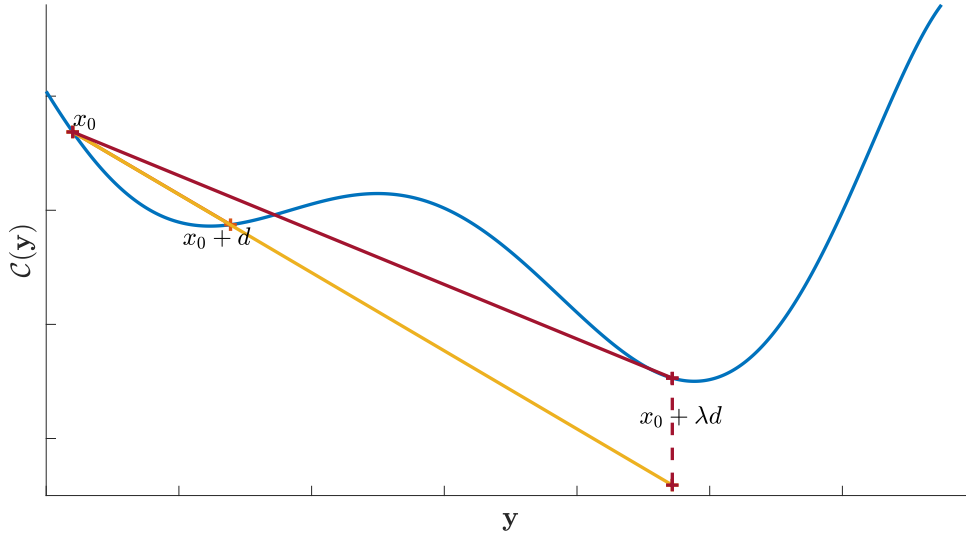
où $c_1 \in (0, 1)$ et $c_2 \in (c_1, 1)$, et \mathbf{g}_{k+1} est le gradient de \mathcal{C} à $\mathbf{y}_k + \lambda \mathbf{d}_k$. L'inégalité (II.20) est plus connue sous le nom de condition d'[Armijo \(1966\)](#) et impose que le choix de λ décroisse suffisamment \mathcal{C} . La condition de courbure (II.21) assure que ce pas n'est pas trop petit pour assurer que la solution change suffisamment [83]. Cette dernière condition peut être omise en diminuant progressivement le pas, en commençant par une grande valeur et en s'arrêtant dès que λ satisfait (II.20).

Algorithme 2 : Structure d'un algorithme de descente

tant que *Des critères d'arrêt ne sont pas respectés* **faire**

- 1) Détermination de la direction de descente \mathbf{d}_k
- 2) Calcul du pas λ_k par *LineSearch*
- 3) Mise à jour de la solution $\mathbf{y}_{k+1} = \mathbf{y}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$

fin

FIGURE II.3 – Calcul du pas par *LineSearch* pour une fonction polynomiale d'ordre 6.

Goldstein [37] a aussi proposé des conditions pour choisir λ en remplaçant (II.20) par :

$$\mathcal{C}(\mathbf{y}_k) + (1 - c)\lambda \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \leq \mathcal{C}(\mathbf{y} + \lambda \mathbf{d}_k) \leq \mathcal{C}(\mathbf{y}_k) + c\lambda \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k \quad (\text{II.22})$$

avec $0 < c < 1/2$, qui assure de choisir un pas suffisamment grand pour minimiser \mathcal{C} . Un exemple de *LineSearch* est donné dans la figure II.3 pour une fonction polynomiale d'ordre 6. Sans *LineSearch*, la nouvelle solution resterait dans le minimum local de gauche, mais par recherche du pas λ , le minimum global est obtenu. Nous allons maintenant décrire brièvement les différentes méthodes qui peuvent être mises en place pour calculer \mathbf{d}_k , et ce en fonction des dérivés de la fonctionnelle calculables.

Algorithmes d'ordre 1

Nous détaillerons ici les méthodes qui calculent la direction de descente \mathbf{d}_k grâce aux gradients de la fonctionnelle (il est également possible d'avoir une approximation de la dérivée au lieu de l'expression exacte [61]). Le choix classique est de prendre l'opposé du gradient comme direction de descente :

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k \quad (\text{II.23})$$

Cette méthode est appelé tout simplement descente de gradient [43].

La méthode du gradient conjugué est un algorithme très connu, qui permet d'améliorer la vitesse de convergence de la descente de gradient. L'idée est de calculer un coefficient permettant d'avoir une meilleure direction de descente (c'est-à-dire qui "pointe" plus précisément vers le minimum de \mathcal{C}). Fletcher *et* Powell (1963) ont proposé le calcul suivant pour la direction de descente :

$$\beta_{k+1} = \frac{\mathbf{g}_{k+1}^T \mathbf{g}_{k+1}}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{g}_k} \quad (\text{II.24})$$

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1} + \beta_{k+1} \mathbf{d}_k \quad (\text{II.25})$$

À noter que pour $k = 0$ nous avons $\mathbf{d}_0 = -\mathbf{g}_0$. Les propriétés de convergence du gradient conjugué ont été très étudiées (Gilbert *et* Nocedal (1992)).

Algorithmes d'ordre 2

Lorsque la Hessienne de la fonction de coût est accessible, elle peut être utilisée pour augmenter la performance de l'algorithme en terme de vitesse de convergence.

En notant \mathbf{H}_k la Hessienne de \mathcal{C} à l'itération k , l'une des méthodes est de créer un modèle quadratique autour du point courant \mathbf{y}_k par une série de Taylor (section B.1). L'approximation quadratique \mathcal{W} de la fonction de coût est [18] :

$$\mathcal{W}(\mathbf{y} + \mathbf{y}_k) = \mathcal{C}(\mathbf{y}) + \mathbf{g}_k^T \mathbf{y}_k + \frac{1}{2} \mathbf{y}_k^T \mathbf{H}_k \mathbf{y}_k \quad (\text{II.26})$$

Résoudre cette équation peut maintenant se faire en appliquant les méthodes analytiques vues précédemment, car nous avons un problème quadratique.

Une méthode grandement utilisée est la méthode de Newton [81; 34] qui nous donne comme direction de descente :

$$\mathbf{d}_k = -\mathbf{H}_k^{-1} \mathbf{g}_k \quad (\text{II.27})$$

Nous pouvons calculer cette Hessienne dans le calcul de la solution au sens des moindres carrés. En définissant $\mathcal{C}(\mathbf{y}) = \|\mathbf{s} - \mathcal{F}(\mathbf{y})\|_2^2$, \mathbf{H} sera donnée par

$$\begin{aligned} H_{i,j} &= \frac{\partial^2}{\partial y_i \partial y_j} \sum_n (s_n - \mathcal{F}_n(\mathbf{y}))^2 \\ &= \frac{\partial}{\partial y_i} \sum_n -2 \frac{\partial \mathcal{F}_n(\mathbf{y})}{\partial y_j} (s_n - \mathcal{F}_n(\mathbf{y})) \\ &= \sum_n -2 \frac{\partial^2 \mathcal{F}_n(\mathbf{y})}{\partial y_i \partial y_j} (s_n - \mathcal{F}_n(\mathbf{y})) + \sum_n 2 \frac{\partial \mathcal{F}_n(\mathbf{y})}{\partial y_i} \frac{\partial \mathcal{F}_n(\mathbf{y})}{\partial y_j} \end{aligned} \quad (\text{II.28})$$

(II.29)

Nous avons finalement :

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}[\mathcal{F}] + 2\mathbf{J}^T \mathbf{J}$$

où $\mathbf{H}[\mathcal{F}]$ correspond à la partie qui prend compte de la dérivé seconde de l'opérateur \mathcal{F} et \mathbf{J} sa Jacobienne (détails section B.3). Cependant, dans la plupart des cas, $\mathbf{H}[\mathcal{F}]$ n'est pas possible à inverser car non-inversible ou de trop grande taille. Il est donc possible d'approximer la

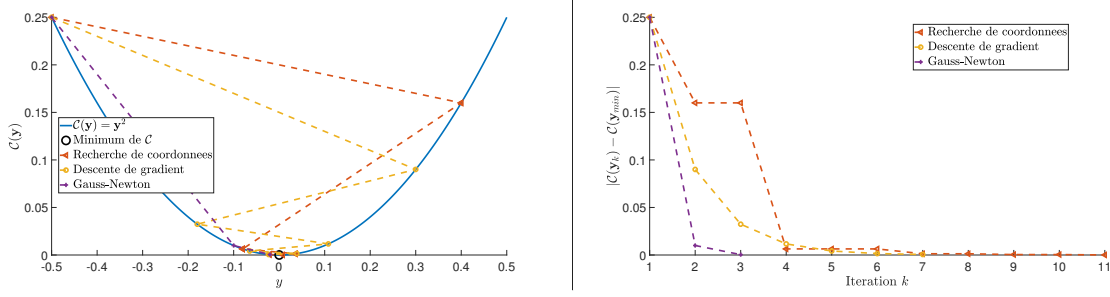


FIGURE II.4 – Minimisation de la fonction de coût $\mathcal{C}(\mathbf{y}) = \mathbf{y}^2$ par trois algorithmes de différents ordres : recherche de coordonnées (en orange), descente de gradient (en jaune) et Gauss-Newton (en violet). À gauche les différentes solutions pour chaque itération sont représentées, et à droite l'erreur associée. Les algorithmes s'arrêtent quand l'erreur est $< 10^{-6}$.

Hessienne en enlevant les termes de dérivées seconde $\partial^2 \mathcal{C}_k / \partial \mathbf{y}_k^2$ de l'expression de \mathbf{H}_k : c'est l'approximation de Gauss-Newton.

Il est également possible d'utiliser des méthodes pour obtenir des approximations successives de la Hessienne quand elle n'est pas accessible (elle ou son inverse). La plus connue étant l'approximation de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) (Fletcher (2013)). À chaque itération, la matrice qui approxime \mathbf{H} , dénotée \mathbf{B}_k ici, est mise à jour après le calcul du nouveau pas \mathbf{d}_k suivant l'itération :

$$\mathbf{e}_k = \mathbf{g}_{k+1} - \mathbf{g}_k \quad (\text{II.30})$$

$$\mathbf{B}_{k+1} = \mathbf{B}_k + \frac{\mathbf{e}_k^T \mathbf{e}_k}{\mathbf{e}_k^T \lambda_k \mathbf{d}_k} - \frac{\mathbf{B}_k \mathbf{d}_k \mathbf{d}_k^T \mathbf{B}_k}{\mathbf{d}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{d}_k} \quad (\text{II.31})$$

Puis le calcul du pas à l'itération suivante se fera en résolvant le système linéaire $\mathbf{B}_{k+1} \mathbf{d}_{k+1} = -\mathbf{g}_{k+1}$. Lorsque cette approximation est utilisée, l'algorithme est appelé un quasi-Newton car la Hessienne n'est pas exacte. Afin de mesurer l'impact de l'ordre sur la vitesse de convergence, une comparaison de trois algorithmes (d'ordre 0, 1 et 2) est donnée figure II.4.

II.4.2 Méthodes de descente sous contraintes

Le problème de minimisation précédent, pour trouver $\hat{\mathbf{y}}$, peut aboutir à une solution ayant n'importe quelle valeur. Nous nous intéresserons ici au problème suivant :

$$\hat{\mathbf{y}} = \underset{\mathbf{y}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{C}(\mathbf{y}) \quad \text{s.t.} \quad \begin{cases} \mathbf{y} \in \Omega \\ \mathcal{H}(\mathbf{y}) = 0 \end{cases} \quad (\text{II.32})$$

qui vise à obtenir $\hat{\mathbf{y}}$ telle qu'elle appartienne à l'ensemble Ω et qu'elle vérifie $\mathcal{H}(\mathbf{y}) = 0$ (contrainte d'égalité), où \mathcal{H} est un opérateur le plus général ici. La contrainte d'appartenance à un ensemble Ω peut souvent être mise sous la forme de contrainte d'inégalité. Nous présenterons ici des méthodes qui minimisent \mathcal{C} et qui permettent de vérifier ces contraintes.

Région de confiance

La région de confiance est une méthode qui crée une région autour du point courant dans laquelle un modèle quadratique reflète correctement \mathcal{C} (dans lequel l'algorithme a confiance).

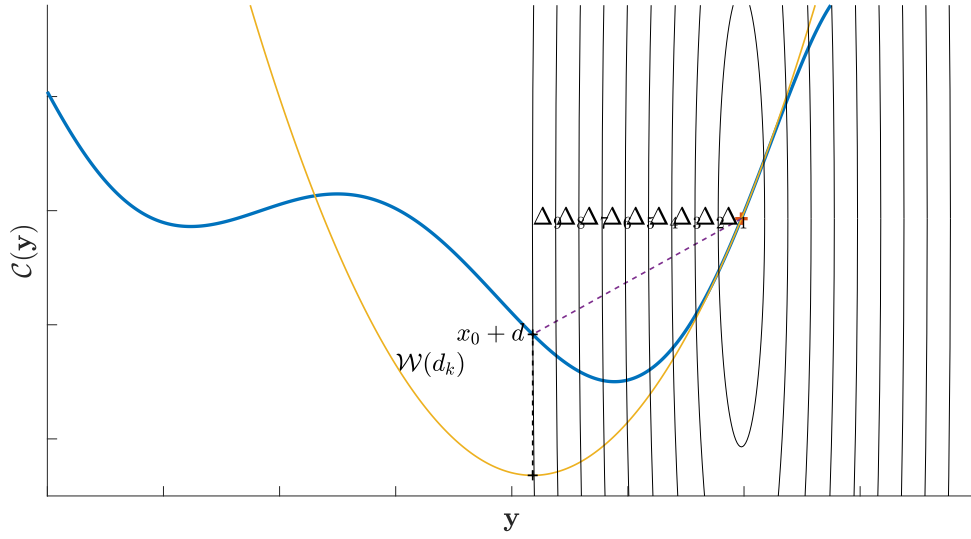


FIGURE II.5 – Calcul de la nouvelle solution par région de confiance pour une fonction polynomiale d'ordre 6.

Ici, la longueur du pas et la direction sont calculées simultanément. La région a un rayon Δ_k , qui sera réduit itérativement si la nouvelle solution ne minimise pas suffisamment la fonctionnelle ou ne vérifie pas les contraintes. Le modèle quadratique \mathcal{W}_k est construit à partir de la série de Taylor de \mathcal{C}_k autour de \mathbf{y}_k , suivant :

$$\mathcal{W}(\mathbf{y}_{k+1}) = \mathcal{C}(\mathbf{y}_k) + \mathbf{g}_k^T \mathbf{d}_k + \frac{1}{2} \mathbf{d}_k^T \mathbf{H}_k \mathbf{d}_k \quad (\text{II.33})$$

La nouvelle solution sera obtenue en résolvant le problème suivant :

$$\min_{\mathbf{d}} \mathcal{W}_k(\mathbf{y}_{k+1}) = \mathcal{C}_k + \mathbf{g}_k^T \mathbf{d} + \frac{1}{2} \mathbf{d}^T \mathbf{H}_k \mathbf{d} \quad \text{s.t. } \|\mathbf{d}\| \leq \Delta_k \quad (\text{II.34})$$

où $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne. Il est ainsi facile de restreindre la solution dans un ensemble. Un exemple de la région de confiance est donné figure II.5.

Incorporation des contraintes

Ici, nous chercherons les méthodes pour incorporer les contraintes au problème de minimisation. L'incorporation parfaite d'une contrainte par le biais d'une fonction peut s'écrire :

$$\min_{\mathbf{y}} \mathcal{C}(\mathbf{y}) + \delta_{\Omega}(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \quad (\text{II.35})$$

où $\delta_{\Omega}(\mathbf{y})$ est une fonction indicatrice telle que

$$\delta_{\Omega}(\mathbf{y}) = \begin{cases} 0, & \text{si } \mathbf{y} \in \Omega \\ \infty, & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

Cependant, la résolution de (II.35) n'est souvent pas faisable en pratique. Afin d'obtenir cette solution, deux approches peuvent être mises en œuvre [69].

- I - L'ensemble Ω est souvent trop restrictif pour obtenir une solution dans cet ensemble dès les premières itérations d'un algorithme. Il est donc possible de créer une séquence d'ensemble Ω_k où la solution $\mathbf{y}_k \in \Omega_k$ existe. Ce paradigme s'appuie sur la notion de cône normal. Lorsque k augmente, le cône normal des ces ensembles doit être inclus dans celui de Ω . Les ensembles Ω_k peuvent être très simples au début des itérations et raffinés au fur et à mesure de ces dernières. Nous utiliserons dans la suite un voisinage de l'ensemble Ω dépendant de l'itération k . Nous pouvons remarquer que la méthode des régions de confiance revient à utiliser ce paradigme.
- II - Transcrire la contrainte soit par une fonction barrière soit par un terme de pénalité avec un multiplicateur. Les fonctions que nous pouvons inclure dans la fonction coût peuvent tenir compte de la distance à l'ensemble Ω . Nous utiliserons aussi dans la suite des méthodes basées sur l'introduction d'un Lagrangien et d'un multiplicateur μ . Si la contrainte s'écrit $\mathcal{G}(x) = 0$, avec $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^n$, il s'agit d'inclure un terme du type $\langle \alpha, \mathcal{G}(x) \rangle$ [27], où α est le multiplicateur de Lagrange. Une méthode classique est le *sequential quadratic programming* [105], qui réalise une suite d'approximations quadratiques de ce type de Lagrangien qui sont améliorées au cours des itérations.

Chaque méthode permet de contraindre la solution, mais elles peuvent également être combinées comme le montre Levy (2007).

II.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé ce qu'était un problème inverse et quels sont les outils qui sont disponibles pour le résoudre. À noter qu'ici nous avons détaillé seulement les algorithmes de base, beaucoup d'améliorations ont été apportées à ces méthodes pour qu'elles soient plus rapides, performantes ou utilisables dans des cas non-convexes, non-linéaires, etc.

Si le problème posé est linéaire, il est possible de le résoudre de manière directe à partir de méthodes classiques. Cependant, en TDMS, le problème n'est pas linéaire. La résolution du problème inverse se fait en minimisant une fonction de coût. C'est pour cela que des méthodes itératives de minimisation sont utilisées. Il y a un grand choix sur les méthodes. Ce choix peut se faire en fonction de la connaissance de l'opérateur \mathcal{F} , cela dépendra si nous pouvons avoir accès aux dérivés de celui-ci. Les algorithmes d'ordre 0 ne requièrent aucune dérivée, ce qui simplifie leur utilisation. Mais ils ont tendance à avoir des temps de convergence longs. C'est pour cela que des algorithmes utilisant le gradient (algorithme d'ordre 1) sont utilisés et permettent d'avantage de vitesse. Dans la même logique, en utilisant la Hessienne (algorithme d'ordre 2), nous pouvons avoir accès à des algorithmes très rapides et performants.

Les chapitres suivants sont dédiés aux contributions. Le problème de décomposition dans le domaine des projections sera étudié. Nous présenterons tout d'abord sur quels jeux de données numériques seront testées les méthodes que nous développerons et aussi avec quelles métriques d'évaluations nous ferons la comparaison. Puis, la formulation du terme d'attache aux données \mathcal{D} sera discuté. Le choix de ce terme en fonction du type de bruit sera étudié. Ensuite, un algorithme de minimisation visant à obtenir une solution positive sera proposé. Cette méthode utilisera le premier paradigme mis en avant dans la section II.4.2 en approximant l'ensemble de

contrainte à chaque itération. Afin de réduire certains artefacts, un second algorithme de minimisation sous contraintes de positivité et d'égalité sera développé. Contrairement au premier, ce dernier utilise le second paradigme visant à intégrer les contraintes de la fonction à minimiser. Puis une méthode pour choisir automatiquement les paramètres de régularisation sera également proposée et étudiée. Enfin, ces méthodes seront utilisées sur des données expérimentales provenant d'un prototype de scanner spectral.

Chapitre III

Simulations numériques : simulation des données spectrales et critères d'évaluation des méthodes

Contents

III.1	Introduction	49
III.2	Données spectrales	49
III.2.1	Modèle spectral	49
III.2.2	Jeux de données numériques	52
III.3	Évaluation des méthodes de décomposition	55
III.3.1	Erreur quadratique moyenne	55
III.3.2	Indice de similarité structurel	56
III.4	Conclusion	56

Chapitre III

III.1 Introduction

Le but de cette thèse est de proposer des méthodes de décomposition en matériaux de données spectrales dans le domaine des projections. Dans la suite, nous comparerons différents algorithmes exploitant de mêmes jeux de données spectrales numériques.

Dans ce chapitre, nous présenterons comment ces données sont générées, avec quel spectre source, quelle réponse du détecteur et quelles fonctions d'atténuation.

Pour finir, nous présenterons les métriques d'évaluation dans le domaine des projections ainsi que dans le domaine de l'objet.

III.2 Données spectrales

Nous rappelons la modélisation du problème direct du scanner spectral ([sous-section I.7.3](#)) :

$$\bar{s}_i^\theta(p) = \sum_j d_i(e_j) n^0(e_j) \exp \left(- \sum_m a_m^\theta(p) \tau_m(e_j) \right) \quad (\text{III.1})$$

où $\bar{s}_i^\theta(p)$ est le nombre de photons acquis dans la i -ème plage d'énergie au pixel p à l'angle θ , $n^0(e_j)$ est le nombre de photon envoyé par la source à l'énergie e_j , $d_i(e_j)$ est la réponse de la i -ème plage d'énergie à l'énergie incidente e_j , $\tau_m(e_j)$ est la fonction d'atténuation du matériau m à l'énergie incidente e_j et $a_m^\theta(p)$ est la densité du matériau m projeté sur le pixel p . La décomposition en matériaux des données spectrales vise à récupérer les cartes de matériaux \mathbf{a}_m^θ .

III.2.1 Modèle spectral

Spectre de la source

Le spectre de la source, n^0 , est généré par le logiciel SpekCalc de [Poludniowski *et al.* \(2009\)](#) avec une énergie maximale de 120 keV. Dans un système réel, cela représente une tension d'alimentation de 120 kV. L'allure du spectre à la sortie de la source est donnée sur la figure [III.1](#), en considérant une plaque de filtrage en aluminium d'une épaisseur de 1.2 mm. Nous contrôlerons le nombre de photons incidents en modifiant le paramètre N^0 égal à :

$$N^0 = \sum_j n^0(e_j) \quad (\text{III.2})$$

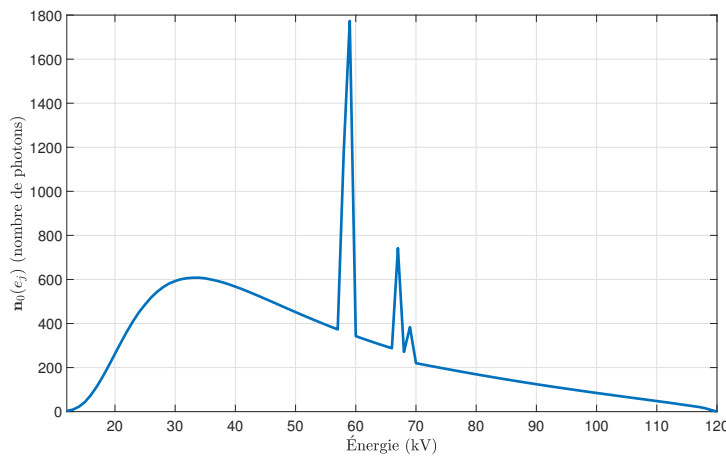


FIGURE III.1 – Spectre de la source utilisé pour simuler les données numériques provenant du logiciel SpekCalc de Poludniowski *et al.* (2009).

Accroître N^0 revient à augmenter le courant de chauffage du tube à rayons X dans un système réel.

Réponse du détecteur

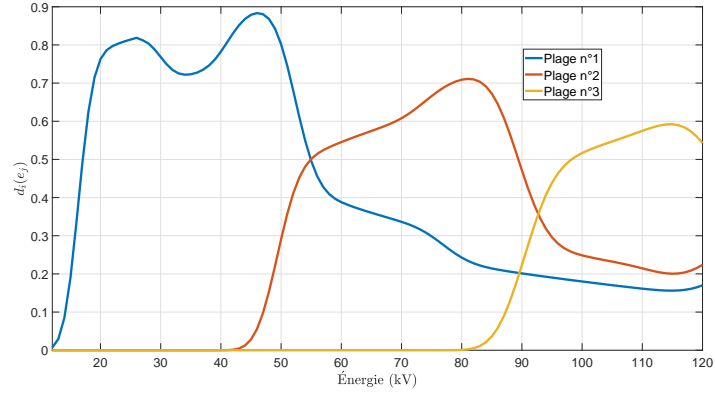
La réponse du détecteur $d_i(e_j)$ correspond à la probabilité qu'un photon incident d'énergie e_j soit détecté dans la plage i . Nous présentons deux réponses de détecteurs à comptage de photons sur la figure III.2. Les figures III.2a et III.2b présentent respectivement une réponse pour 3 et 4 plages d'énergies. Ces probabilités sont calculées à partir des travaux de Schlomka *et al.* (2008), qui proposent une équation du modèle paramétrique validée par des acquisitions expérimentales sur un détecteur à comptage de photons. Il est composé d'un cristal de tellure de cadmium (CdTe) de 3 mm. Cet équipement est un détecteur ligne de 1024 pixels de détection avec (en moyenne) 0.4 mm de taille effective 0.38×1.6 mm. En notant U l'énergie à laquelle un photon X va être détecté pour une énergie incidente E , la matrice de réponse $R(U, E)$ de ce détecteur est donnée par :

$$R(U, E) = c_1(E) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1(E)} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(U - E)^2}{\sigma_1(E)^2}\right) + c_2(E) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2(E)} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(U - E_e + E)^2}{\sigma_2(E)^2}\right) + B(U, E) \right) \quad (\text{III.3})$$

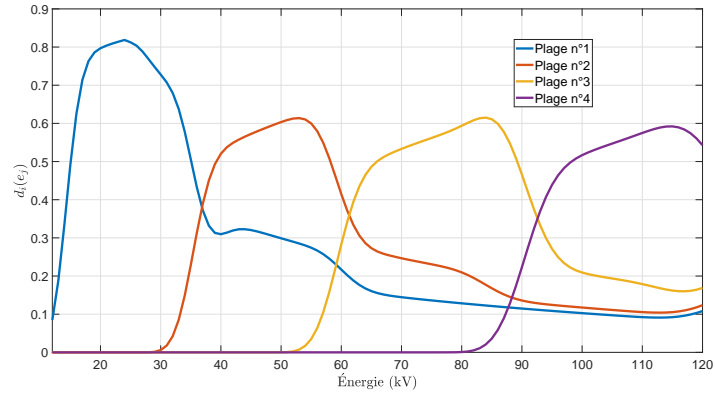
avec $B(U, E)$ représentant le fond, $c_1(E)$ est réglé pour garder le nombre de photons X incidents et :

$$c_2(E) = \begin{cases} a_1 \exp(-a_2 E), & \text{pour } E \geq E_e \\ 0, & \text{pour } E < E_e \end{cases}$$

$$\begin{aligned} c_3(E) &= a_3 - a_4 E \\ \sigma(E) &= a_5 + a_6 E \end{aligned} \quad (\text{III.4})$$



(a) Réponse d'un DCP avec 3 plages d'énergies



(b) Réponse d'un DCP avec 4 plages d'énergies

 FIGURE III.2 – Réponse d'un détecteur à comptage de photons pour 3 et 4 plages d'énergies, cette réponse a été calculée à partir des travaux de [Schlomka et al. \(2008\)](#).

où

$$\begin{cases} a_1 = 0.5 \\ a_2 = 0.015 \text{ keV}^{-1} \\ a_3 = 0.042 \text{ keV}^{-1} \\ a_4 = 0.213 \times 10^{-3} \text{ keV}^{-2} \\ a_5 = 1.61 \text{ keV} \\ a_6 = 0.025 \end{cases} \quad (\text{III.5})$$

Fonctions d'atténuation

La fonction d'atténuation $\tau_m(e_j)$ décrit l'atténuation du matériau m , e_j représentant l'énergie incidente des photons. La concaténation des fonctions $\tau_m(e_j)$ constitue la base dans laquelle les données vont être décomposées, qui sera représentée par la matrice :

$$\mathbf{T} = [\tau_1^T, \dots, \tau_M^T] \quad (\text{III.6})$$

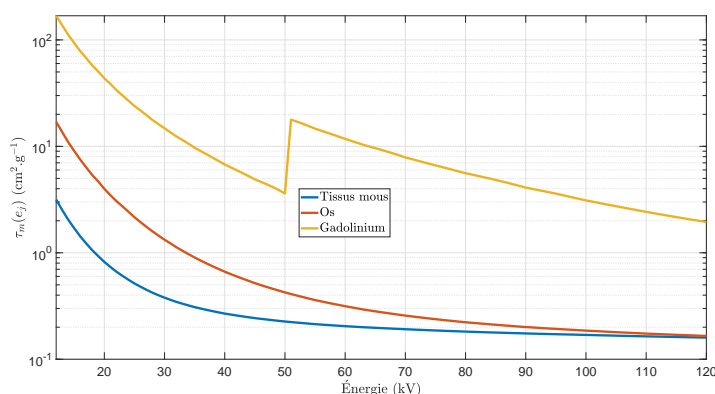


FIGURE III.3 – Fonctions d’atténuation pour les tissus mous, les os et le gadolinium. Ces atténuations ont été obtenues avec le logiciel XMuDat de [Nowotny \(1998\)](#).

La figure [III.3](#) représente les fonctions d’atténuations $\tau_m(e_j)$ correspondant aux tissus mous, à l’os et au gadolinium sur une plage d’énergies comprises entre 10 et 120 keV. Ces trois matériaux constitueront la base utilisée dans la suite. Les fonctions d’atténuation ont été obtenues avec le logiciel XMuDat de [Nowotny \(1998\)](#).

III.2.2 Jeux de données numériques

Nous avons décrit les éléments correspondant au modèle spectral. Nous avons maintenant besoin d’objets numériques segmentés pour faire correspondre une fonction d’atténuation à chaque segment (matériau). Nous pouvons ainsi créer des données spectrales grâce au modèle ([III.1](#)).

DigiMouse

DigiMouse est une souris qui a été imagée par plusieurs modalités (RX, IRM, PET, ...) par [Dogdas et al. \(2007\)](#). Des cryosections ont également été effectuées, ce qui a permis de créer un atlas numérique (par la combinaison des observations des sections et des volumes acquis en imagerie). Le volume est segmenté en 21 parties : organes, squelette et glandes principalement. Le volume est composé de $154 \times 154 \times 496$ voxels. Les projections sont générées en utilisant la fonction `radon` de Matlab, qui correspond à une géométrie parallèle. Nous avons finalement 180 projections de 219×496 pixels. Dans le [chapitre IV](#), ce fantôme sera utilisé dans une base de $M = 2$ matériaux : tissus mous et os. Le processus de génération de ces données est décrit sur la figure [III.4](#).

Thorax

Des données anthropomorphiques ont été utilisées dans la suite pour se rapprocher de l’utilisation clinique. Ainsi, un thorax humain numérique est utilisé dans les chapitres [V](#), [VI](#) et [VII](#). Le volume initial de $240 \times 185 \times 84$ voxels issu d’un scanner classique a été segmenté par [Kéchichian et al. \(2013\)](#) en 38 segments : organes, squelette, muscles, glandes, grosses artères, etc. Les projections ont également été générées avec la fonction `radon` pour créer 180 projections

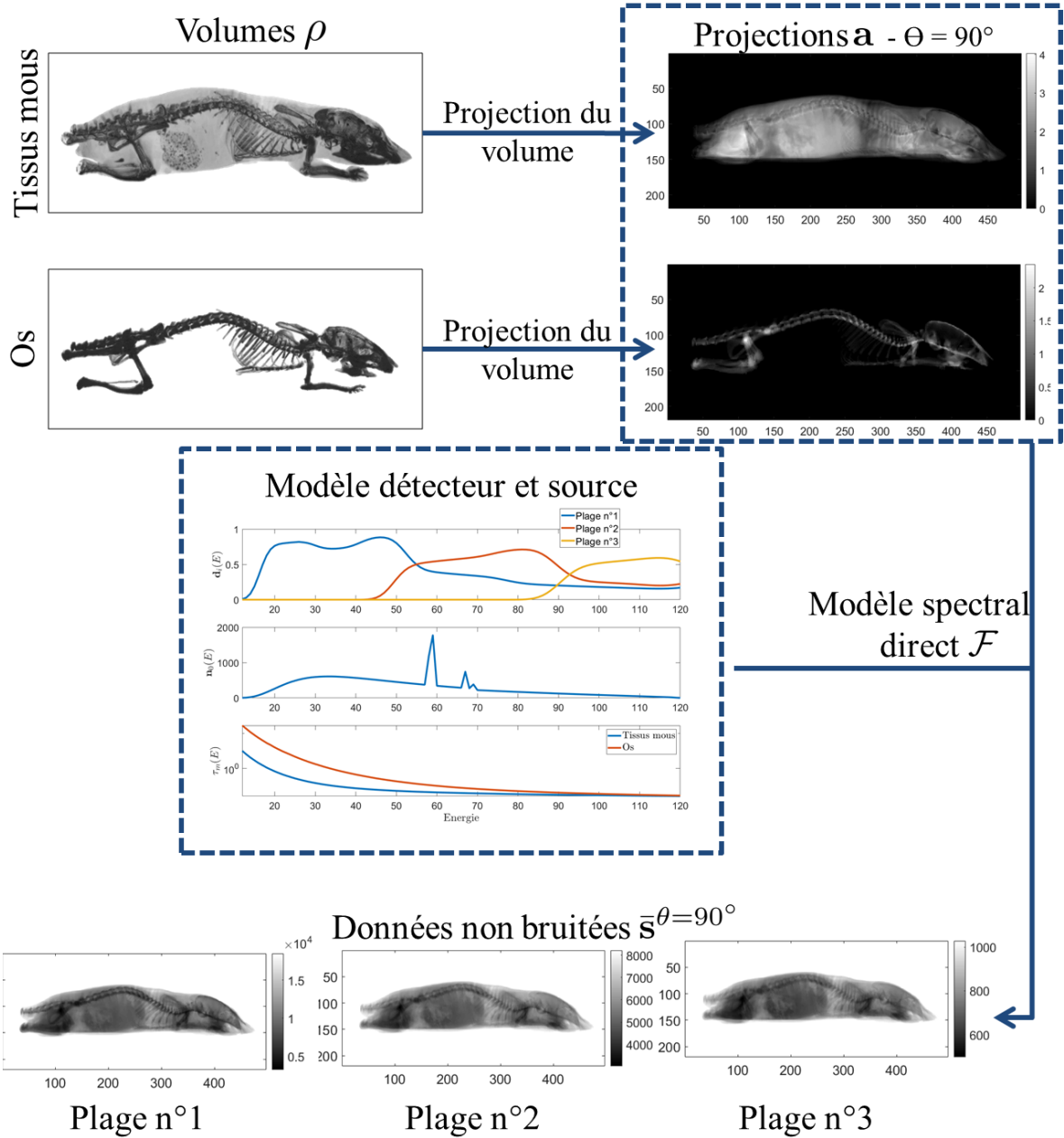


FIGURE III.4 – Schéma de génération des données spectrales à partir de DigiMouse [25]. Les volumes (en haut à gauche) sont projetés pour créer les projections (en haut à droite). Les projections, la réponse du détecteur (au milieu, première ligne), le spectre (au milieu, deuxième ligne) et les fonctions d'atténuation (au milieu, troisième ligne) vont être utilisés dans le modèle direct pour créer les données spectrales (en bas). Les projections et les données spectrales sont données pour $\theta = 90^\circ$.

de 84×306 pixels. Ce fantôme sera utilisé pour générer des données dans une base de $M = 3$ matériaux : tissus mous, os et gadolinium (dans la veine porte). Cette génération est résumée sur la figure III.5.

Modèle de bruit

Nous avons montré comment générer les données spectrales non bruitées \bar{s}^θ pour chaque angle θ . Afin de simuler la réalité, nous ajouterons du bruit sur ces dernières. La détection de

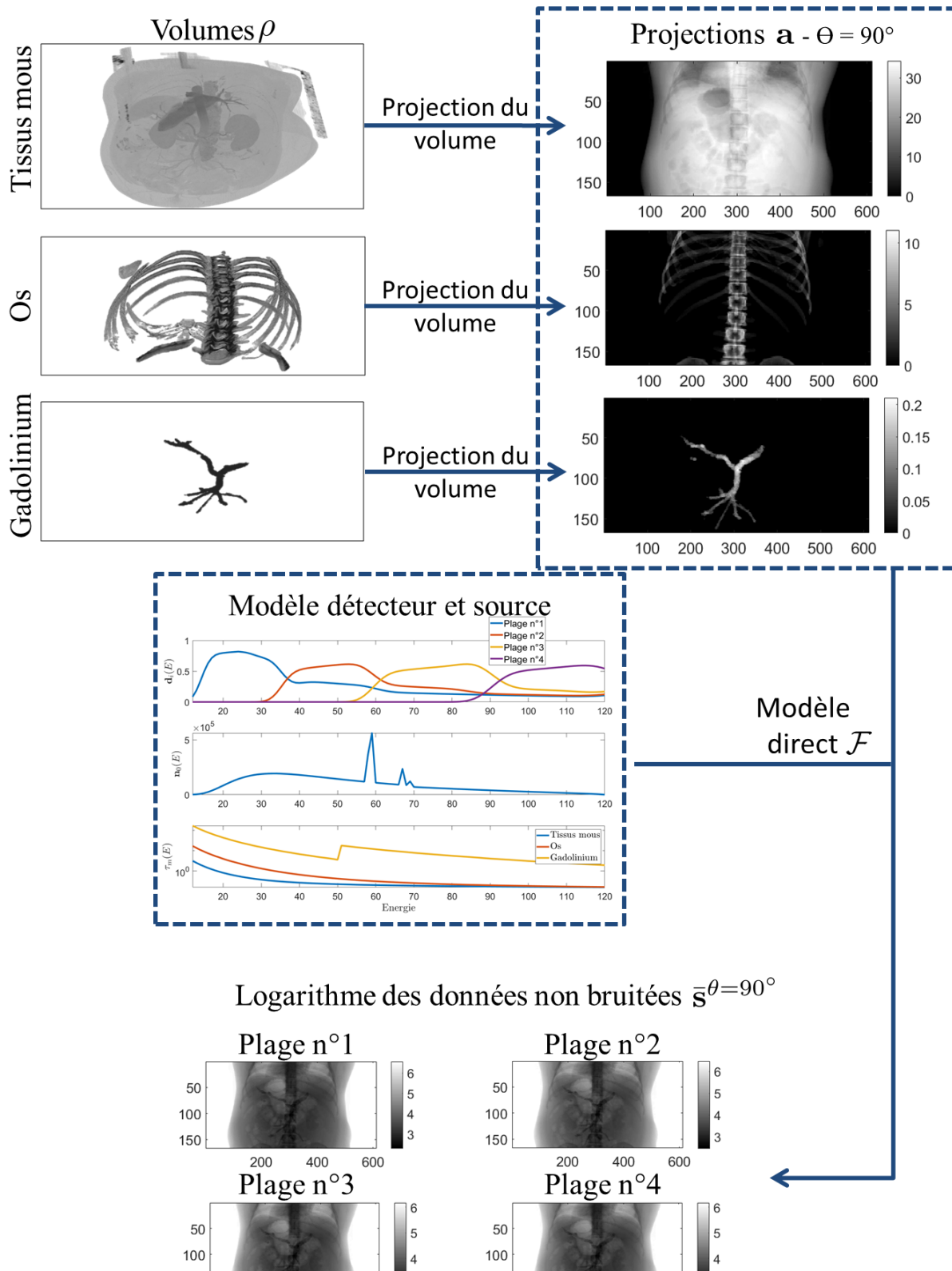


FIGURE III.5 – Schéma de génération des données spectrales à partir du thorax [60]. Les volumes (en haut à gauche) sont projetés pour créer les projections (en haut à droite). Les projections, la réponse du détecteur (au milieu, première ligne), le spectre (au milieu, deuxième ligne) et les fonctions d'atténuation (au milieu, troisième ligne) vont être utilisées dans le modèle direct pour créer les données spectrales (en bas). Les projections et les données spectrales sont données pour $\theta = 90^\circ$.

photons est soumise à un bruit de Poisson. Ainsi, en utilisant la fonction `poissrnd` de Matlab nous générons des données qui se rapprochent de la réalité. Nous avons donc finalement :

$$\mathbf{s}_i^\theta(p) = \mathcal{P}(\lambda = \bar{\mathbf{s}}_i^\theta(p)) \quad (\text{III.7})$$

où \mathcal{P} est la distribution de Poisson de moyenne λ .

III.3 Évaluation des méthodes de décomposition

Nous avons vu comment les données spectrales sont générées. Elles seront utilisées pour tester les méthodes que nous proposons dans la suite. Afin de savoir quelle méthode est la meilleure, nous proposerons ici des métriques d'évaluation. La décomposition se fera dans le domaine des projections, le volume de chaque matériau sera reconstruit à partir de sa carte décomposée.

III.3.1 Erreur quadratique moyenne

La première métrique que nous utiliserons est l'erreur quadratique moyenne. Elle permet d'évaluer à quel point deux images sont proches l'une de l'autre.

Dans les projections

Nous utiliserons un terme de régularisation afin d'améliorer les décompositions. Ce terme est pondéré par un paramètre de régularisation α . Les cartes matériaux seront obtenues pour différents α et pour différents angles θ . Nous noterons cette carte $\mathbf{a}_{m,\theta}^\alpha$ pour le matériau m . La vérité terrain (VT) venant des données numériques sera notée $\mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}$. En notant M le nombre de matériaux présent dans la base, l'erreur quadratique moyenne associée au paramètre α et à l'angle θ est donnée par :

$$\xi_{\theta,\alpha} = \frac{1}{M} \sum_m \frac{\|\mathbf{a}_{m,\theta}^\alpha - \mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}\|_2^2}{\|\mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}\|_2^2} \quad (\text{III.8})$$

Nous noterons également ξ_θ l'erreur associée à la meilleure décomposition¹ pour chaque matériau m . Plus ces erreurs sont faibles, meilleure est la décomposition.

Dans le volume

Nous calculerons également une erreur quadratique moyenne dans le volume. Nous noterons $\rho_{m,z}$ une coupe du volume z pour le matériau m . La reconstruction se fera à partir des meilleures projections pour chaque matériau m . Cette erreur sera calculée telle que :

$$\xi_z = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{\|\rho_{m,z} - \rho_{m,z}^{\text{VT}}\|_2^2}{\|\rho_{m,z}^{\text{VT}}\|_2^2} \quad (\text{III.9})$$

où $\rho_{m,z}^{\text{VT}}$ désigne la coupe reconstruite à partir des projections de la vérité terrain. En utilisant la coupe reconstruite, nous limitons les erreurs engendrées par la reconstruction tomographique elle-même.

1. La meilleure décomposition sera explicitée dans le corps du texte, le cas échéant. Cela peut être sur un critère d'erreur où la décomposition se fait que pour une valeur de paramètre de régularisation définie.

III.3.2 Indice de similarité structurel

L'erreur quadratique moyenne n'est pas suffisante, car les valeurs de certains pixels peuvent se compenser, générant une erreur faible alors que la décomposition n'est pas bonne. C'est pourquoi, dans la suite de ce travail, nous utiliserons l'indice de similarité structurel, que nous appellerons SSIM, son acronyme en anglais, qui a été développé par Wang *et al.* (2004). Plus le SSIM est proche de 1, plus l'image est près de la VT. Comme l'erreur quadratique, nous calculerons cet indice dans les projections et le volume.

Dans les projections

Afin d'alléger les notations, en notant deux images f et g égales aux cartes décomposées $\mathbf{a}_{m,\theta}^\alpha$ et $\mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}$, l'indice est calculé de la manière suivante pour le matériau m :

$$SSIM_{\theta,\alpha}^m(f, g) = \frac{(2\mu_f\mu_g + C_1)(2\sigma_{fg} + C_2)}{(\mu_f^2 + \mu_g^2 + C_1)(\sigma_f^2 + \sigma_g^2 + C_2)} \quad (\text{III.10})$$

où μ_f et μ_g sont les moyennes d'intensité de f et g , respectivement. σ_f , σ_g et σ_{fg} représentent respectivement l'écart type de f , celui de g et le coefficient de corrélation entre les deux images f et g . Nous calculons cette métrique avec $C_1 = 10^{-4}$ et $C_2 = 9.10^{-4}$ (valeurs données dans l'article de Wang *et al.* (2004) et utilisées par défaut dans la fonction Matlab). Enfin, nous aurons l'indice final égal à

$$SSIM_{\theta,\alpha}(f, g) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M SSIM_{\theta,\alpha}^m(f, g) \quad (\text{III.11})$$

Finalement, nous désignerons $SSIM_\theta$ l'indice associé aux meilleures décompositions.

Dans le volume

Dans le volume, nous aurons la même expression, mais avec f et g égales à $\rho_{m,z}$ et $\rho_{m,z}^{\text{VT}}$. Nous avons donc :

$$SSIM_z^m(f, g) = \frac{(2\mu_f\mu_g + C_1)(2\sigma_{fg} + C_2)}{(\mu_f^2 + \mu_g^2 + C_1)(\sigma_f^2 + \sigma_g^2 + C_2)} \quad (\text{III.12})$$

et donc :

$$SSIM_z(f, g) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M SSIM_z^m(f, g) \quad (\text{III.13})$$

III.4 Conclusion

Ce chapitre a décrit comment les données spectrale sont simulées numériquement. Le modèle spectral, comprenant le spectre de la source, la réponse d'un détecteur à comptage de photons et les fonctions d'atténuation a été détaillée. Ce modèle a été utilisé sur des volumes numérique d'une souris et d'un thorax préalablement segmentés pour générer les données qui seront décomposées.

Les méthodes décrites dans ce manuscrit seront évaluées par des métriques qui ont été données dans la suite de ce chapitre. L'erreur quadratique moyenne et le SSIM seront calculés dans le domaine des projections et dans le volume reconstruit.

Chapitre IV

Approche de la décomposition par la divergence de Kullback-Leibler

Contents

IV.1	Introduction	59
IV.2	Problème discret	60
IV.3	Décomposition des matériaux	60
IV.3.1	Terme d'attache aux données	60
IV.3.2	Terme de régularisation	62
IV.4	Minimisation de la fonctionnelle	62
IV.4.1	Algorithme de Gauss-Newton	63
IV.4.2	Algorithme de Nelder-Mead	64
IV.5	Simulations numériques	64
IV.5.1	Génération des données spectrales	64
IV.5.2	Évaluation des résultats	65
IV.5.3	Paramètres de l'algorithme de minimisation	65
IV.5.4	Choix de l'hyperparamètre	66
IV.6	Décompositions bi-matériaux	66
IV.6.1	Influence du paramètre de régularisation	66
IV.6.2	Influence du nombre de photons incidents sur la décomposition	66
IV.6.3	Reconstructions tomographiques des décompositions à différents N^0	71
IV.7	Décompositions tri-matériaux	76
IV.8	Conclusion	77

Chapitre IV

L'IMAGERIE spectrale est par nature plus bruitée que la tomodensitométrie standard. En effet, dans chaque canal d'énergie, le nombre de photons détectés est nécessairement plus faible que quand tout le spectre est intégré. Il est donc nécessaire de le prendre en compte dans les méthodes de décomposition des données spectrales. Dans ce chapitre, nous étudierons l'effet de l'utilisation de la divergence de Kullback-Leibler (KL) sur la décomposition en base de matériaux dans le domaine des projections en TDMS.

Ces travaux ont été présentés à la conférence SPIE et publiés dans le journal IRBM :

- **Hohweiller, T.**, Ducros, N., Peyrin, F., & Sixou, B. (2017). A Kullback-Leibler approach for 3D reconstruction of spectral CT data corrupted by Poisson noise. In *Developments in X-Ray Tomography XI* (Vol. 10391, p. 103911E). International Society for Optics and Photonics.
- **Hohweiller, T.**, Ducros, N., Peyrin, F., & Sixou, B. (2017). Spectral CT material decomposition in the presence of poisson noise : a Kullback-Leibler approach. *IRBM*, 38(4), 214-218.

IV.1 Introduction

Le traitement des données spectrales nécessite de gérer leur fort niveau de bruit. De plus, nous effectuons la décomposition dans le domaine des projections, car nous pouvons ainsi nous occuper de la non-linéarité avant la reconstruction tomographique et traiter chaque projection en même temps. En utilisant des DCP, l'idée est de ne pas envoyer plus de dose que nécessaire au patient. De ce fait, le bruit sur le détecteur sera grand. Le bruit associé à la détection de photons est un bruit poissonnien et il est réparti entre les différentes plages d'énergies. C'est pour cela que [Roessl et Herrmann \(2009\)](#), [Schlomka et al. \(2008\)](#) ont proposé des méthodes en utilisant la statistique du bruit pour avoir comme terme d'attache aux données le négatif du logarithme de maximum de vraisemblance correspondant au bruit de Poisson. Il faut noter que dans leurs travaux, aucune régularisation n'est utilisée et que la minimisation de la fonctionnelle se fait par un algorithme de Nelder-Mead [80].

Comme vu dans le chapitre II, les méthodes d'ordre 0 sont plus lentes que des méthodes d'ordres supérieurs. Des résultats obtenus par [Ducros et al. \(2017\)](#) appuient ce constat en utilisant un algorithme d'ordre 2 du type Gauss-Newton. De plus, une régularisation spatiale du type Tikhonov et Huber a été implémentée sur chaque matériau. Les résultats montrent une amélioration en vitesse de convergence et des performances de décomposition. Le terme d'attache aux données dans ce travail était de type des moindres carrés pondérés (MCP). Ce

terme est adapté aux données corrompues par un bruit gaussien, mais il n'est pas rigoureux en présence de bruit poissonnien. Nous proposons d'étudier un terme d'attache aux données basé sur la divergence de Kullback-Leibler [97], qui présente des garanties théoriques en présence de bruit de Poisson, que nous minimiserons avec un algorithme de type Gauss-Newton.

IV.2 Problème discret

Nous cherchons à reconstruire la carte des matériaux $\mathbf{a}^{\theta_n} = [\mathbf{a}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_m^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_M^{\theta_n}]$ pour chaque angle θ_n , où $\mathbf{a}_m^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$, avec P le nombre de pixels, M le nombre de matériaux et N le nombre de projections. Cette décomposition se fera à partir des données $\mathbf{s}^{\theta_n} = [\mathbf{s}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_i^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_I^{\theta_n}]$, où $\mathbf{s}_i^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$ et I le nombre de plages d'énergies. Pour des raisons de visibilité, nous omettrons l'indice θ_n , les méthodes développées se feront de manière identique pour tout θ . Afin de récupérer la carte \mathbf{a} , nous résoudrons le problème suivant :

$$\hat{\mathbf{a}} = \underset{\mathbf{a}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{C}(\mathbf{a}) \quad (\text{IV.1})$$

où

$$\mathcal{C}(\mathbf{a}) = \mathcal{D}(\mathbf{a}) + \alpha \mathcal{R}(\mathbf{a}) \quad (\text{IV.2})$$

avec $\mathcal{D}(\mathbf{a})$ le terme d'attache aux données, $\mathcal{R}(\mathbf{a})$ le terme de régularisation et α son paramètre de régularisation. Dans la suite, nous détaillerons le choix fait pour chaque terme, notamment pour $\mathcal{D}(\mathbf{a})$ qui fait l'objet de cette étude, car il rend compte du bruit présent sur les données. Nous utiliserons le problème direct discret suivant :

$$s_i(p) = \sum_j d_i(e_j) n^0(e_j) \exp \left(- \sum_m a_m(p) \tau_m(e_j) \right) \quad (\text{IV.3})$$

Nous rechercherons donc les cartes de densités projetées \mathbf{a} à partir des données \mathbf{s} . Pour rappel,

$$\mathbf{a}_m(p) = \int_{\mathcal{L}} \rho_m(\mathbf{x}) d\ell \quad (\text{IV.4})$$

où $\rho_m(\mathbf{x})$ est la densité volumique du matériau m au voxel \mathbf{x} .

Les données \mathbf{s} représentent le nombre de photons arrivés sur un pixel. Ainsi, elles seront soumises à un bruit de Poisson. En notant $\mathcal{P}(\gamma)$ la loi de Poisson de paramètre γ , nous avons :

$$\mathbf{s} \sim \mathcal{P}(\gamma = \mathbf{s}^*) \quad (\text{IV.5})$$

où \mathbf{s}^* est le paramètre de la loi poissonnienne. Cependant, le bruit peut être approximé par une loi de Gauss, tel que :

$$\mathcal{P}(\gamma) \approx \mathcal{G}(\mu = \gamma, \sigma^2 = \gamma) \quad (\text{IV.6})$$

pour $\gamma > 20$, où $\mathcal{G}(\mu, \sigma^2)$ est une distribution gaussienne de moyenne μ et de variance σ^2 .

IV.3 Décomposition des matériaux

IV.3.1 Terme d'attache aux données

Nous comparerons ici différents termes d'attache aux données. En effet, ce terme permet de calculer l'écart qu'il y a entre les données \mathbf{s} et leurs valeurs estimées pour une solution \mathbf{a} par le

modèle direct \mathcal{F} . Le terme le plus classique sont les MCP. Ils sont décrits par la formule :

$$\mathcal{D}_{\text{MCP}}(\mathbf{a}) = \|\mathbf{s} - \mathcal{F}(\mathbf{a})\|_{\mathbf{W}}^2 \quad (\text{IV.7})$$

où $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne et \mathbf{W} est une matrice de pondération telle que

$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{s_1(1)+1}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{s_2(1)+1}} & 0 & 0 \\ \vdots & \dots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \frac{1}{\sqrt{s_I(P)+1}} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.8})$$

La matrice approxime la variance du bruit dans les données (Strutz (2010)). En prenant l'approximation d'un bruit poissonnien précédente, nous avons $\mu = \mathbf{s}^*$ et donc $\sigma = \sqrt{\mathbf{s}^*}$. Or, en pratique, nous n'avons pas les données non bruitées et en utilisant \mathbf{s} , nous faisons une bonne approximation de la variance du bruit.

Les MCP permettent de rendre compte d'un bruit gaussien. Cependant, nous avons vu que le bruit dans les données est un bruit de Poisson. Nous considérerons donc un terme d'attache aux données qui rende compte de ce type de bruit : la divergence de Kullback-Leibler (KL) [65] est définie telle que (entre les données bruitées \mathbf{s} et la carte des matériaux projetés \mathbf{a}) :

$$KL(\mathbf{s}, \mathbf{a}) = \sum_p \sum_i s_i(p) \log \left(\frac{s_i(p)}{\mathcal{F}_i(a(p))} \right) + \mathcal{F}_i(a(p)) - s_i(p) \quad (\text{IV.9})$$

Ce terme permet de décrire à quel point deux distributions poissonniennes sont identiques. À noter que ce n'est pas une distance, c'est-à-dire :

$$KL(\mathbf{s}, \mathbf{a}) \neq KL(\mathbf{a}, \mathbf{s}) \quad (\text{IV.10})$$

Nous choisissons ici $KL(\mathbf{s}, \mathbf{a})$ qui est la version optimale comme décrit par Kullback et Leibler (1951) : divergence entre la fonction de probabilité, \mathbf{s} , et la fonction d'approximation, \mathbf{a} . Nous écrirons donc le terme d'attache aux données calculé par la divergence de KL comme suit :

$$\mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{a}) = \sum_p \sum_i s_i(p) \log \left(\frac{s_i(p)}{\mathcal{F}_i(a(p))} \right) + \mathcal{F}_i(a(p)) - s_i(p) \quad (\text{IV.11})$$

L'explication de ce terme peut être trouvée en annexe A, qui montre que la divergence KL rend compte d'un bruit poissonnien. À noter qu'en pratique, des valeurs nulles peuvent apparaître dans $\mathcal{F}(\mathbf{a})$ ou \mathbf{s} ¹. Ainsi, le terme KL sera légèrement modifié tel que :

$$\mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{a}) = \sum_p \sum_i (s_i(p) + \zeta) \log \left(\frac{s_i(p) + \zeta}{\mathcal{F}_i(a(p)) + \zeta} \right) + \mathcal{F}_i(a(p)) - s_i(p) \quad (\text{IV.12})$$

où ζ est un petit entier utilisé afin d'éviter une division par zéro dans le log.

1. Il est possible qu'un élément de \mathbf{a} ait une forte valeur. Cela peut arriver pendant les itérations de l'algorithme où des valeurs quelconques peuvent apparaître. Si nous avons $a_m(p) \gg 1$ alors $(\sum_m a_m(p) \tau_m(e_j)) \gg 1$ et donc $\exp(-(\sum_m a_m(p) \tau_m(e_j))) \approx 0$

Nous comparerons les résultats obtenus avec la divergence de KL avec ceux obtenus avec le maximum de vraisemblance (MV) utilisé par [Schlomka et al. \(2008\)](#) pour des données corrompues avec un bruit poissonnien. Dans le cas du maximum de vraisemblance, la fonctionnelle à minimiser s'écrit :

$$\mathcal{D}_{\text{MV}}(\mathbf{a}) = \sum_p \sum_i \mathcal{F}_i(\mathbf{a}(p)) - s_i(p) \log(\mathcal{F}_i(\mathbf{a}(p))) \quad (\text{IV.13})$$

La méthode du maximum de vraisemblance se justifie dans un cadre bayésien avec des distributions *a posteriori*. Le principe de Bayes permet d'estimer les paramètres, ici \mathbf{a} , à partir du modèle statistique du bruit présent dans les données. Ainsi, nous cherchons à estimer \mathbf{a} à partir des variables aléatoires \mathbf{s} , pour lesquelles $\mathcal{F}(\mathbf{a})$ correspond à leurs valeurs moyennes. Classiquement, la minimisation se fait sur le négatif du logarithme de la vraisemblance.

IV.3.2 Terme de régularisation

Ici, nous décomposerons les données spectrales dans une base de matériaux : tissus mous et os. Nous utiliserons le même terme de régularisation \mathcal{R} spatial que dans [\[26\]](#), soit :

$$\mathcal{R}(\mathbf{a}) = \|\Delta \mathbf{a}_{\text{tissus}}\|_2^2 + \|\nabla \mathbf{a}_{\text{os}}\|_2^2 \quad (\text{IV.14})$$

où ∇ et Δ sont les opérateurs différentiels du premier et second ordre, respectivement. Cela impose que les différences finies d'ordre 2 des tissus mous soient faibles, et donc que la solution \mathbf{a} soit très lisse. La projection des os étant moins uniformément répartie, la différence d'ordre 1 va être choisie. Nous utiliserons cette régularisation avec la divergence de KL et les MCP, la méthode avec le MV ne sera pas régularisée pour une meilleure comparaison avec l'état de l'art. Nous aurons donc les trois fonctionnelles suivantes qui seront à minimiser :

$$\mathcal{C}_{\text{MCP}}(\mathbf{a}) = \mathcal{D}_{\text{MCP}}(\mathbf{a}) + \alpha \mathcal{R}(\mathbf{a}) \quad (\text{IV.15})$$

$$\mathcal{C}_{\text{KL}}(\mathbf{a}) = \mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{a}) + \alpha \mathcal{R}(\mathbf{a}) \quad (\text{IV.16})$$

$$\mathcal{C}_{\text{MV}}(\mathbf{a}) = \mathcal{D}_{\text{MV}}(\mathbf{a}) \quad (\text{IV.17})$$

Nous remarquerons que les seules différences entre $\mathcal{C}_{\text{KL}}(\mathbf{a})$ et $\mathcal{C}_{\text{MV}}(\mathbf{a})$ sont l'ajout de régularisation pour le premier terme et l'algorithme de minimisation (Gauss-Newton et Nelder-Mead, respectivement). Les termes supplémentaires que nous pouvons trouver dans la divergence KL par rapport à MV ne dépendent pas de \mathbf{a} . En effet, nous avons :

$$\mathcal{D}_{\text{KL}}(\mathbf{a}) = \mathcal{D}_{\text{MV}}(\mathbf{a}) + \mathbf{s} (\log(\mathbf{s}) - 1) \quad (\text{IV.18})$$

La minimisation est donc la même du point de vue du terme d'attache aux données.

IV.4 Minimisation de la fonctionnelle

Les fonctions de coût $\mathcal{C}_{\text{MCP}}(\mathbf{a})$ et $\mathcal{C}_{\text{KL}}(\mathbf{a})$ seront minimisées par un algorithme itératif d'ordre 2 dit de Gauss-Newton (GN). Afin de se comparer à l'état de l'art, la fonctionnelle $\mathcal{C}_{\text{MV}}(\mathbf{a})$ sera minimisée par un algorithme de Nelder-Mead (NM).

IV.4.1 Algorithme de Gauss-Newton

Pour l'algorithme de GN la mise à jour sera celle d'une méthode itérative, telle que :

$$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k \quad (\text{IV.19})$$

où λ_k est le pas optimal et \mathbf{d}_k la direction de descente pour l'itération k . Elle sera calculée en utilisant le gradient et la Hessienne de la fonction de coût en résolvant le système linéaire :

$$\mathbf{H}_k \mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k \quad (\text{IV.20})$$

où \mathbf{g}_k et \mathbf{H}_k sont le gradient et la Hessienne de la fonction de coût à l'itération k , donnés par :

$$\mathbf{g}_k = \mathbf{g}_{k,\mathcal{D}} + \alpha \mathbf{g}_{k,\mathcal{R}} \quad (\text{IV.21})$$

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{H}_{k,\mathcal{D}} + \alpha \mathbf{H}_{k,\mathcal{R}} \quad (\text{IV.22})$$

où $\mathbf{g}_{k,\mathcal{D}}$, $\mathbf{g}_{k,\mathcal{R}}$, $\mathbf{H}_{k,\mathcal{D}}$ et $\mathbf{H}_{k,\mathcal{R}}$ désignent respectivement le gradient du terme d'attache aux données, du terme de régularisation et la Hessienne du terme d'attache aux données et de la régularisation. Le calcul des dérivés du terme de régularisation est détaillé dans ses généralités dans l'Annexe C. En notant $j = (m, p)$ et $l = (m, p)$, le gradient de \mathcal{D}_{MCP} est :

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{k,\mathcal{D}_{\text{MCP}},i} &= \frac{\partial}{\partial a_i} \sum_j (w_j [s_j - \mathcal{F}_j(\mathbf{a})])^2 \\ &= -2 \sum_j w_j \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i} w_j [s_j - \mathcal{F}_j(\mathbf{a})] \end{aligned} \quad (\text{IV.23})$$

et la Hessienne est :

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{k,\mathcal{D}_{\text{MCP}},i,l} &= \frac{\partial^2}{\partial a_i \partial a_l} \sum_j (w_j [s_j - \mathcal{F}_j(\mathbf{a})])^2 \\ &= \frac{\partial}{\partial a_i} \left(\sum_j -2w_j \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_l} w_j [s_j - \mathcal{F}_j(\mathbf{a})] \right) \\ &= \sum_j -2w_j^2 \frac{\partial^2 \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i \partial a_l} (s_j - \mathcal{F}_j(\mathbf{a})) + \sum_j 2 \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i} w_j^2 \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_l} \end{aligned} \quad (\text{IV.24})$$

Le gradient et la Hessienne de \mathcal{D}_{KL} sont donnés par :

$$\mathbf{g}_{k,\mathcal{D}_{\text{KL}},i} = \frac{\partial}{\partial a_i} \sum_j (s_j + \zeta) \log \frac{s_j + \zeta}{\mathcal{F}_j(\mathbf{a}) + \zeta} + \mathcal{F}_j(\mathbf{a}) - s_j \quad (\text{IV.25})$$

$$= \sum_j \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i} - \sum_j \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i} \frac{s_j + \zeta}{\mathcal{F}_j(\mathbf{a}) + \zeta} \quad (\text{IV.26})$$

et

$$\mathbf{H}_{k,\mathcal{D}_{\text{KL}},i,l} = \frac{\partial}{\partial a_i} \frac{\partial}{\partial a_l} \sum_j (s_j + \zeta) \log \frac{s_j + \zeta}{\mathcal{F}_j(\mathbf{a}) + \zeta} + \mathcal{F}_j(\mathbf{a}) - s_j \quad (\text{IV.27})$$

$$= \frac{\partial}{\partial a_l} \sum_j \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i} - \frac{\partial}{\partial a_l} \sum_j \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i} \frac{s_j + \zeta}{\mathcal{F}_j(\mathbf{a}) + \zeta} \quad (\text{IV.28})$$

$$= \sum_j \frac{\partial^2 \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i \partial a_l} - \sum_j \frac{\partial^2 \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i \partial a_l} \frac{s_j + \zeta}{\mathcal{F}_j(\mathbf{a}) + \zeta} + \sum_j \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_i} \frac{s_j + \zeta}{(\mathcal{F}_j(\mathbf{a}) + \zeta)^2} \frac{\partial \mathcal{F}_j(\mathbf{a})}{\partial a_l} \quad (\text{IV.29})$$

Les gradients peuvent se mettre sous la forme :

$$\mathbf{g}_{k,\mathcal{D}} = \mathbf{J}^T \mathbf{Z}_g (\mathbf{s} - \mathcal{F}(\mathbf{a}_k)) \quad (\text{IV.30})$$

où \mathbf{J} est la Jacobienne du problème direct. En utilisant l'approximation de Gauss-Newton (supprimant les termes de dérivées seconde $\partial^2/\partial\theta$), la Hessienne s'écrit :

$$\mathbf{H}_{k,\mathcal{D}} = \mathbf{J}^T \mathbf{Z}_h \mathbf{J} \quad (\text{IV.31})$$

où \mathbf{Z}_g et \mathbf{Z}_h sont des matrices dépendant du terme d'attache aux données. Elles sont définies comme :

$$\text{MCP} : \begin{cases} \mathbf{Z}_g &= 2\mathbf{W}^T \mathbf{W} \\ \mathbf{Z}_h &= 2\mathbf{W}^T \mathbf{W} \end{cases}, \text{KL} : \begin{cases} \mathbf{Z}_g &= \mathbf{Y}^{-1} \\ \mathbf{Z}_h &= \mathbf{Y}^{-2} \mathbf{S} \end{cases}$$

où $\mathbf{Y} = \text{diag}(\mathcal{F}(\mathbf{a}) + \zeta)$ et $\mathbf{S} = \text{diag}(\mathbf{s} + \zeta)$, avec $\text{diag}(\mathbf{x})$ est une matrice diagonale avec les éléments du vecteur \mathbf{x} . L'Algorithme 3 décrit chaque itération pour minimiser \mathcal{C} et ainsi trouver \mathbf{a} .

Algorithme 3 : Algorithme de Gauss-Newton

$k = 1$

tant que *Les critères d'arrêt ne sont pas satisfaits* **faire**

 % Calcul du gradient de la fonction de coût

$\mathbf{g}_k = \mathbf{g}_{k,\mathcal{D}} + \alpha \mathbf{g}_{k,\mathcal{R}}$

 % Calcul de la Hessienne de la fonction de coût

$\mathbf{H}_k = \mathbf{H}_{k,\mathcal{D}} + \alpha \mathbf{H}_{k,\mathcal{R}}$

 % Résoudre le système linéaire pour trouver le pas de Newton

$\mathbf{H}_k \mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k$

 % Calcul du pas optimal par LineSearch

$\lambda_k = \underset{\lambda}{\text{argmin}} \mathcal{C}(\mathbf{a}_k + \lambda \mathbf{d}_k)$

 % Mise à jour de la solution

$\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$

fin

IV.4.2 Algorithme de Nelder-Mead

La fonction de coût \mathcal{C}_{MV} sera minimisée par un algorithme de Nelder-Mead, ou algorithme du simplexe. Ceci est fait pour se comparer au mieux à l'état de l'art. Cette méthode est décrite au chapitre précédent et détaillée sur l'Algorithme 1.

IV.5 Simulations numériques

IV.5.1 Génération des données spectrales

La décomposition des données spectrales se fera sur une souris, DigiMouse (section III.2.2), où nous considérerons deux matériaux : tissus mous et os ($M = 2$). Le détecteur à comptage

de photons simulé sera composé de $I = 3$ plages d'énergies. Enfin, le spectre $n^0(E)$ utilisé a été généré par le logiciel SpekCalc de Poludniowski *et al.* (2009). Le rapport signal sur bruit des données dépend du nombre de photons reçus par le détecteur, c'est-à-dire du nombre de photons en sortie de la source. Nous noterons le nombre de photons qui sort de la source à une énergie E

$$N^0 = \sum_{j=1}^J n^0(e_j) \quad (\text{IV.32})$$

Afin de contrôler l'approximation gaussienne du bruit dans les données, ce nombre sera échantillonné suivant $\log_{10} N^0 = [1.5, 1.6, \dots, 4]$. De cette manière, nous aurons un bruit qui ne pourra pas être approximé par un bruit gaussien pour un faible N^0 et une approximation totalement justifiée pour un grand N^0 . Sur la figure IV.1, nous traçons le pourcentage de pixels vérifiant l'approximation gaussienne en fonction de N^0 pour ces données.

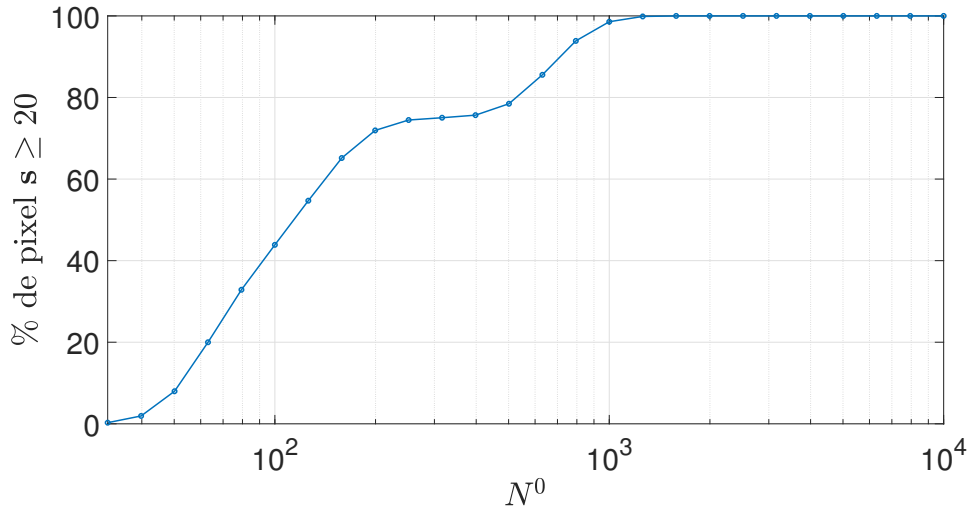


FIGURE IV.1 – Approximation du bruit poissonnien en bruit gaussien en fonction du nombre de photons envoyés N^0 .

IV.5.2 Évaluation des résultats

Nous utiliserons les métriques d'évaluation décrites section III.3, qui sont l'erreur quadratique moyenne et le SSIM dans le domaine des projections et du volume.

IV.5.3 Paramètres de l'algorithme de minimisation

L'algorithme de minimisation de Gauss-Newton itère tant que certains critères d'arrêt ne sont pas satisfaits. Nous l'arrêterons s'il dépasse $k_{\max} = 150$ itérations, si le pas optimal est plus petit que $\lambda_{\min} = 5 \cdot 10^{-3}$ ou si la décroissance de la fonction de coût est plus petite que $\delta \mathcal{C}_{\min} \leq 10^{-3}$, où

$$\delta \mathcal{C}_{\min} = 1 - \frac{\mathcal{C}_{k+1}}{\mathcal{C}_k} \quad (\text{IV.33})$$

L'algorithme du simplexe sera effectué avec la toolbox *Optimization* de Matlab en utilisant la fonction `fminsearch`, avec comme critère d'arrêt $k_{\max} = 400$ itérations.

La solution initiale \mathbf{a}_0 est composée de cartes uniformes de 2 g.cm^{-2} et 0 g.cm^{-2} pour les tissus mous et les os, respectivement.

IV.5.4 Choix de l'hyperparamètre

Dans cette étude, nous utiliserons un grand nombre de valeurs pour le paramètre de régularisation α , ainsi nous aurons $\log_{10} \alpha = [-2, -1.8, \dots, 4]$, et ce pour chaque angle θ . Afin d'avoir la meilleure décomposition à chaque angle, nous choisirons le paramètre de régularisation tel que :

$$\hat{\alpha}_\theta = \underset{\alpha}{\operatorname{argmin}} \xi_{\theta,\alpha} \quad (\text{IV.34})$$

où

$$\xi_{\theta,\alpha} = \frac{1}{M} \sum_m \frac{\|\mathbf{a}_{m,\theta}^\alpha - \mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}\|_2^2}{\|\mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}\|_2^2} \quad (\text{IV.35})$$

Nous noterons également pour la suite :

$$\xi_\alpha = \mathbb{E}_\theta [\xi_{\theta,\alpha}] \quad (\text{IV.36})$$

la moyenne de $\xi_{\theta,\alpha}$ sur tous les angles où $\mathbb{E}_\theta [\]$ est l'espérance sur les angles θ .

IV.6 Décompositions bi-matériaux

IV.6.1 Influence du paramètre de régularisation

Nous commencerons par vérifier que pour chaque θ , nous avons bien le minimum de $\xi_{\theta,\alpha}$ accessible et ce pour chaque N^0 . Nous traçons donc sur la figure IV.2 l'erreur moyenne ξ_α et son écart-type, et ce pour deux $N^0 = \{10^{2.2}, 10^4\}$ (première et deuxième ligne, respectivement). Nous voyons à partir de ces graphes qu'il est possible d'obtenir un α pour lequel l'erreur sera minimale, qui sera noté $\hat{\alpha}$.

IV.6.2 Influence du nombre de photons incidents sur la décomposition

Nous allons maintenant étudier l'effet du changement du nombre de photons sur les décompositions pour $\hat{\alpha}$.

Évolution des métriques d'évaluation

Les décompositions ont été effectuées pour différents nombres de photons. La figure IV.3 représente la moyenne sur tous les angles de l'erreur quadratique moyenne $\xi_{\theta,\hat{\alpha}}$ et du SSIM en fonction du nombre de photons N^0 . Nous tracerons, en utilisant des barres d'erreurs, l'écart-type de $\xi_{\theta,\hat{\alpha}}$ et le SSIM. Les résultats sont représentés sur la figure IV.3. Nous pouvons voir que les deux algorithmes utilisant GN, mais surtout un terme régularisation, permettent d'obtenir une meilleure erreur et un meilleur SSIM, pour toutes les valeurs de N^0 . Nous pouvons surtout remarquer que GN-KL permet d'avoir une plus faible erreur (et plus grand SSIM) pour $N^0 < 10^3$. Si nous nous référons à la figure IV.1, cela correspond à la valeur où l'approximation n'est pas vérifiée pour tous les pixels. Pour $N^0 = 10^3$ photons envoyés par pixel, le pourcentage de

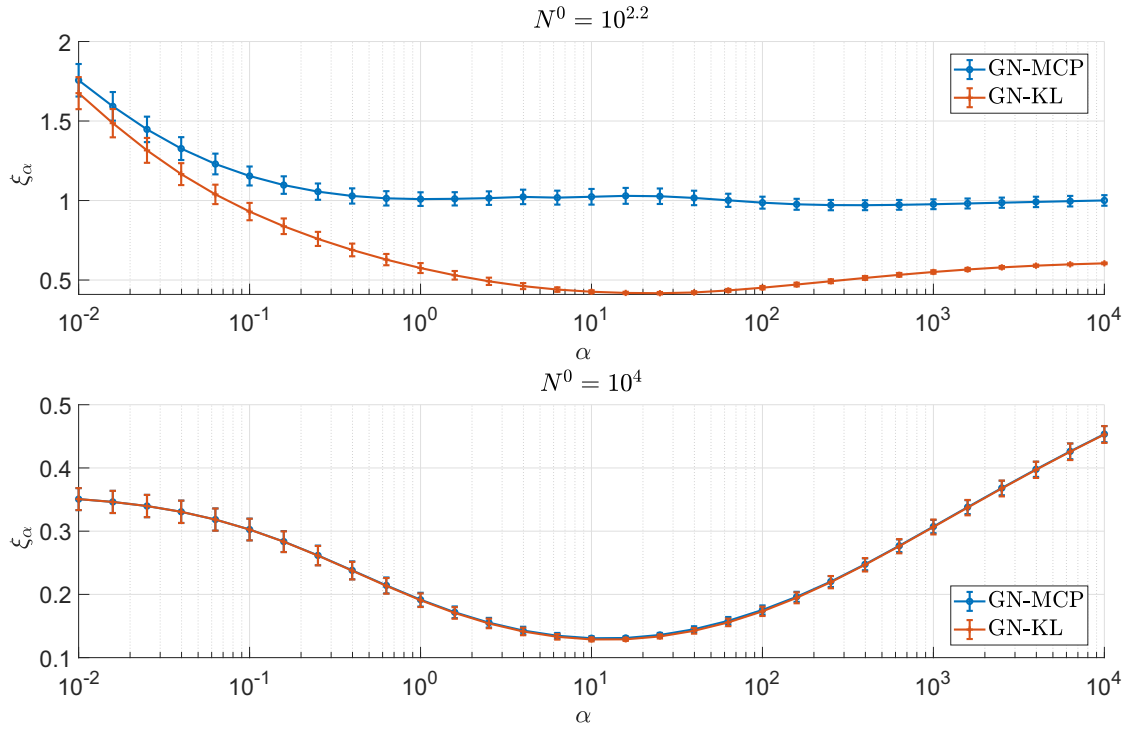


FIGURE IV.2 – Évolution de l'erreur moyenne en fonction du paramètre de régularisation α pour deux N^0 : $N^0 = 10^{2.2}$ en haut et $N^0 = 10^4$ en bas. Nous affichons l'espérance de $\xi_{\theta,\alpha}$ et son écart-type.

pixels vérifiant une approximation gaussienne est de 98 %. Nous pouvons également voir que pour $N^0 > 10^3$, l'approximation (IV.6) étant vérifiée, les deux termes d'attache aux données donnent les mêmes erreurs et SSIM. Les comportements de l'erreur quadratique et du SSIM sont similaires.

Influence sur la décomposition dans le domaine des projections

Les deux métriques d'évaluation montrent que GN-KL produit une plus faible erreur quadratique et un meilleur SSIM que GN-MCP et NM-MV. Il est également instructif d'examiner les images de cartes décomposées visuellement. Pour cela nous choisissons deux nombres de photons ($N^0 = 10^{2.2}$ et $N^0 = 10^4$). Sur la figure IV.4 nous montrons les cartes **a** pour $N^0 = 10^{2.2}$ pour $\theta = 0^\circ$ (IV.4a) et $\theta = 90^\circ$ (IV.4b). La première ligne est la vérité terrain (VT), la deuxième GN-MCP, la troisième NM-MV et la quatrième et dernière ligne GN-KL. Pour les images décomposées (hors vérité terrain), de gauche à droite : la carte de décomposition des tissus mous, la différence absolue entre la carte de tissus mous de l'algorithme et la VT, les os et la différence avec la VT. Les dynamiques de couleur des images sont les mêmes pour toutes les images d'un même matériau. Nous pouvons voir sur ces projections que NM-MV est très bruitée, nous distinguons certaines structures. Cependant, nous observons que le manque de régularisation donne lieu à des valeurs aberrantes pour certains pixels, ce qui se voit très bien sur l'image de différence où nous atteignons des valeurs de 10 à 30 g.cm⁻². La méthode GN-MCP donne des images beaucoup moins bruitées grâce à la régularisation, mais nous avons des images très lisses. De plus, l'image d'os n'est pas correctement décomposée. En effet, les valeurs sont très

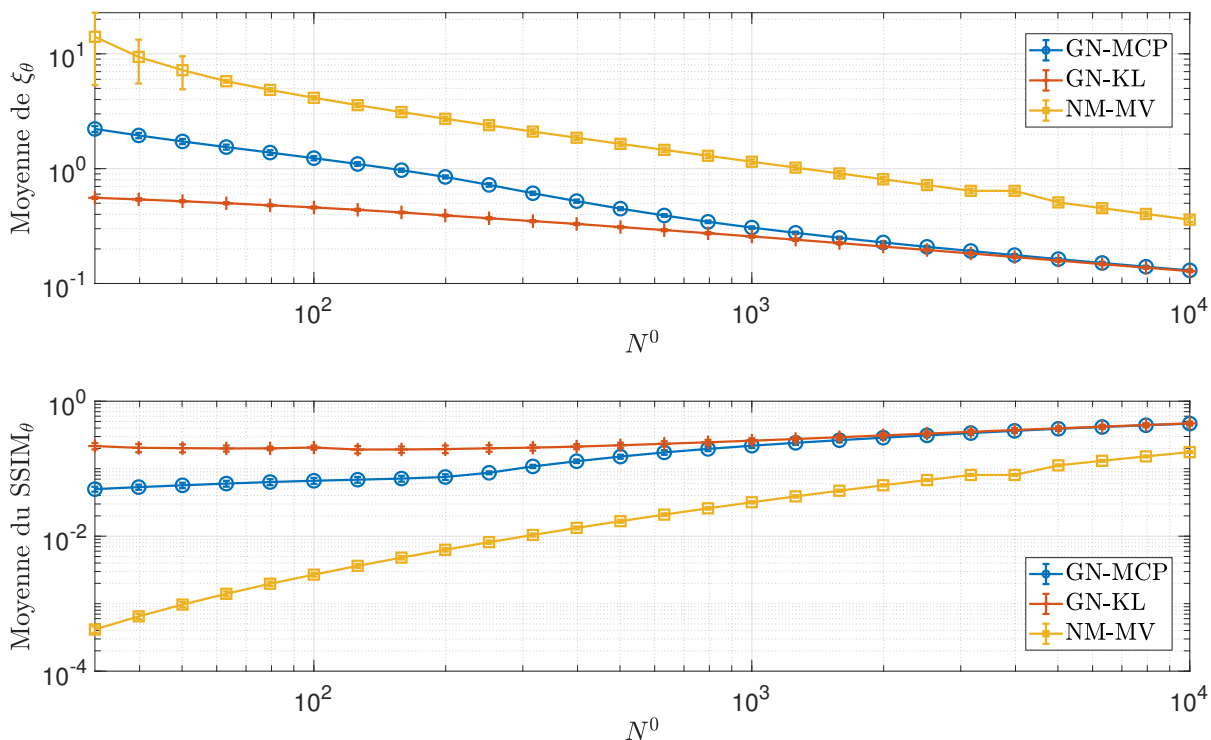


FIGURE IV.3 – Évolution de l'erreur ξ_θ (première ligne) et du SSIM (deuxième ligne) en fonction du nombre de photons pour NM-MV, GN-MCP et GN-KL

faibles par rapport à la VT. GN-KL permet quant à lui de retrouver des images peu bruitées et des cartes de matériaux fidèles à la VT. L'image de différence montre également que GN-KL est plus proche de la solution. Ces résultats sont compatibles avec l'évaluation quantitative. La figure IV.5 représente le cas $N^0 = 10^4$ photons/pixel. À ce nombre de photons, l'approximation gaussienne pour chaque pixel est vérifiée. Comme nous l'avons vu sur l'évaluation quantitative et qui se confirme, les cartes de densités de GN-MCP et GN-KL donnent les mêmes résultats pour les différentes métriques et quasiment les mêmes décompositions. Enfin, NM-MV donne des cartes bruitées et avec des pixels avec de fortes valeurs.

Comportement de l'algorithme en fonction du terme d'attache aux données

Nous avons montré que GN-KL donne de meilleurs résultats (ou des résultats équivalents) pour de faibles et de grands nombres de photons. La question maintenant est de savoir si cela se fait au détriment de la vitesse de convergence. C'est pourquoi nous représentons (Fig. IV.6) le nombre d'itérations moyen nécessaires pour atteindre la convergence pour tous les angles θ . Les barres d'erreurs correspondent à l'écart-type du nombre d'itérations. Nous pouvons voir que GN-KL converge plus rapidement ou à la même vitesse que GN-MCP, pour tous nombres de photons. GN-KL converge en moins d'itérations, mais nous pouvons nous demander si les itérations se valent en temps de calcul. C'est pourquoi, sur la figure IV.7 (à gauche), nous traçons le temps moyen (en secondes) nécessaire pour chaque algorithme à converger, la moyenne étant faite sur tous les angles et les barres d'erreurs représentant l'écart-type. Nous pouvons voir que GN-KL est plus rapide pour chaque nombre de photons N^0 , ce qui peut être normal, car il à

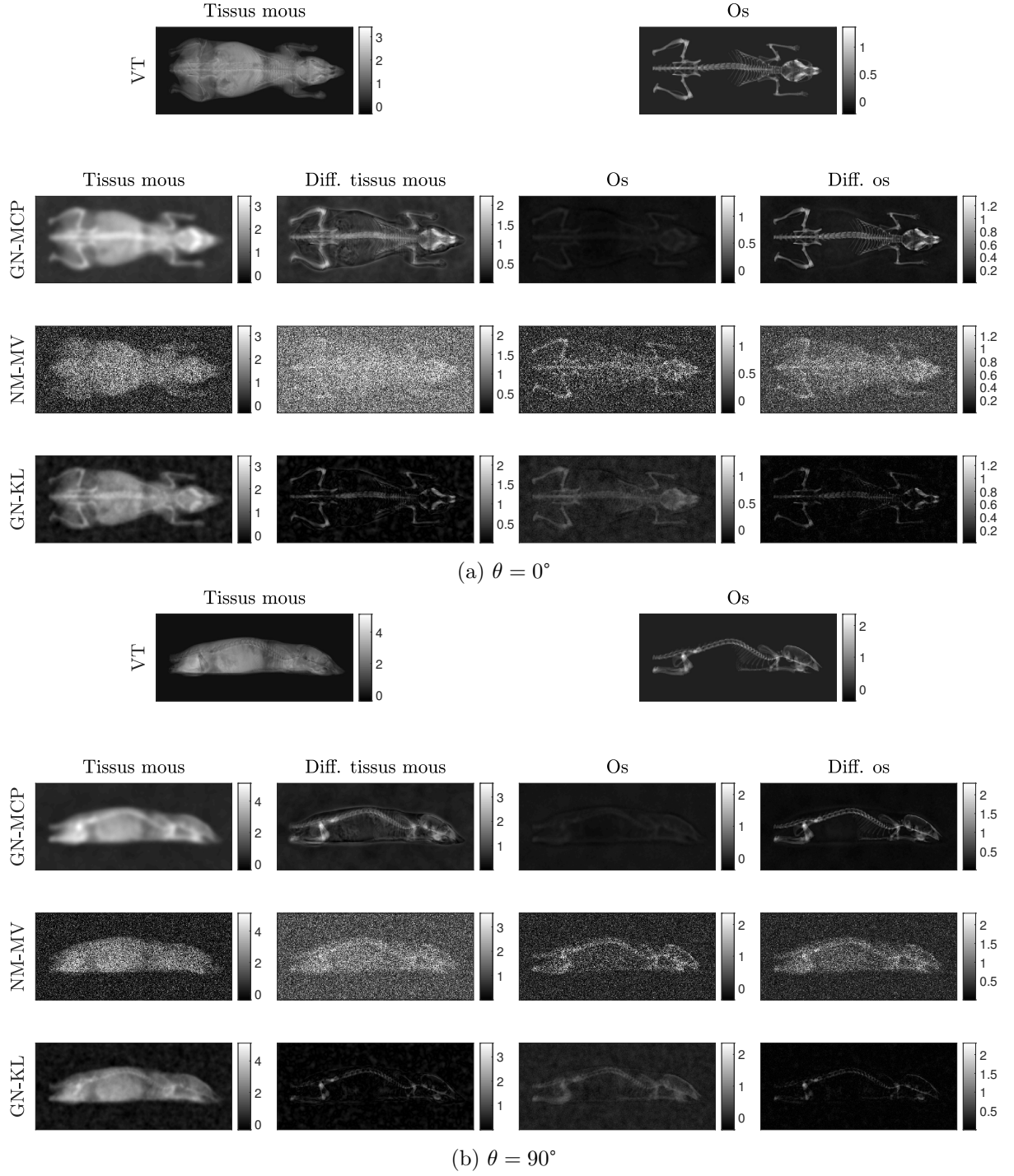


FIGURE IV.4 – Cartes de matériaux décomposées par différents algorithmes pour deux angles de projection $\theta = 0^\circ$ (a) et $\theta = 90^\circ$ (b) pour $N^0 = 10^{2.2}$. De haut en bas : Gauss-Newton moindres carrés pondérés (GN-MCP), Nelder-Mead maximum de vraisemblance (NM-MV) et Gauss-Newton Kullback-Leibler (GN-KL). De gauche à droite (pour ces dernières lignes) : tissus mous décomposés, différence entre les tissus mous et la VT, os décomposés et différences sur les os. La VT est montrée sur la première ligne.

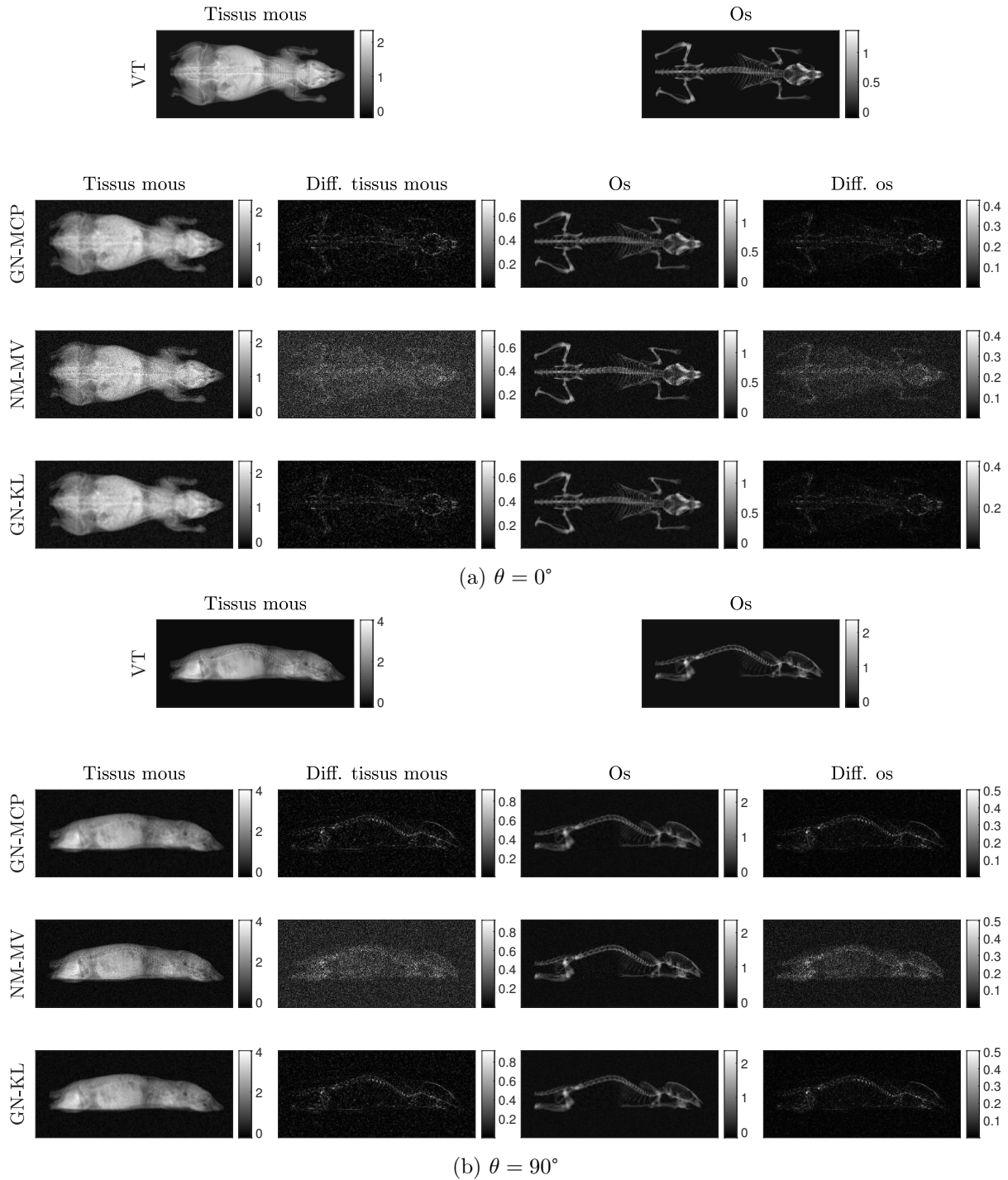


FIGURE IV.5 – Cartes de matériaux décomposées par différents algorithmes pour deux angles de projection $\theta = 0^\circ$ (a) et $\theta = 90^\circ$ (b) pour $N^0 = 10^4$. De haut en bas : Gauss-Newton moindres carrés pondérés (GN-MCP), Nelder-Mead maximum de vraisemblance (NM-MV) et Gauss-Newton Kullback-Leibler (GN-KL). De gauche à droite (pour ces dernières lignes) : tissus mous décomposés, différence entre les tissus mous et la VT, os décomposés et différences sur les os. La VT est montrée sur la première ligne.

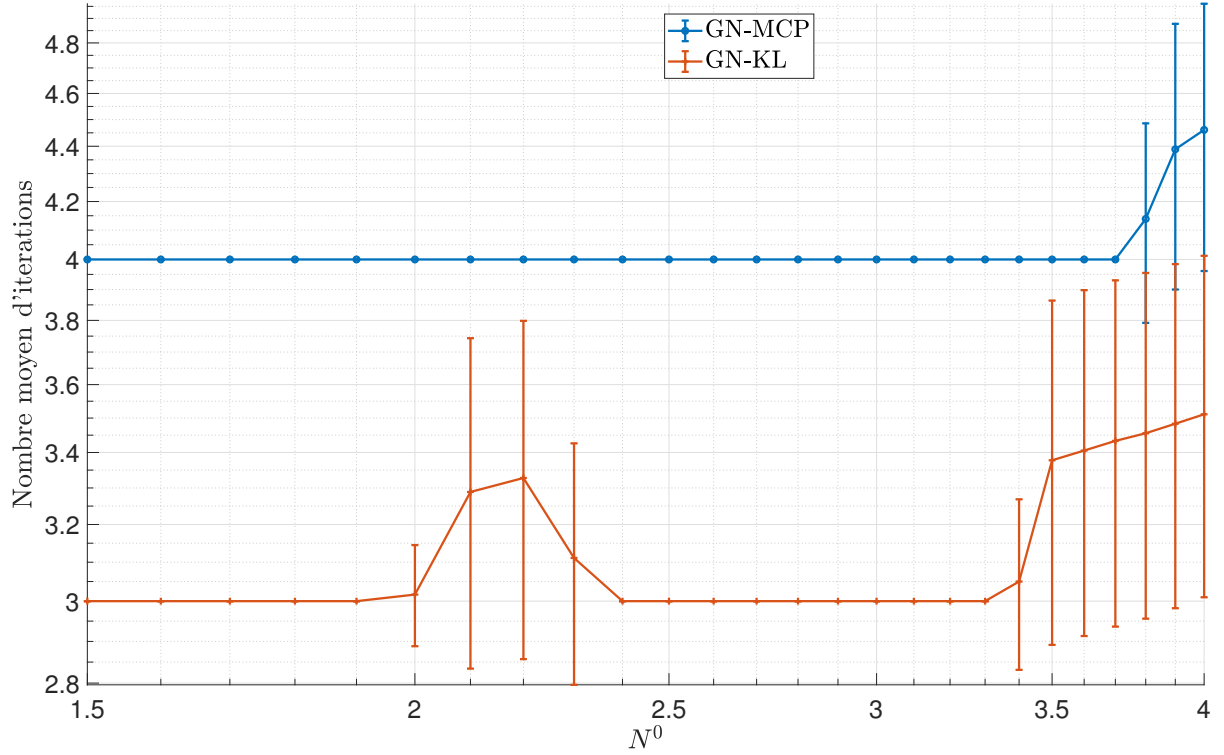


FIGURE IV.6 – Évolution du nombre d'itérations moyen sur les angles θ pour converger avec GN-MCP et GN-KL en fonction du nombre de photons N^0 . Les barres d'erreurs correspondent à l'écart-type du nombre d'itérations.

tendance à effectuer moins d'itérations. Sur la partie droite de la figure, nous montrons donc le temps moyen pour faire une itération pour chaque algorithme. Nous constatons que le temps est le même, la seule différence se faisant sur l'écart-type, qui est plus grand avec GN-KL.

IV.6.3 Reconstructions tomographiques des décompositions à différents N^0

Les données ont été décomposées dans les projections. Après reconstruction tomographique des projections décomposées, nous obtenons les volumes reconstruits pour chaque matériau.

Évolution des métriques d'évaluation

Nous traçons les métriques d'évaluation dans le volume sur la figure IV.8 pour les trois algorithmes en fonction de N^0 . Sur la première ligne, nous affichons la moyenne de ξ_z sur toutes les coupes et sur la deuxième, celle du SSIM, à gauche avec NM-MV et à droite sans. Nous pouvons voir que la différence entre GN-MCP et GN-KL est plus faible que ce qu'elle pouvait être dans le domaine des projections.

Comparaison des reconstructions tomographiques

Les images des volumes sont présentées de la même manière que les projections présentées précédemment. Avec la VT en première ligne, puis : GN-MCP, NM-MV et GN-KL. Avec les mêmes colonnes : tissus mous, différence sur les tissus mous, os et différence sur les os. Nous

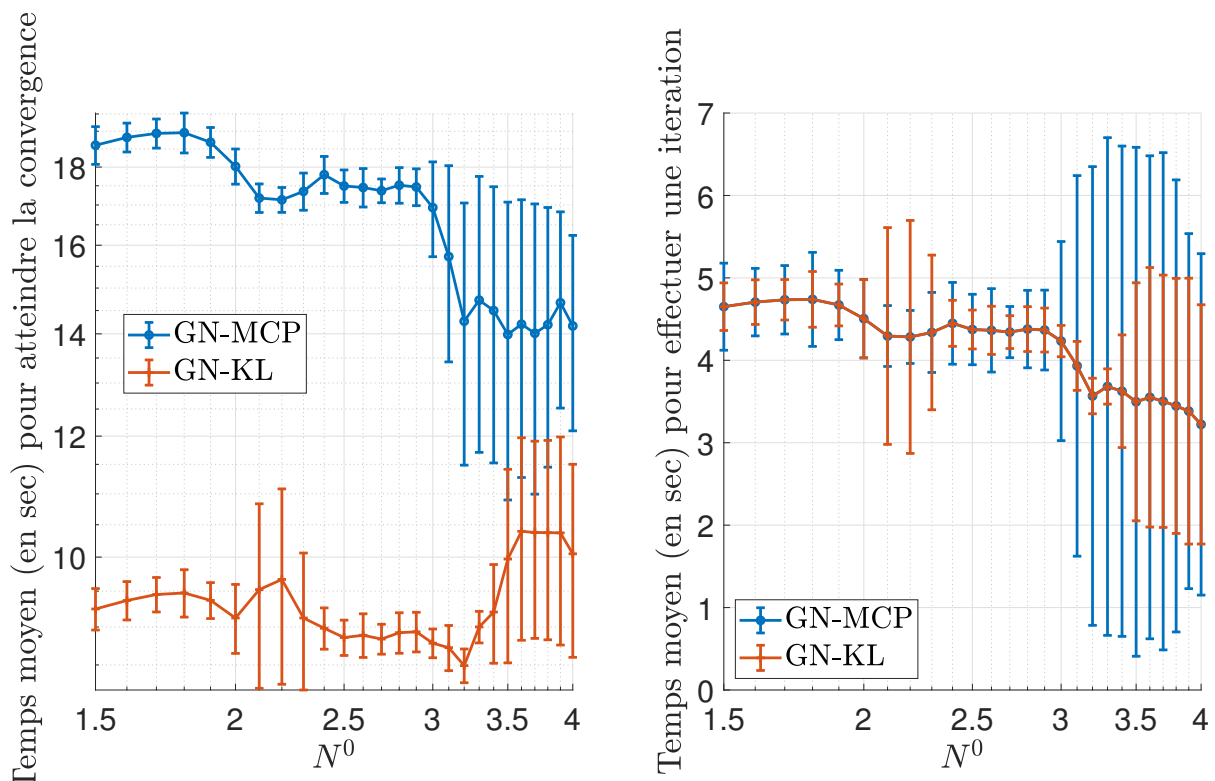


FIGURE IV.7 – Évolution du temps moyen (sur les angles) pour converger avec GN-MCP et GN-KL en fonction du nombre de photons N^0 . Les barres d'erreurs correspondent à l'écart-type du temps.

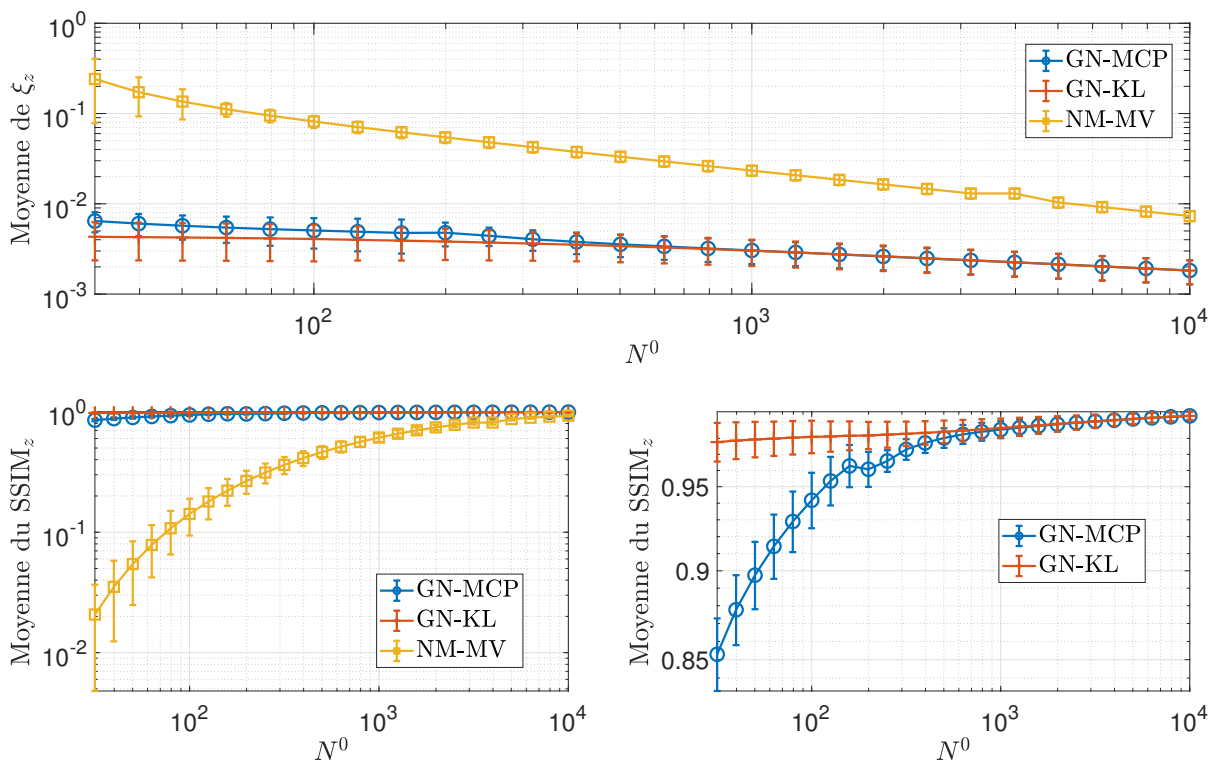


FIGURE IV.8 – Évolution des métriques d'évaluation sur les volumes en fonction de N^0 . L'erreur quadratique moyenne ξ_z sur la première ligne, sur la deuxième le SSIM.

montrons sur la figure IV.9 les coupes $z = 100$ (IV.9a) et $z = 248$ (IV.9b) pour $N^0 = 10^{2.2}$. Nous pouvons voir que les coupes avec NM-MV sont très bruitées à cause du bruit de décomposition élevé dans les projections, leurs valeurs se répercutant sur le volume lors de la reconstruction. Les images avec GN-KL sont plus nettes que GN-MCP, grâce à une meilleure estimation du bruit. Nous observons que la séparation des os et des tissus mous n'est pas effectuée, les os sont très présents dans le volume des tissus mous, c'est ce que nous appelons de la diaphonie. Sur les reconstruction à $N^0 = 10^4$ (Fig. IV.10), nous pouvons voir que la diaphonie diminue pour chaque algorithme, car le bruit est faible. NM-MV conduit à des reconstructions bruitées, tandis que les images obtenues par GN-MCP et GN-KL sont de meilleure qualité. Cela peut se voir grâce aux images de différences de la figure IV.10, qui nous montrent de faibles écarts par rapport à la VT.

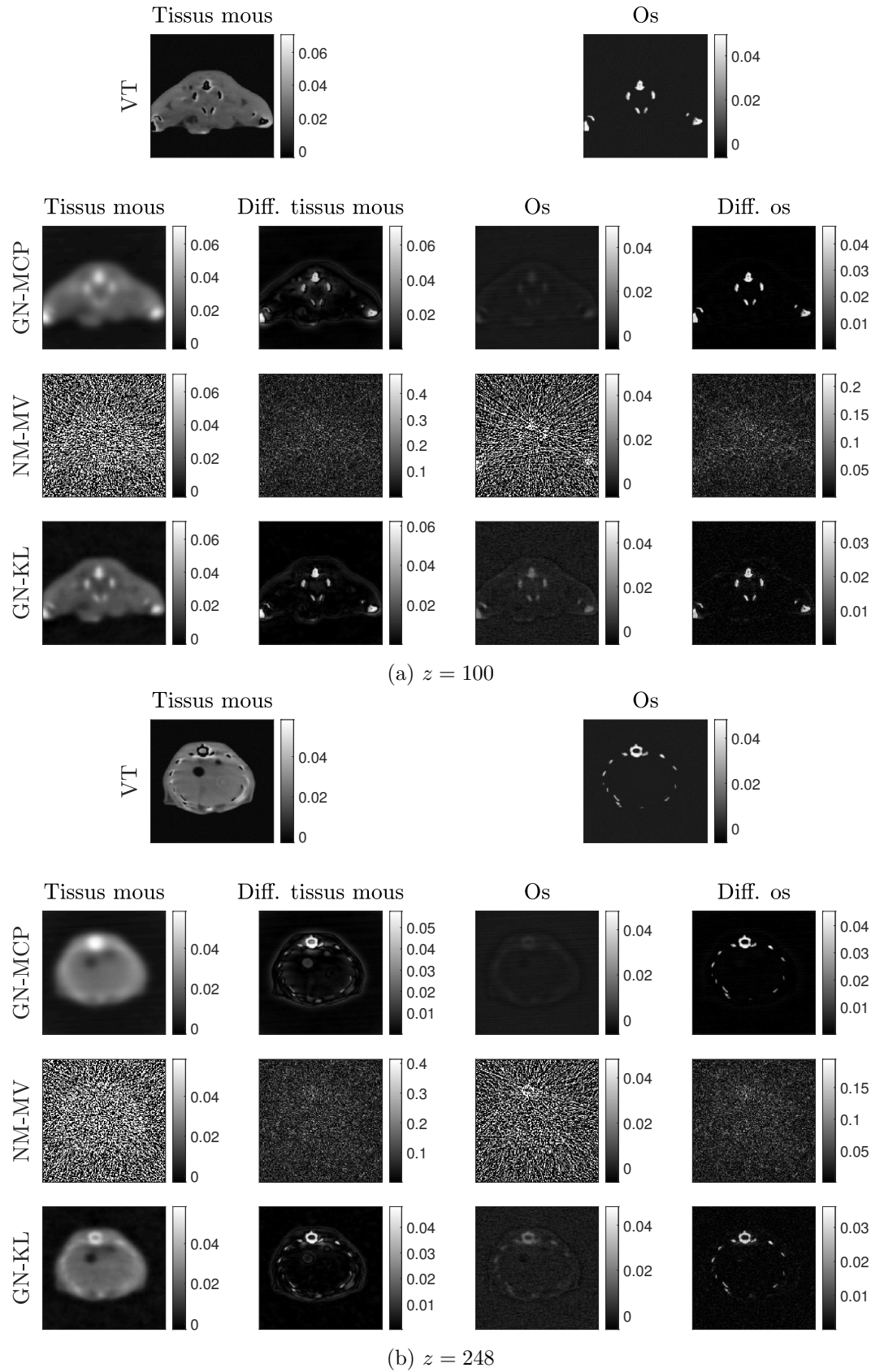


FIGURE IV.9 – Coupes de matériaux reconstruites par différents algorithmes pour deux coupes $z = 100$ et $z = 248$ pour $N^0 = 10^{2.2}$. De haut en bas : Gauss-Newton moindres carrés pondérés (GN-MCP), Nelder-Mead maximum de vraisemblance (NM-MV) et Gauss-Newton Kullback-Leibler (GN-KL). De gauche à droite (pour ces dernières lignes) : tissus mous décomposés, différence entre les tissus mous et la VT, os décomposés et différences sur les os. La VT est montrée sur la première ligne.

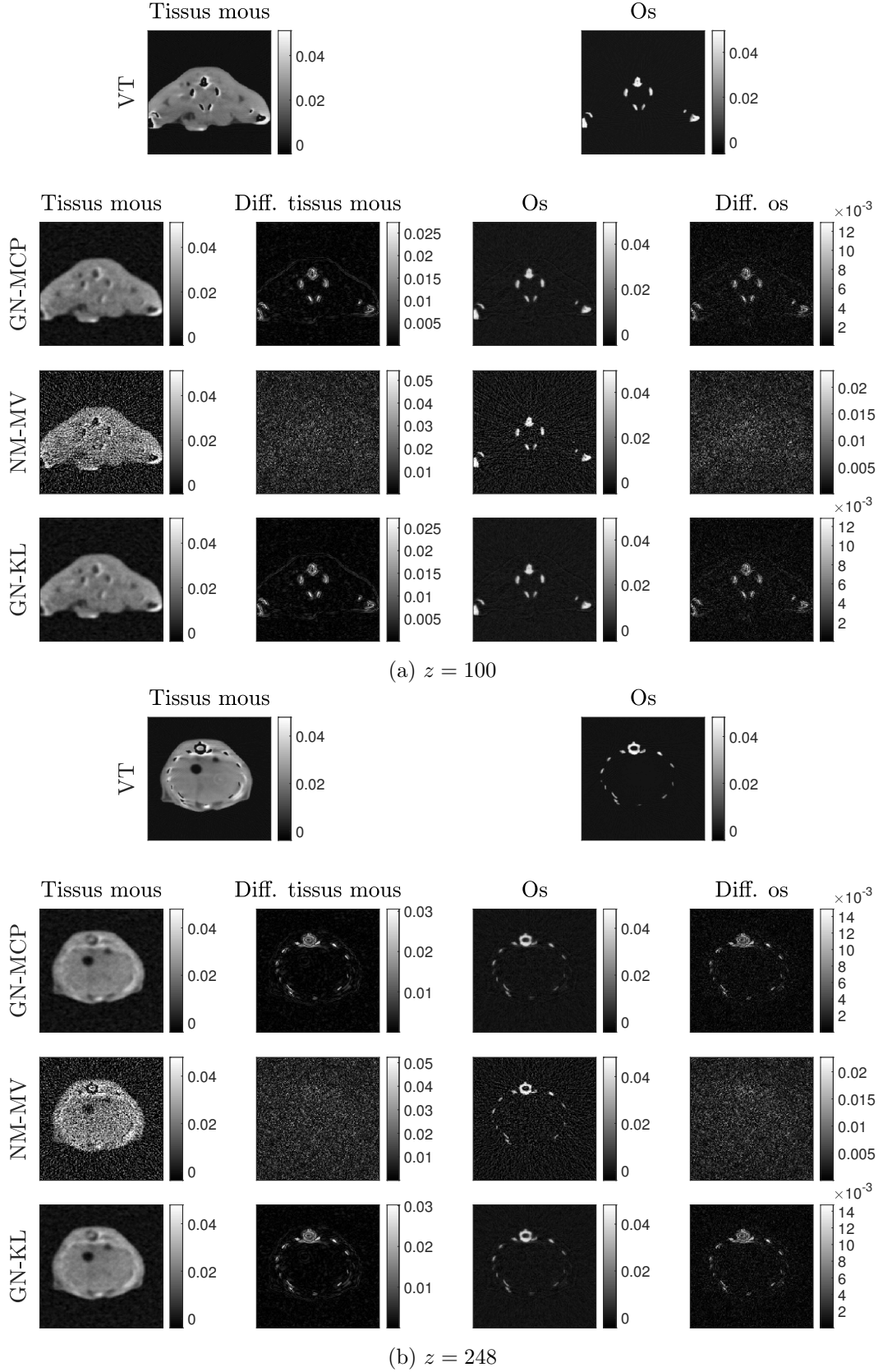


FIGURE IV.10 – Coupes de matériaux reconstruites par différents algorithmes pour deux coupes $z = 100$ et $z = 248$ pour $N^0 = 10^4$. De haut en bas : Gauss-Newton moindres carrés pondérés (GN-MCP), Nelder-Mead maximum de vraisemblance (NM-MV) et Gauss-Newton Kullback-Leibler (GN-KL). De gauche à droite (pour ces dernières lignes) : tissus mous décomposés, différence entre les tissus mous et la VT, os décomposés et différences sur les os. La VT est montrée sur la première ligne.

IV.7 Décompositions tri-matériaux

GN-KL nous permet d'obtenir une meilleure erreur que les méthodes classiques en présence d'un faible nombre de photons. Nous avons basé l'étude précédente sur un fantôme composé de deux matériaux. Ici, nous regardons s'il est possible d'en décomposer trois avec GN-KL. Nous utiliserons également DigiMouse, mais avec du gadolinium, un marqueur qui peut être injecté en pratique dans le cœur. Nous utiliserons les mêmes paramètres pour l'algorithme de minimisation que pour le bi-matériaux, avec comme terme de régularisation le terme suivant pour le gadolinium :

$$\mathcal{R}_{\text{gd}} = \|\nabla \mathbf{a}_{\text{gd}}\|_2^2 \quad (\text{IV.37})$$

La figure IV.11 présente les cartes décomposées pour $\theta = 90^\circ$ avec $N^0 = 10^4$ photons/pixel, données pour $\hat{\alpha}$. Nous envoyons suffisamment de photons pour que chaque pixel ait une valeur non-nulle (*i.e* $s_i(p) > 0 \forall p, i$). Nous observons que le marqueur (troisième colonne) "créé" un trou dans les images de tissus mous et d'os pour GN-KL. Lors des itérations, nous remarquons que la valeur du terme d'attache aux données diverge, ce qui donne des cartes décomposées mauvaises pour GN-KL. Les décompositions de GN-MCP sont quant à elles correctes et nous voyons les détails de l'os (cage thoracique, membres) et le gadolinium qui est bien reconstruit spatialement et quantitativement (nous pouvons le voir, car la dynamique des images est la même pour chaque colonne). Cette divergence vient du fait que les marqueurs sont très atténuants, c'est-à-dire que $\tau_{\text{gd}}(E)$ a de plus grandes valeurs par rapport à l'os et aux tissus. Pendant les itérations, la carte des matériaux \mathbf{a}_{gd} peut être surestimée, là où des pixels auront une plus grande valeur que ce que nous voudrions obtenir. Ainsi, le terme $\exp(-\sum_m \mathbf{a}_m \tau_m(E))$ va s'annuler, car $\mathbf{a}_{\text{gd}} \tau_{\text{gd}}(E)$ est grand, rendant l'obtention de cartes de matériaux correctes difficiles. L'algorithme va donc essayer de trouver un compromis en mettant beaucoup de gadolinium dans la carte de l'os et enlever des tissus mous pour que le modèle direct \mathcal{F} corresponde aux données \mathbf{s} . Cet effet est présent avec la divergence de Kullback-Leibler car ce terme est non-linéaire. Avec des moindres carrés pondérés, ce problème n'est pas présent car la non-linéarité est moins forte (le modèle direct \mathcal{F} n'apparaît pas dans un logarithme).

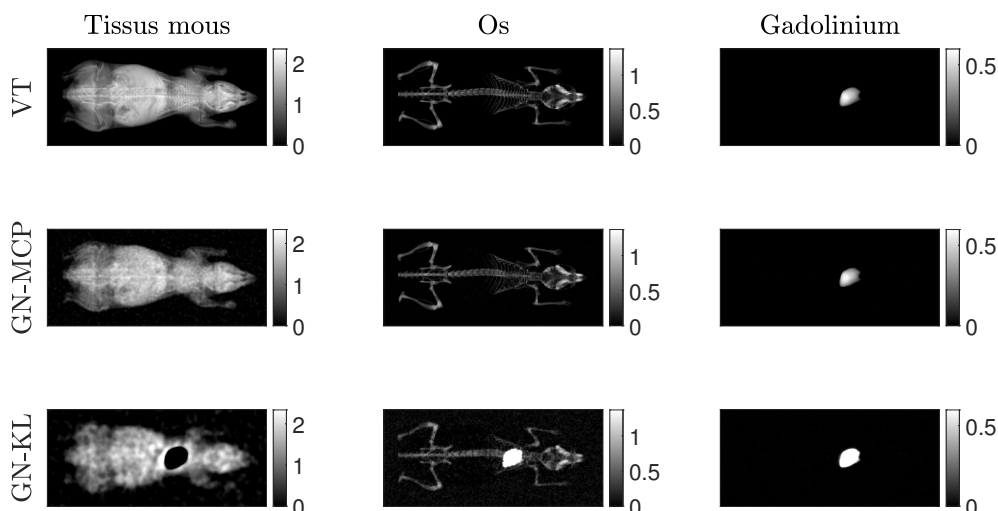


FIGURE IV.11 – Cartes de matériaux décomposées par différents algorithmes pour DigiMouse composée de trois matériaux pour $\theta = 90^\circ$ pour $N^0 = 10^4$. De haut en bas : Vérité terrain (VT), Gauss-Newton moindres carrés pondérés (GN-MCP) et Gauss-Newton Kullback-Leibler (GN-KL). De gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium décomposés.

IV.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que l'utilisation d'un terme d'attache aux données adapté au bruit de Poisson permettait d'obtenir de meilleurs résultats. Dans la littérature les méthodes classiques utilisent des moindres carrés pondérés qui ne traduisent pas la nature du bruit. Des méthodes avec le maximum de vraisemblance (qui rend compte du bruit) avait été proposées mais dans un cadre où l'algorithme de minimisation était lent et le problème non régularisé. Nous avons donc proposé d'utiliser la divergence de Kullback-Leibler qui tient compte de la nature poissonnienne du bruit. Nous avons décomposé une souris numérique, DigiMouse, en changeant le nombre de photons envoyés afin de gérer le bruit sur nos données. Nous avons décomposé les cartes de tissus mous et os pour différentes valeurs du paramètre de régularisation α et retenu la meilleure décomposition. Les résultats quantitatifs et qualitatifs montrent que le terme de la divergence de KL avec un algorithme de second ordre permet une meilleure décomposition du jeu de données à un fort bruit (quand tous les pixels subissent un bruit de Poisson). Pour un nombre de photons envoyés élevé, le terme de la divergence de KL donne la même décomposition qu'avec des moindres carrés pondérés, car le bruit en chaque pixel peut être approximé par un bruit gaussien. La reconstruction tomographique sur les projections montre que ces résultats se confirment dans le domaine de l'image. Ces résultats ont été faits pour une décomposition en deux matériaux de base. Une brève étude à été faite sur un fantôme composé de trois matériaux. Cela a pu montrer une instabilité de GN-KL à décomposer des marqueurs injectés. De ce fait, la méthode GN-KL est très bien adaptée pour la double énergie.

Chapitre V

Décomposition sous contraintes de positivité

Contents

V.1	Introduction	81
V.2	Algorithme de minimisation sous contraintes	81
V.2.1	Quasi-Newton projeté	82
V.2.2	Gauss-Newton projeté	82
V.3	Simulations numériques	84
V.3.1	Génération des données spectrales	84
V.3.2	Paramètres pour la décomposition	84
V.3.3	Évaluation des résultats	84
V.4	Décompositions sous contraintes fixes	85
V.5	Évolution des bornes	87
V.6	Décompositions sous contraintes évolutives	88
V.6.1	Convergence de l'algorithme	88
V.6.2	Influence de l'algorithme sur la reconstruction	88
V.7	Conclusion	94

Chapitre V

La décomposition dans le domaine des projections a pour objectif de récupérer \mathbf{a}_m^θ , qui correspond au poids pour chaque fonction $\tau_m(E)$. Ces fonctions décrivent des atténuations qui ont pour origine l'effet photoélectrique et l'effet Compton. Ces poids doivent donc être positifs, si la base créée par $\tau_m(E)$ est parfaite. Dans ce chapitre, nous souhaitons donc contraindre la solution à être positive.

Cette étude a été présentée à la conférence ISBI :

- **Hohweiller, T.**, Ducros, N., Peyrin, F., & Sixou, B. (2018). A constrained Gauss-Newton algorithm for material decomposition in spectral computed tomography. In 2018 IEEE 15th International Symposium on Biomedical Imaging (ISBI 2018) (pp. 336-339).

V.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons vu que la décomposition dans une base de matériaux permet d'avoir des volumes correspondant à la vérité terrain (VT). Cependant, l'un des intérêts de cette nouvelle modalité est l'utilisation de marqueurs. Ils permettent d'identifier des zones d'intérêt pour un diagnostic [71] et de connaître leurs quantifications à chaque position. La quantité décomposée dans les projections étant un poids correspondant à une base $\tau_m(E)$, ce poids décrit des grandeurs physiques. Si les bases définies $\tau_m(E)$ sont parfaites, c'est-à-dire qu'elles représentent tous les matériaux présents, ces poids devront être positifs. Dans ce chapitre, nous chercherons à introduire la contrainte de positivité sur les cartes de matériaux \mathbf{a}_m^θ . Des méthodes contraignant la solution ont déjà été proposées par [Noh et al. \(2009\)](#) dans le domaine des projections en utilisant des algorithmes d'ordre 1 (par *separable quadratic surrogates*). Cette contrainte a été proposée dans le domaine de l'objet ou dans la décomposition directe par [Long et Fessler \(2014\)](#); [Barber et al. \(2016\)](#). La vitesse de convergence étant importante, nous utiliserons un algorithme d'ordre 2 de type Gauss-Newton, qui va incorporer les contraintes sous forme d'une suite d'ensembles restrictifs. Afin que l'algorithme puisse converger, nous ferons évoluer cet ensemble.

Ces méthodes seront comparées sur un fantôme numérique de thorax composé de trois matériaux. Un algorithme d'ordre 0 (Nelder-Mead) et une version non contrainte de la méthode proposée seront comparés avec l'algorithme d'ordre 2 de type Gauss-Newton contraint.

V.2 Algorithme de minimisation sous contraintes

Nous cherchons à reconstruire la carte des matériaux $\mathbf{a}^{\theta_n} = [\mathbf{a}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_m^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_M^{\theta_n}]$ pour chaque angle θ_n , où $\mathbf{a}_m^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$, avec P le nombre de pixels, M le nombre de matériaux et N le

nombre de projections. Dans ce chapitre, nous chercherons à contraindre cette solution. Cette décomposition se fera à partir des données $\mathbf{s}^{\theta_n} = [\mathbf{s}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_i^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_I^{\theta_n}]$, où $\mathbf{s}_i^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$ et I le nombre de plages d'énergies. Pour des raisons de visibilité, nous laisserons tomber l'indice θ_n , les méthodes développées se feront de manière identique pour tout θ . Afin de récupérer la carte \mathbf{a} , nous minimiserons la fonction de coût suivante :

$$\mathcal{C}(\mathbf{a}) \text{ s.t. } L_m \leq a_{m,p} \leq U_m, \forall m \forall p \quad (\text{V.1})$$

où L_m et U_m sont des bornes inférieures et supérieures pour le matériau m . Notons $\Omega_m = [L_m, U_m]^P$ et $\Omega = (\Omega_m)_{1 \leq m \leq M}$ l'ensemble dans lequel la solution \mathbf{a} sera contrainte.

V.2.1 Quasi-Newton projeté

Kim *et al.* (2010) ont proposé un algorithme itératif d'ordre 2 avec des contraintes de type boîte. L'idée est de séparer $a_m(p)$ en deux familles de variables [14] : libres et fixées. Le choix de ce partitionnement se fait grâce à l'information apportée par la première et la seconde dérivée de $\mathcal{C}(\mathbf{a}_k)$. Dans le cas des travaux de Kim *et al.* (2010), la Hessienne était approximée par BFGS (et L-BFGS), car elle n'était pas calculable. Un algorithme quasi-Newton projeté était donc utilisé. La mise à jour de la solution est faite itérativement de la manière suivante :

$$\mathbf{a}_{k+1} = \Pi_{\Omega}(\mathbf{a}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k) \quad (\text{V.2})$$

où Π_{Ω} est l'opérateur de projection sur l'ensemble Ω . Nous restons ici dans un cas général de contrainte de type boîte, c'est-à-dire avec des bornes inférieures et supérieures. Le cas de la positivité stricte n'est juste qu'un cas spécifique avec $L_m = 0$ et $U_m = \infty$.

V.2.2 Gauss-Newton projeté

Dans notre problème, nous avons accès à la Hessienne. Nous parlerons donc de Gauss-Newton projeté (GN-P). Le premier ensemble d'indice utilise seulement le gradient. Il est défini pour tout couple (m, p) par :

$$\mathcal{I}_k^1 = \{j | a_{j,k} = L_m \wedge g_{j,k} > 0, \vee, a_{j,k} = U_m \wedge g_{j,k} < 0\} \quad (\text{V.3})$$

où les symboles \wedge et \vee sont équivalents aux *et* et *ou* logique, respectivement. Cet ensemble correspond aux variables qui vont être fixées. Si la solution est sur l'une des bornes (*e.g* $a_{j,k} = L_m$), nous regardons si cette variable va revenir dans le domaine Ω à la prochaine itération en étudiant le signe du gradient. Après avoir enlevé les variables fixes du gradient (*e.g* $g_{j,k} = 0$ si $j \in \mathcal{I}_k^1$, créant $\bar{\mathbf{g}}_k$), nous calculons la première direction de descente en résolvant :

$$\mathbf{H}_k \bar{\mathbf{d}}_k = -\bar{\mathbf{g}}_k \quad (\text{V.4})$$

Des variables fixes sont encore présentes dans la direction de descente, car elles n'ont pas été enlevées de la Hessienne. Nous devons donc éliminer ces éléments de la manière suivante :

$$\tilde{\mathbf{d}}_{j,k} = \begin{cases} \bar{\mathbf{d}}_{j,k} & \text{si } j \notin \mathcal{I}_k^1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{V.5})$$

Nous pouvons maintenant utiliser la direction pour raffiner l'ensemble des variables fixes. Un deuxième ensemble va donc être calculé. Il est défini par :

$$\mathcal{I}_k^2 = \{j | a_{j,k} = L_m \wedge \tilde{\mathbf{d}}_{j,k} > 0, \vee, a_{j,k} = U_m \wedge \tilde{\mathbf{d}}_{j,k} < 0\} \quad (\text{V.6})$$

qui utilise la Hessienne contenue dans $\tilde{\mathbf{d}}_{j,k}$. Nous créons maintenant un ensemble regroupant tous les indices, tel que $\mathcal{I}_k = \mathcal{I}_k^1 \cup \mathcal{I}_k^2$.

Algorithme 4 : Algorithme de Gauss-Newton projeté avec bornes fixes

```

k = 1
j = (m, p)
tant que Les critères d'arrêt ne sont pas satisfaits faire
    % Calcul du gradient de la fonction de coût
     $\mathbf{g}_k = \mathbf{g}_{k,\mathcal{D}} + \mathbf{g}_{k,\mathcal{R}}$ 
    % Calcul de la Hessienne de la fonction de coût
     $\mathbf{H}_k = \mathbf{H}_{k,\mathcal{D}} + \mathbf{H}_{k,\mathcal{R}}$ 
    % Calcul le premier ensemble de variable
     $\mathcal{I}_k^1 = \{j | a_{j,k} = L_m \wedge g_{j,k} < 0, \vee, a_{j,k} = U_m \wedge g_{j,k} > 0\}$ 
    % Calcul de la première direction de descente
     $\bar{g}_{j,k} = \begin{cases} g_{j,k} & \text{si } j \notin \mathcal{I}_k^1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ 
    résoudre( $\mathbf{H}_k \bar{\mathbf{d}}_k = -\bar{\mathbf{g}}_k$ )
     $\tilde{d}_{j,k} = \begin{cases} \bar{d}_{j,k} & \text{si } j \notin \mathcal{I}_k^1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ 
    % Calcul du deuxième et troisième ensemble de variable
     $\mathcal{I}_k^2 = \{j | a_{j,k} = L_m \wedge \tilde{d}_{j,k} < 0, \vee, a_{j,k} = U_m \wedge \tilde{d}_{j,k} > 0\}$ 
     $\mathcal{I}_k = \mathcal{I}_k^1 \cup \mathcal{I}_k^2$ 
    % Calcul de la deuxième et dernière direction de descente
     $\hat{g}_{j,k} = \begin{cases} g_{j,k} & \text{si } j \notin \mathcal{I}_k \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ 
    résoudre( $\mathbf{H}^k \delta \hat{\mathbf{d}}_k = -\hat{\mathbf{g}}^k$ )
     $d_{k,j} = \begin{cases} \hat{d}_j^k & \text{if } j \notin \mathcal{I}^k \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ 
    % Calcul du pas optimal par LineSearch
     $\lambda_k = \underset{\lambda}{\operatorname{argmin}} \mathcal{C}(\mathbf{a}_k + \lambda \mathbf{d}_k)$ 
    % Mise à jour de la solution
     $\mathbf{a}_{k+1} = \Pi_{\Omega}(\mathbf{a}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k)$ 
    k = k + 1
fin

```

Nous devons maintenant faire comme précédemment : enlever les éléments dans le gradient, calculer la nouvelle direction de descente et enlever de cette dernière les éléments fixes. Nous aurons donc une direction de descente avec les éléments libres \mathbf{d}_k . Après avoir calculé le pas

optimal, nous pouvons procéder à la mise à jour (V.2) et ce de manière itérative, tant que les critères d'arrêt ne sont pas satisfaits. Cette méthode est décrite sur l'Algorithme 4. Dans les travaux de Kim, il est montré que pour des bornes fixes, si l'approximation de la Hessienne est (strictement) positive définie à chaque itération, la valeur de la fonction minimisée décroît à chaque itération et tout point d'accumulation de la suite des itérés est un point stationnaire. Dans nos simulations, nous avons observé que l'approximation de Gauss-Newton conduit à une matrice définie positive ce qui nous permet d'utiliser ces résultats.

V.3 Simulations numériques

V.3.1 Génération des données spectrales

Dans ce chapitre nous utiliserons le fantôme du thorax numérique composé de trois matériaux : tissus mous, os et gadolinium ($M = 3$) décrit en section III.2.2. Le détecteur est composé de $I = 4$ plages d'énergies.

V.3.2 Paramètres pour la décomposition

Les algorithmes seront basés sur les mêmes fonctionnelles. Le terme d'attache aux données, pour GN et GN-P, sera des MCP tels que :

$$\mathcal{D}(\mathbf{a}) = \|\mathbf{s} - \mathcal{F}(\mathbf{a})\|_{\mathbf{W}}^2 \quad (\text{V.7})$$

où \mathbf{W} est une matrice de pondération. Le terme de régularisation sera :

$$\mathcal{R}(\mathbf{a}) = \beta_{\text{tissus}} \|\Delta \mathbf{a}_{\text{tissus}}\|_2^2 + \beta_{\text{os}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{os}}\|_2^2 + \beta_{\text{gd}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{gd}}\|_2^2 \quad (\text{V.8})$$

Nous avons choisi les paramètres de régularisation β comme étant ceux qui minimisent l'erreur ξ_θ pour $\theta = 90^\circ$ (projection la plus bruitée) parmi plusieurs valeurs. Ainsi nous avons pour GN : $\beta = [0.1, 0.1, 1000]$ et pour GN-P : $\beta = [1, 0.001, 1000]$ pour les tissus mous, os et gadolinium, respectivement. La solution initiale sera mise à $\mathbf{a}_0 = [0, 0, 0]$. La boucle de minimisation de \mathcal{C} (Algorithme 4) sera arrêtée si le nombre d'itérations dépasse $k_{\max} = 150$, si la fonction n'évolue plus $\delta C_{\min} \leq 10^{-3}$ ou si le pas optimal calculé est plus petit que $\lambda_{\min} = 5.10^{-2}$. Les bornes de l'algorithme GN-P seront $L_m = 0 \text{ g.cm}^{-2}$ et $U_m = 100 \text{ g.cm}^{-2}$.

V.3.3 Évaluation des résultats

Les métriques d'évaluation utilisées seront l'erreur quadratique moyenne et le SSIM dans les projections et dans le volume décrits en section III.3.

L'étude de ce chapitre porte sur l'apport de la contrainte de positivité sur la décomposition des matériaux en TDMS. Pour cela, nous comparerons donc les algorithmes suivants : NM-MV, GN et GN-P. Sachant que les algorithmes utilisant Gauss-Newton ont des MCP comme terme d'attache aux données. Nous regarderons dans un premier seulement les décompositions pour $\theta = 90^\circ$, puis comme précédemment à $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$ et le volume pour différentes coupes à $z = \{1, 140\}$. Nous étudierons le comportement de l'algorithme en fonction de la méthode considérée en termes d'évolution de la fonction de coût et de l'erreur au cours des itérations k .

V.4 Décompositions sous contraintes fixes

La figure V.1 présente les cartes de matériaux pour une contrainte de positivité sur la décomposition d'un thorax. Nous pouvons voir que la carte des matériaux obtenue avec GN-P est complètement fausse par rapport à la vérité terrain affichée sur la première ligne. Cela vient du fait que la contrainte est très stricte dans l'algorithme présenté. Dès les premières itérations la borne est à 0 alors que les premières estimations de \mathbf{a} ont tendance à avoir des valeurs négatives. Ainsi, dans la suite, nous mettrons en place un algorithme pour faire évoluer les bornes inférieures.

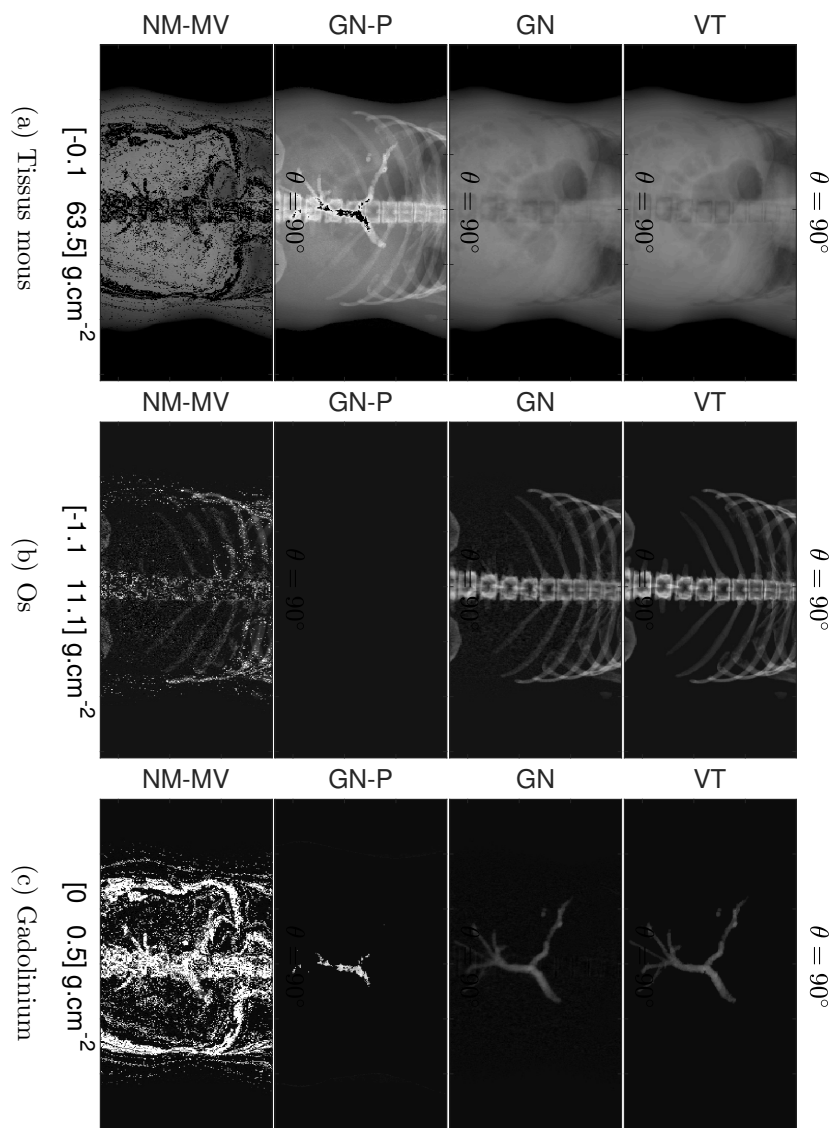


FIGURE V.1 – Décomposition du thorax avec un algorithme sous contraintes fixes, de gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium, pour $\theta = 90^\circ$. De haut en bas : vérité terrain (VT), Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV).

V.5 Évolution des bornes

L'algorithme précédent est décrit avec un ensemble Ω fixe. Cependant, le problème de minimisation n'est pas facile. Du fait de sa non-linéarité et non convexit , il est n cessaire d'utiliser une version plus souple de l'ajout des contraintes. Nous venons de voir qu'en utilisant l'algorithme pr c dent avec $\Omega = [0, \infty]$, la solution obtenue est compl tement fausse. C'est pourquoi nous allons incorporer la contrainte progressivement. Nous savons quelle doit  tre la valeur maximale que la borne inf rieure peut prendre : $L_m = 0$, mais nous ne connaissons pas la borne sup rieure. Nous choisirons donc de seulement faire  voluer la borne inf rieure au fur et   mesure des it rations. En notant $\ell_{m,k}$ la borne inf rieure pour le mat riau m   l'it ration k , l'ensemble associ  sera $\Omega_{m,k} = [\ell_{m,k}, U_m]$ et $\Omega_k = (\Omega_{m,k})_{1 \leq m \leq M}$. Nous cr erons une s quence telle que :

$$\Omega_0 \supset \Omega_1 \cdots \supset \Omega_k \supset \cdots \supset \Omega \quad (\text{V.9})$$

Chaque ensemble Ω_k est plus simple que Ω (II.4.2, [27]). L'id e est de changer Ω_k petit   petit pour que \mathbf{a}_{k+1} soit une bonne solution, c'est- -dire que Ω_k fasse sens vis- -vis de la solution. En partant de $\ell_{m,0}$   chaque it ration, la borne inf rieure va  tre mise   jour comme suit :

$$\ell_{m,k+1} = \min(\mathbf{a}_{m,k+1}, L_m) \quad (\text{V.10})$$

o  $\min(\mathbf{a}_{m,k+1}, L_m)$ rend le minimum entre la plus petite valeur contenue dans $\mathbf{a}_{m,k+1}$ et L_m . Il est n anmoins possible que $\ell_{m,k+1} = \ell_{m,k}$. Dans ce cas, la borne sera modifi e d'un pourcentage p_{\min} entre la borne   l'it ration k et l'objectif L_m . Enfin, si l'algorithme s'arr te alors que $\ell_{m,k} \neq L_m$, la borne inf rieure est forc e   L_m et une it ration de plus est faite pour s'assurer que la contrainte est respect e. Cela ne veut pas dire que l'algorithme s'arr te apr s cette it ration, il peut continuer si les autres crit res d'arr t ne sont plus satisfaits. L'Algorithme 5 d crit donc cette m thode avec les bornes  volutives. Le fait de faire  voluer les contraintes et donc la fonctionnelle au cours des it rations s'apparente aux m thodes d'homotopie ou de continuation. L'algorithme suivant o  une it ration de Gauss-Newton est effectu e avant la projection et la mise   jour des contraintes est celui qui donne les meilleurs r sultats num riques.

Nous allons donc utiliser le m me fant me num rique avec les m mes param tres que pr c demment, mais la borne inf rieure sera initialis e   $\ell_{m,0} = -50 \text{ g.cm}^{-2} \forall m$ et, si la valeur ne change pas sur deux it rations cons cutives, elle sera modifi e d'un pourcentage $p_{\min} = 20 \%$.

Algorithme 5 : Algorithme de Gauss-Newton projeté avec bornes évolutives

```
k = 1
tant que Les critères d'arrêt ne sont pas satisfaits faire
    % Calcul de la nouvelle solution avec l'algorithme 4
    % Mise à jour des bornes inférieures
     $\ell_{m,k+1} = \min(\mathbf{a}_{m,k+1}, L_m)$ 
    si  $\ell_{m,k+1} = \ell_{m,k}$  alors
        |  $\ell_{m,k+1} = \ell_{m,k} + p_{\min}|L_m - \ell_{m,k}|$ 
    fin
    si Les critères d'arrêt sont satisfaits  $\wedge \ell_{m,k+1} \neq L_m$  alors
        |  $\ell_{m,k+1} = L_m$ 
        | Une itération supplémentaire est effectuée
    fin
    k = k + 1
fin
```

V.6 Décompositions sous contraintes évolutives

V.6.1 Convergence de l'algorithme

Nous avons vu que GN-P donne des résultats, mais nous devons nous assurer que la fonction de coût est bien minimisée. Sur la figure V.2, nous montrons l'évolution de la valeur de la fonction de coût $\mathcal{C}(\mathbf{a})$ et de la valeur de la borne inférieure $\ell_{m,k}$ (gauche) et l'évolution de l'erreur ξ_θ (droite) au fil des itérations k pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$. Nous voyons deux comportements assez différents. L'algorithme GN va (légèrement) mieux minimiser la fonction de coût, car la solution est libre d'avoir n'importe quelle valeur et va donner la plus petite valeur. Cependant, ce faisant, l'erreur va augmenter après quelques itérations, car la solution ne correspond plus à la vérité terrain. GN-P va pour sa part minimiser la fonction de coût aussi bien qu'il le pourra avec une solution positive. Cela a pour effet de moins réduire $\mathcal{C}(\mathbf{a})$, mais va avoir tendance à minimiser l'erreur ξ_θ . Ces comportements se vérifient pour les deux angles θ . Le fait que l'erreur soit minimisée en priorité avec une solution positive confirme que la fonction de coût $\mathcal{C}(\mathbf{a})$ permet d'avoir une bonne solution mais pas la meilleure possible en elle-même.

V.6.2 Influence de l'algorithme sur la reconstruction

Résultats dans le domaine des projections

Sur la figure V.3, nous affichons les décompositions avec les trois algorithmes pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$. La dynamique de chaque matériau/angle est la même pour tous les algorithmes et est donnée en bas de chaque colonne. NM-MV nous donne beaucoup de pixels qui ont des valeurs très fortes et faibles, seule l'image de l'os paraît cohérente. Les décompositions avec GN et GN-P sont bonnes, elles correspondent bien à la VT affichée sur chaque première ligne. Cependant, la différence entre GN et GN-P (à part le fait que GN-P ne contient que des décompositions positives) est que ce dernier donne des images moins bruitées que GN. Cependant, dans les

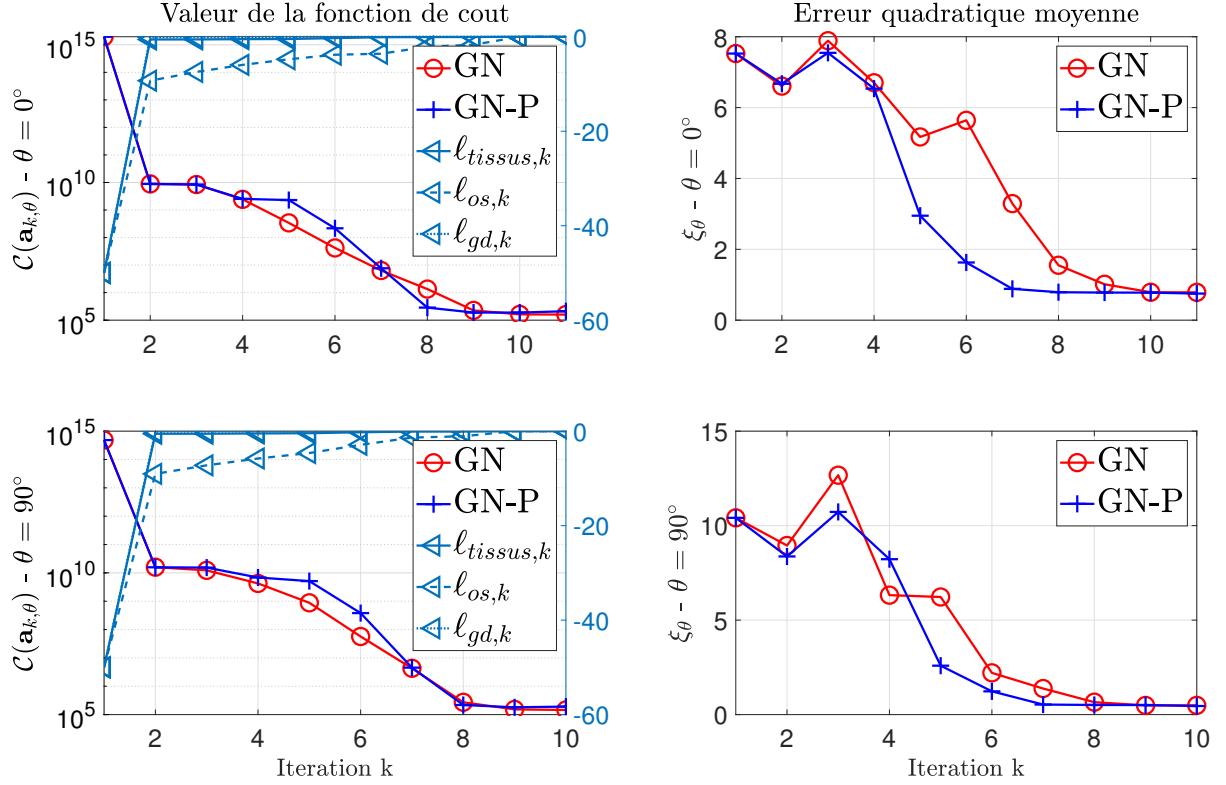


FIGURE V.2 – Évolution, pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$, de la fonction de coût et de la valeur de la borne inférieure $\ell_{m,k}$ (gauche), et de l'erreur quadratique moyenne ξ_θ (droite) pendant les itérations pour GN et GN-P.

décompositions avec GN-P, nous pouvons voir de la diaphonie alors qu'avec GN, cet effet est beaucoup moins présent. Le calcul des métriques d'évaluation ξ_θ et $SSIM_\theta$ montrent que des images bruitées, même si elles peuvent correspondre mieux à la vérité terrain, donnent de moins bonnes valeurs que des décompositions moins bruitées, même avec l'apparition d'un matériau sur une autre carte. La figure V.4 montre que GN-P et GN donnent une erreur ξ_θ quasiment similaire. Cependant GN-P a un meilleur SSIM pour tous les angles, car les décompositions sont plus fidèles à la VT. NM-MV donne de très mauvaises valeurs des métriques, comme attendu au vu des images. Les erreurs quadratiques moyennes de GN et GN-P sont assez proches. Cependant la différence du SSIM montre bien que les images correspondent mieux à la VT avec la contrainte de positivité.

Résultats dans le domaine de l'objet

Après reconstruction tomographique par rétroprojection filtrée, les métriques d'évaluation sont de nouveau calculées dans le domaine de l'objet. La figure V.5 montre l'erreur pour toutes les coupes z . La différence entre GN et GN-P est plus grande pour ξ_θ , mais légèrement diminuée pour le SSIM après la reconstruction. Cette tendance est confirmée par les coupes montrées en figure V.6 pour les coupes $z = 1$ et $z = 140$. La reconstruction des projections à partir de NM-MV est très mauvaise à cause de la faible qualité des décompositions initiales. La reconstruction avec GN-P nous donne de belles coupes, très peu bruitées, surtout comparées avec celles de GN. En haut à gauche des images des tissus mous et de l'os, un zoom est effectué autour

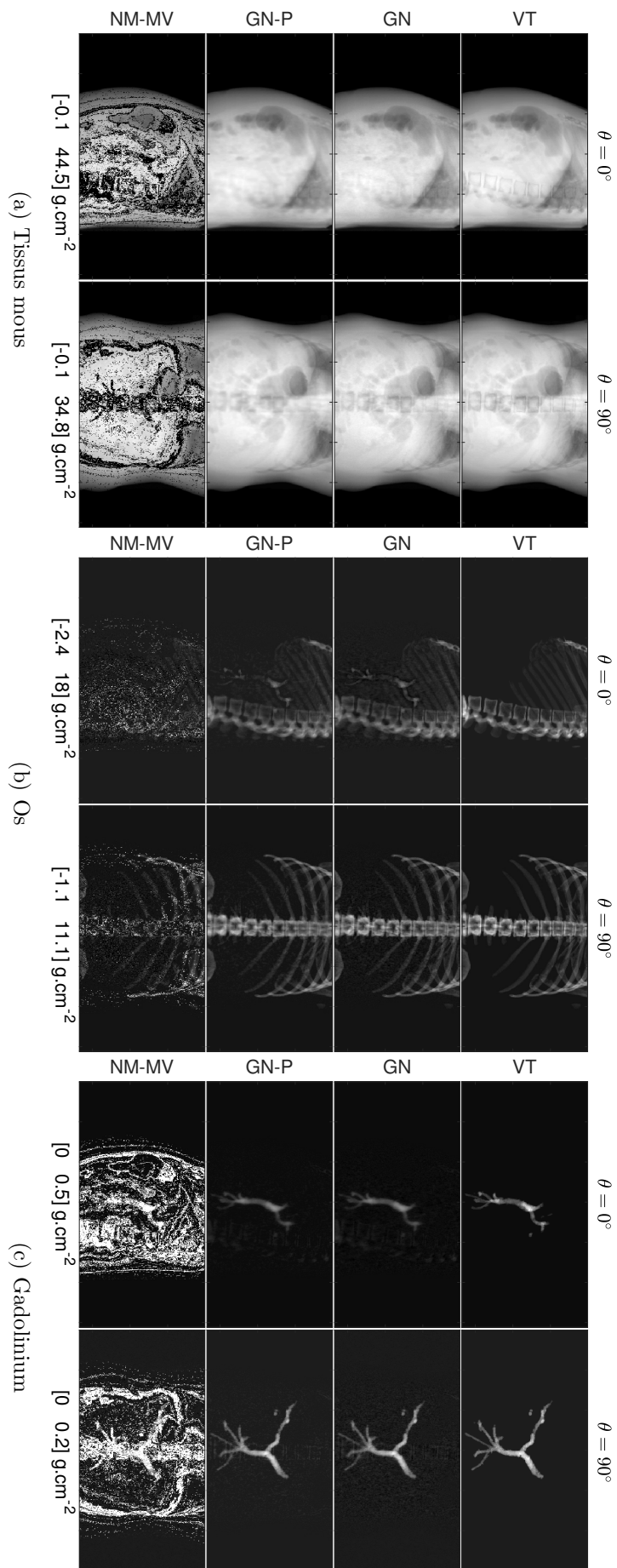


FIGURE V.3 – Carte des matériaux décomposés pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$. De gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium, et de haut en bas : vérité terrain (VT), Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV).

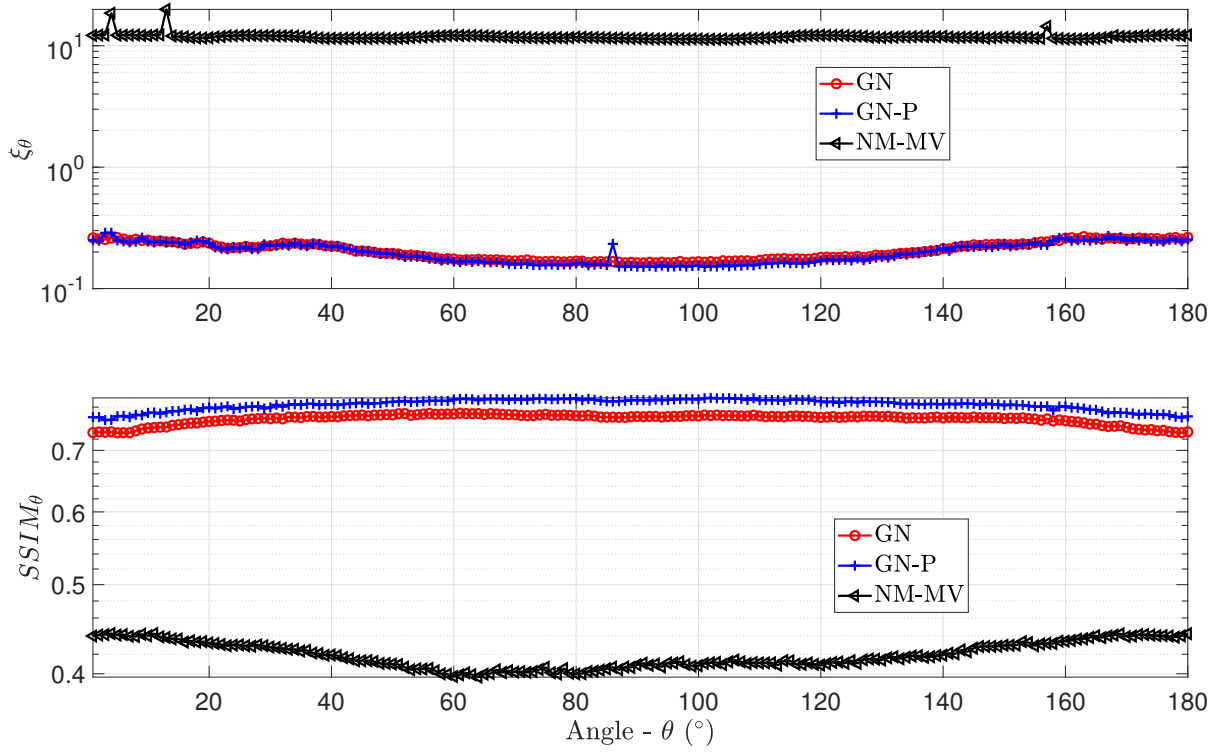


FIGURE V.4 – Erreur quadratique moyenne ξ_θ (première ligne) et le SSIM (deuxième ligne) dans les projections pour Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV) $\forall \theta$.

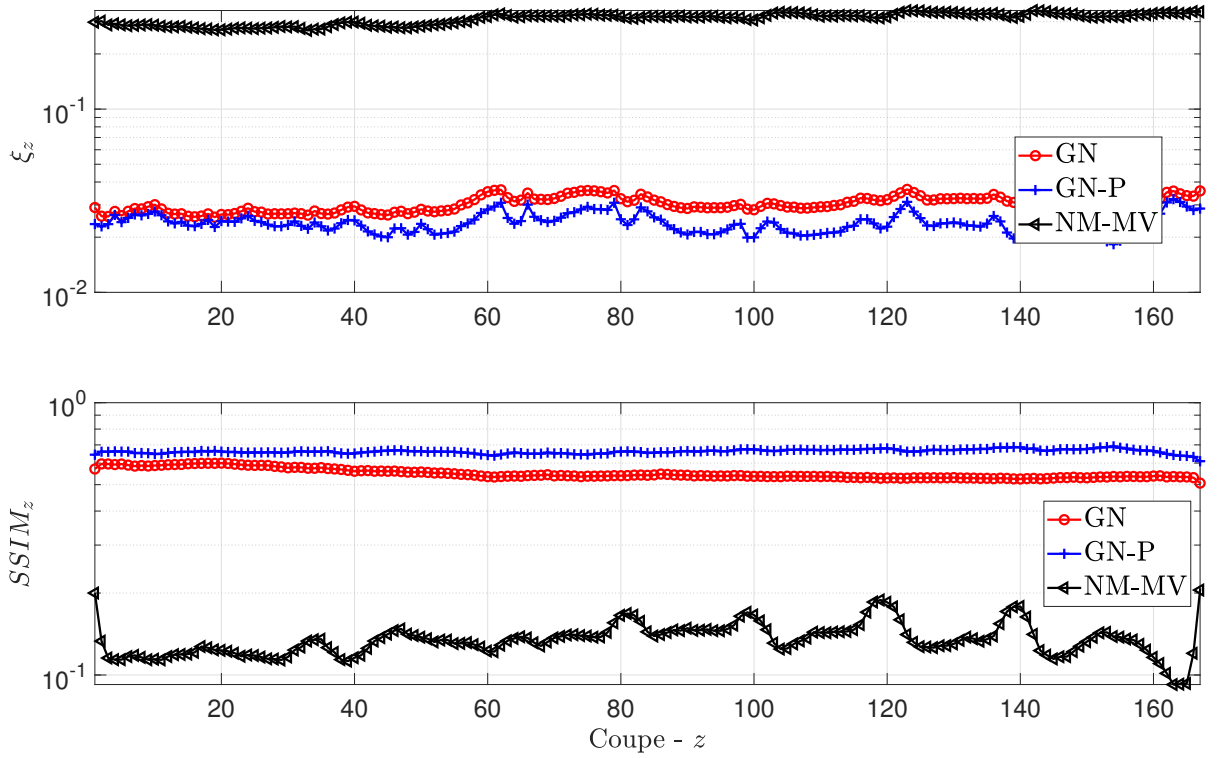


FIGURE V.5 – Erreur quadratique moyenne ξ_z (première ligne) et le SSIM (deuxième ligne) dans l'objet pour Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV), $\forall z$.

de la colonne vertébrale. Nous pouvons voir à partir de la VT que l'os est bien absent, nous distinguons également des détails comme les bronches, les bronchioles et l'aorte. Dans l'image de GN, ce zoom contient moins de contraste que la VT et nous distinguons peu l'aorte et les bronchioles, alors qu'avec GN-P, ces détails sont préservés. Les zones lisses à $z = 140$ sont également mieux rendues par GN-P, mais le faible contraste entre les différents tissus adipeux rend leur différenciation dans les reconstructions très compliquée. Nous pouvons voir que dans les coupes de l'os, sur le même zoom, l'image est moins bruitée et des détails apparaissent. La diaphonie cependant pollue l'image de GN-P dans les coupes de l'os et du gadolinium où nous devinons l'autre matériau.

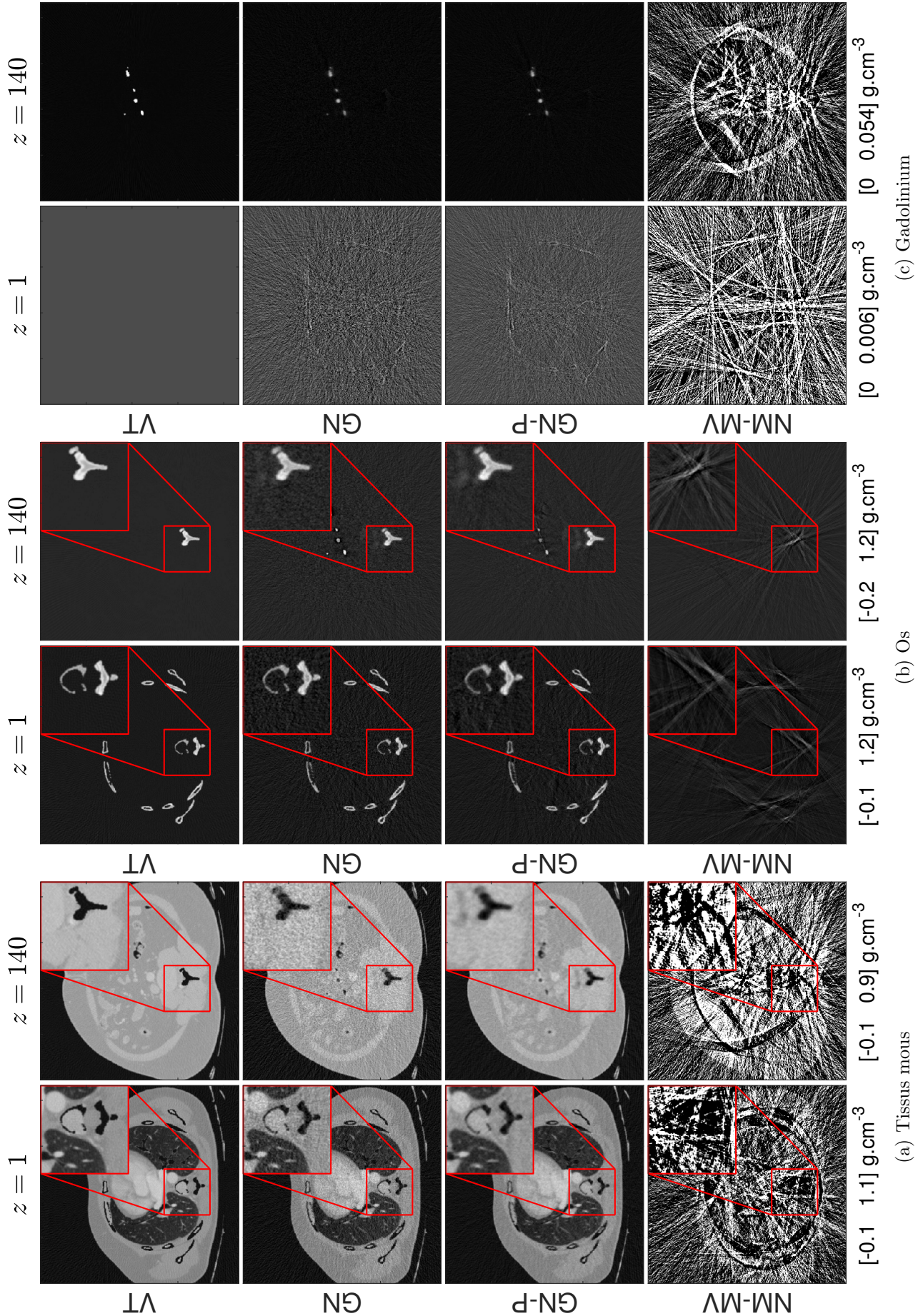


FIGURE V.6 – Cartes des matériaux reconstruits pour $z = \{1, 140\}$. De gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium, et de haut en bas : vérité terrain (VT), Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projété (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV).

V.7 Conclusion

Dans ce chapitre, avons développé un algorithme pour assurer la positivité de la solution dans le problème de décomposition en TDMS. Cette contrainte a été mise en place en adaptant un algorithme du second ordre permettant d'avoir une solution rapide. Nous avons vu que si la contrainte de positivité était mise dès la première itération, l'algorithme divergeait. C'est pourquoi la contrainte a dû être incorporée différemment. La borne inférieure de l'ensemble de contrainte évolue au fur et à mesure des itérations. Ce changement crée une succession d'ensembles plus simples pour résoudre le problème à chaque itération. Cette évolution a permis d'obtenir de bonnes décompositions. Nous n'avons pas de garanties de convergence de l'algorithme. Des pistes pourraient être les algorithmes Newton proximaux et les méthodes d'homotopie (Lee *et al.* (2012, 2014)). Si l'on s'en tient aux résultats numériques, cette méthode est tout de même intéressante dans la mesure où elle permet d'améliorer les décompositions.

Chapitre VI

Décompositions sous contraintes de positivité et d'égalité

Contents

VI.1	Introduction	97
VI.2	Décomposition des matériaux	98
VI.2.1	Contrainte d'inégalité	99
VI.2.2	Contrainte d'égalité	99
VI.2.3	Algorithme de minimisation	99
VI.3	Simulations numériques	102
VI.3.1	Génération des données spectrales	102
VI.3.2	Paramètres pour la décomposition	102
VI.3.3	Évaluation des résultats	102
VI.4	Résultats et discussions	103
VI.4.1	Influence de l'algorithme sur la reconstruction	103
VI.4.2	Influence de l'algorithme sur la diaphonie	104
VI.5	Conclusion	110

Chapitre VI

L'AJOUT d'une contrainte de positivité sur les cartes de matériaux nous a permis (chapitre V) d'obtenir de meilleures images qu'avec des algorithmes non contraints. Cependant, avec l'algorithme précédent (GN-P), nous pouvons voir sur les décompositions une forte diaphonie, l'apparition d'un matériau dans l'image d'un autre. Cet artefact se voit principalement dans les images reconstruites. Dans ce chapitre, nous proposerons d'ajouter une contrainte afin de limiter cet effet. L'incorporation de cette nouvelle contrainte se fera en utilisant un nouvel algorithme de minimisation.

Ces travaux ont été présentés lors de la conférence EUSIPCO :

- **Hohweiller, T.**, Ducros, N., Peyrin, F., & Sixou, B. (2018). An ADMM Algorithm for Constrained Material Decomposition in Spectral CT. In 2018 26th European Signal Processing Conference (EUSIPCO) (pp. 71-75). IEEE.

VI.1 Introduction

La décomposition des données spectrales en base de matériaux permet de reconstruire des volumes pour chaque matériau. Cependant, même si les reconstructions reflètent les cartes des matériaux décomposées, les projections peuvent être négatives. Dans le chapitre précédent, un algorithme imposant la positivité a été proposé et a montré que ce genre de méthodes améliore les résultats. Les images étaient moins bruitées et reflétaient plus fidèlement la vérité terrain (VT). Cependant, cela n'évite pas l'apparition de diaphonie, c'est-à-dire qu'un matériau est décomposé dans la mauvaise carte. Ce chapitre vise à développer une méthode pour contrer ce problème. Un aspect n'a pas encore été utilisé : la quantité de marqueur injectée. En effet, sous l'hypothèse que le marqueur est dans le champ de vue du détecteur, nous nous attendons à retrouver la même quantité totale de marqueur dans chaque projection. De ce fait, nous chercherons à incorporer une contrainte d'égalité. L'algorithme *Alternating Direction Method of Multipliers* (ADMM) est idéal pour la décomposition des matériaux, il permet d'incorporer des contraintes d'égalité et d'inégalité (Eckstein et Yao (2012); Wright et Nocedal (1999); Afonso et al. (2010, 2011); Ng et al. (2010)). Cette méthode permet de minimiser une fonctionnelle en utilisant des Lagrangiens pour respecter les différentes contraintes. De plus, la mise à jour des cartes de matériaux est faite par la méthode de notre choix, nous permettant d'utiliser un algorithme de Gauss-Newton que nous maîtrisons et qui est rapide. L'ajout d'une contrainte d'égalité a déjà été utilisée, mais dans le domaine image, par exemple sous forme de fraction totale avec Long et Fessler (2014) ou Ding et al. (2018), où ces derniers ont pu utiliser ADMM.

Afin de comprendre l'intérêt de cette méthode, la décomposition sera faite sur un thorax numérique composé de trois matériaux : tissus mous, os et gadolinium. La méthode proposée

sera comparée avec un algorithme de Gauss-Newton (ordre 2 non contraint), Gauss-Newton projeté (ordre 2 avec contrainte de positivité) et Nelder-Mead (ordre 0 non contraint).

VI.2 Décomposition des matériaux

Nous cherchons à récupérer la carte des matériaux contrainte $\mathbf{a}^{\theta_n} = [\mathbf{a}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_m^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_M^{\theta_n}]$ pour chaque angle θ_n , où $\mathbf{a}_m^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$, avec P le nombre de pixels, M le nombre de matériaux et N le nombre de projections. Cette décomposition se fera à partir des données $\mathbf{s}^{\theta_n} = [\mathbf{s}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_I^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_I^{\theta_n}]$, où $\mathbf{s}_I^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$ et I le nombre de plages d'énergies. Pour des raisons de visibilité, nous omettrons l'indice θ_n , les méthodes développées se feront de manière identique pour tout θ . Afin de récupérer la carte \mathbf{a} , nous résoudrons le problème suivant :

$$\min_{\mathbf{a}} \mathcal{C}(\mathbf{a}) \quad \text{s.t} \quad \begin{cases} \mathbf{a} \in \Omega \\ \sum_p a_m(p) = c_m \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(VI.1)} \\ \text{(VI.2)} \end{matrix}$$

où c_m est la quantité du matériau m que nous voulons retrouver dans la décomposition et où, dans notre cas, nous avons $\Omega = \mathbb{R}^+$. Comme dans le [chapitre V](#), la fonction de coût sera composée d'un terme d'attache aux données et du terme de régularisation tels que :

$$\mathcal{D}(\mathbf{a}) = \|\mathbf{s} - \mathcal{F}(\mathbf{a})\|_{\mathbf{W}}^2 \quad \text{(VI.3)}$$

$$\mathcal{R}(\mathbf{a}) = \beta_{\text{tissus}} \|\Delta \mathbf{a}_{\text{tissus}}\|_2^2 + \beta_{\text{os}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{os}}\|_2^2 + \beta_{\text{gd}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{gd}}\|_2^2 \quad \text{(VI.4)}$$

Nous faisons l'hypothèse que la quantité c_m est connue, constante pour tout θ et que la totalité du marqueur est visible sur tous les angles de projection. Le marqueur étant injecté, la quantité de celui-ci est connue. La contrainte d'égalité se portera donc uniquement sur l'indice m correspondant au gadolinium.

Dans le [chapitre V](#), GN-P nous a permis d'incorporer rapidement une contrainte d'inégalité (Équation (VI.1)), mais il ne nous permettra pas de gérer l'égalité (Équation (VI.2)). Pour ce faire, un algorithme dit ADMM sera utilisé, qui cherche à trouver le point selle permettant de minimiser une fonction de coût par des mise à jour successives. Les contraintes vont être incorporées directement dans la fonctionnelle. Chaque contrainte va être retranscrite comme une fonction à minimiser, ici \mathcal{H}_E , \mathcal{G}_E , \mathcal{H}_I , \mathcal{G}_I et δ_Ω . Chaque fonction doit respecter une condition : être nulle ou minimale si la contrainte associée est respectée. Ainsi, en suivant ce principe, la nouvelle fonction de coût à minimiser est un Lagrangien qui a pour expression :

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\nu}_I, \nu_E) &= \mathcal{D}(\mathbf{a}) + \mathcal{R}(\mathbf{a}) \\ &\quad + \mathcal{H}_E(\mathbf{a}, \nu_E) + \mathcal{G}_E(\mathbf{a}) \\ &\quad + \mathcal{H}_I(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\nu}_I) + \mathcal{G}_I(\mathbf{a}, \mathbf{b}) + \delta_\Omega(\mathbf{b}) \end{aligned} \quad \text{(VI.5)}$$

où \mathcal{H}_E et \mathcal{H}_I sont les termes associés aux contraintes d'égalité et d'inégalité, respectivement, les termes $\mathcal{G}_E(\mathbf{a})$ et $\mathcal{G}_I(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ représentent les termes associés aux contraintes d'égalité et d'inégalité, respectivement et $\delta_\Omega(\mathbf{b})$ est la fonction indicatrice sur l'ensemble Ω . Les multiplicateurs de Lagrange pour l'égalité et l'inégalité sont notés par $\nu_E \in \mathbb{R}$ et $\boldsymbol{\nu}_I \in \mathbb{R}^{MP}$. La variable $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{MP}$ est une variable auxiliaire servant à faire respecter la contrainte d'inégalité. La suite détaille ces fonctions pour chaque contrainte.

VI.2.1 Contrainte d'inégalité

Comme décrit par [Eckstein et Yao \(2012\)](#) (et montré dans l'équation (II.35)), l'incorporation d'une contrainte d'inégalité peut se faire par une fonction indicatrice. Or, imposer à \mathbf{a} d'appartenir à Ω ne permettra pas d'obtenir des décompositions correctes. Cela revient à utiliser l'algorithme précédent (GN-P) avec une borne fixe, ce qui n'a pas été concluant ([section VI.1](#)). C'est pourquoi une variable auxiliaire \mathbf{b} va être ajoutée afin de réécrire la contrainte $\mathbf{a} \in \Omega$ comme étant :

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad (\text{VI.6})$$

$$\mathbf{b} \in \Omega \quad (\text{VI.7})$$

Les termes \mathcal{H}_I et \mathcal{G}_I (respectivement le Lagrangien et le Lagrangien augmenté associés à la contrainte (VI.6)) sont alors :

$$\mathcal{H}_I(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\nu}_I) = \boldsymbol{\nu}_I^T (\mathbf{b} - \mathbf{a}) \quad (\text{VI.8})$$

$$\mathcal{G}_I(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{\beta_I}{2} \|\mathbf{b} - \mathbf{a}\|_2^2 \quad (\text{VI.9})$$

où $\beta_I \in \mathbb{R}$ est le paramètre du Lagrangien augmenté. L'utilisation de fonctions augmentées permet d'améliorer la stabilité de l'algorithme [13]. La contrainte d'inégalité (VI.7) sur la variable auxiliaire est traduite par une fonction indicatrice :

$$\delta_\Omega(\mathbf{b}) = \begin{cases} 0, & \text{si } \mathbf{b} \in \Omega \\ \infty, & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{VI.10})$$

VI.2.2 Contrainte d'égalité

Les fonctions traduisant la contrainte d'égalité se feront sur le même principe, nous aurons alors :

$$\mathcal{H}_E(\mathbf{a}, \nu_E) = \nu_E \left(\sum_{p=1}^P \frac{a_{\text{gd}}(p)}{c_{\text{gd}}} - 1 \right) \quad (\text{VI.11})$$

$$\mathcal{G}_E(\mathbf{a}) = \frac{\beta_E}{2} \left(\sum_{p=1}^P \frac{a_{\text{gd}}(p)}{c_{\text{gd}}} - 1 \right)^2 \quad (\text{VI.12})$$

où $\beta_E \in \mathbb{R}$ est le paramètre du Lagrangien augmenté et c_{gd} la quantité totale de gadolinium injectée et supposée connue.

VI.2.3 Algorithme de minimisation

ADMM nous permet de trouver le point selle qui va minimiser la fonctionnelle \mathcal{Q} en alternant les mises à jour des différentes variables. Elles se font de la manière suivante au cours des

itérations w , qui seront appelées externes :

$$\mathbf{a}_{w+1} \in \underset{\mathbf{a}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{Q}(\mathbf{a}, \mathbf{b}_w, \nu_{E,w}, \boldsymbol{\nu}_{I,w}) \quad (\text{VI.13})$$

$$\mathbf{b}_{w+1} \in \underset{\mathbf{b}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{Q}(\mathbf{a}_{w+1}, \mathbf{b}, \nu_{E,w}, \boldsymbol{\nu}_{I,w}) \quad (\text{VI.14})$$

$$\nu_{E,w+1} \in \underset{\nu_E}{\operatorname{argmax}} \mathcal{Q}(\mathbf{a}_{w+1}, \mathbf{b}_{w+1}, \nu_E, \boldsymbol{\nu}_{I,w}) \quad (\text{VI.15})$$

$$\boldsymbol{\nu}_{I,w+1} \in \underset{\boldsymbol{\nu}_I}{\operatorname{argmax}} \mathcal{Q}(\mathbf{a}_{w+1}, \mathbf{b}_{w+1}, \nu_{E,w+1}, \boldsymbol{\nu}_I) \quad (\text{VI.16})$$

L'équation (VI.13) correspond à la mise à jour de la carte des matériaux \mathbf{a} par l'algorithme de Gauss-Newton (décrit dans l'Algorithme 3, chapitre IV), la variable auxiliaire \mathbf{b} sera mise à jour par un algorithme proximal et enfin les multiplicateurs de Lagrange seront mis à jour avec un algorithme de montée de gradient. La variable auxiliaire a besoin d'un algorithme proximal car la fonction $\delta_\Omega(\mathbf{b})$ est non différentiable.

Les paramètres des Lagrangiens augmentés β_E et β_I évolueront en les multipliant par un facteur $\omega > 1$ à chaque itération w , suivant :

$$\beta_{E,w+1} = \omega \beta_{E,w} \quad (\text{VI.17})$$

$$\beta_{I,w+1} = \omega \beta_{I,w} \quad (\text{VI.18})$$

Cela permet d'augmenter progressivement l'importance des contraintes au problème, dans le même esprit que l'incorporation du chapitre précédent. Les paramètres β_E et β_I interviennent dans la mise à jour des multiplicateurs de Lagrange, permettant donc de ne pas avoir une incorporation trop rapide des contraintes. Les fonctions liées aux contraintes n'auront donc pas un poids trop élevé par rapport aux fonctions rendant compte de la décomposition : le terme d'attache aux données et les termes de régularisation. Ces paramètres seront progressivement augmentés jusqu'à ce qu'ils atteignent une valeur seuil β_{\max} . En notant Π_Ω l'opérateur de projection sur l'ensemble Ω , l'algorithme ADMM est décrit dans l'Algorithme 6.

Algorithme 6 : Algorithme ADMM pour la minimisation sous contraintes d'égalité et d'inégalité

```
tant que Les critères d'arrêt de la boucle externe ne sont pas satisfaits faire
  tant que Les critères d'arrêt de la boucle interne ne sont pas satisfaits faire
    % Calcul de la Hessienne et du gradient de la fonction de coût
    résoudre ( $\mathbf{H}_k \mathbf{d}_k = -\mathbf{g}_k$ )
     $\mathbf{a}_{k+1} = \mathbf{a}_k + \lambda_k \mathbf{d}_k$ 
     $k = k + 1$ 
  fin
   $\mathbf{a}_{w+1} = \mathbf{a}_{k-1}$ 
   $\mathbf{b}_{w+1} = \Pi_{\Omega}(\mathbf{a}_{w+1} - \frac{\boldsymbol{\nu}_{I,w}}{\beta_{I,w}})$ 
   $\nu_{E,w+1} = \nu_{E,w} + \beta_{E,w} \frac{\mathcal{H}_E(\mathbf{a}_{m,w+1})}{\nu_{E,w}}$ 
   $\boldsymbol{\nu}_{I,w+1} = \boldsymbol{\nu}_{I,w} + \beta_I(\mathbf{b}_{w+1} - \mathbf{a}_{w+1})$ 
   $\beta_{E,w+1} = \omega \beta_{E,w}$ 
   $\beta_{I,w+1} = \omega \beta_{I,w}$ 
  si  $\beta_{E,w+1} > \beta_{\max}$  alors
    |  $\beta_{E,w+1} = \beta_{\max}$ 
  fin
  si  $\beta_{I,w+1} > \beta_{\max}$  alors
    |  $\beta_{I,w+1} = \beta_{\max}$ 
  fin
   $w = w + 1$ 
fin
```

VI.3 Simulations numériques

VI.3.1 Génération des données spectrales

Nous utiliserons les mêmes données que dans le chapitre précédent. Un thorax numérique composé de trois matériaux : tissus mous, os et gadolinium (dans la veine porte). Les paramètres de génération du fantôme sont donnés en [section III.2.2](#). De plus, pour vérifier que c_m est constante pour tous les angles, la figure [VI.1](#) présente la valeur de la contrainte d'égalité pour θ ($c_{m,\theta}$). Nous voyons que l'hypothèse est vérifiée, la différence entre le maximum de $c_{m,\theta}$ et son minimum est de l'ordre de 10^{-9} , 10^{-10} et 10^{-13} g pour les tissus mous, l'os et le gadolinium, respectivement. Nous prendrons donc :

$$\mathbf{c} = [17014, 5995, 29] \text{ g} \quad (\text{VI.19})$$

VI.3.2 Paramètres pour la décomposition

La solution initiale sera mise à $\mathbf{a}_0 = [0, 0, 0]$ et les paramètres de régularisation ont été choisis à partir de la projection à $\theta = 0^\circ$, qui minimise l'erreur quadratique. Nous avons donc pour ADMM $\boldsymbol{\beta} = [0.001, 0.01, 100]$, pour GN $\boldsymbol{\beta} = [0.1, 0.1, 1000]$ et pour GN-P $\boldsymbol{\beta} = [1, 0.001, 1000]$. Pour ADMM, les paramètres des Lagrangiens augmentés vont être initialisés à $\beta_{E,0} = 1$ et $\beta_{I,0} = 10^{-2}$ avec $\omega = 1.5$, les multiplicateurs seront initialisés avec $\nu_{E,0} = 0$ et $\nu_{I,0} = \mathbf{0}$ pour que le premier passage dans la boucle interne (mise à jour de \mathbf{a}) soit le moins contraint possible.

La boucle de mise à jour de \mathbf{a} (correspondant à l'Algorithme 3 et à la boucle interne pour ADMM) sera arrêtée si le nombre d'itération dépasse $k_{\max} = 150$, si la fonction n'évolue plus ($\delta C_{\min} \leq 10^{-3}$) ou si le pas optimal calculé est plus petit que $\lambda_{\min} = 5 \cdot 10^{-2}$. Pour ADMM, la boucle externe va être arrêtée si elle dépasse $w_{\max} = 100$ itérations, si $\|\mathbf{a}_w - \mathbf{b}_w\|_2^2 < 10^{-3}$ (si la contrainte d'inégalité est respectée) ou si $\left| \sum_p \frac{a_{\text{gd}}(p)}{c_{\text{gd}}} - 1 \right| < 10^{-3}$ (si la contrainte d'égalité est respectée). Nous laissons une marge aux contraintes pour que l'algorithme ne demande pas beaucoup d'itérations pour converger.

Les bornes de l'algorithme GN-P (Algorithme 5, [chapitre V](#)) seront $L_m = 0 \text{ g.cm}^{-2}$ et $U_m = 100 \text{ g.cm}^{-2}$. La borne inférieure sera initialisée à $\ell_{m,0} = -50 \text{ g.cm}^{-2} \forall m$ et, si la valeur ne change pas sur deux itérations consécutives, elle sera modifiée d'un pourcentage $p_{\min} = 20\%$.

VI.3.3 Évaluation des résultats

L'étude de ce chapitre porte sur l'apport de la contrainte d'égalité et d'inégalité sur la décomposition des matériaux. Nous comparerons donc les algorithmes suivants : NM-MV, GN, GN-P et ADMM. Nous regarderons les décompositions à $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$ et le volume pour différentes coupes à $z = \{1, 140\}$. Nous calculerons également l'erreur quadratique moyenne dans les projections et dans le volume, ainsi que le SSIM (détaillés en [section III.3](#)). Afin de voir l'intérêt de l'ajout de la contrainte d'égalité en plus de celle d'inégalité, nous quantifierons

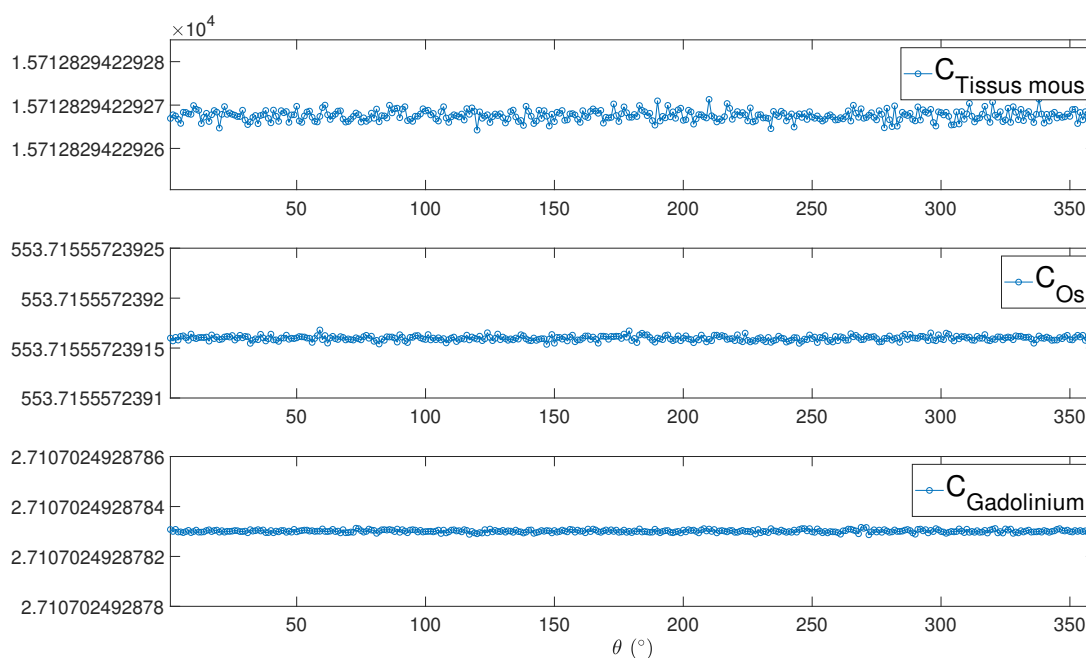


FIGURE VI.1 – Évolution de la quantité c_m pour tous les matériaux pour tous les angles θ .

la quantité d'os dans le volume du gadolinium et la quantité de gadolinium dans le volume d'os. Dans le domaine de l'objet, ces matériaux sont complètement séparés. En utilisant un masque, nous pourrions quantifier la densité présente dans chaque volume.

VI.4 Résultats et discussions

VI.4.1 Influence de l'algorithme sur la reconstruction

Ici, nous évaluerons les résultats de la décompositions des matériaux en utilisant plusieurs types d'algorithmes : non contraints d'ordres 0 et 2 (respectivement NM-MV et GN), contraint en positivité d'ordre 2 (GN-P) et contraint en positivité et égalité avec une mise à jour de la carte des matériaux par un algorithme d'ordre 2 (ADMM).

Résultats dans le domaine des projections

Les décompositions des matériaux pour les différents algorithmes sont affichées sur la figure VI.2 pour $\theta = [0^\circ, 90^\circ]$. Nous pouvons voir que l'algorithme ADMM nous permet d'obtenir les cartes de matériaux et que la minimisation est correctement effectuée. Nous pouvons aussi voir qu'il n'y a pas de gadolinium dans l'image de l'os et un peu moins d'os dans l'image du gadolinium par rapport à GN-P. De plus, les cartes de matériaux ne sont pas très bruitées. Nous pouvons considérer qu'ADMM se trouve à mi-chemin de GN et GN-P. En effet, le premier ne présente quasiment pas de diaphonie, mais est bruité, alors que le deuxième n'est pas bruité, mais un phénomène de diaphonie apparaît. Cependant, lorsque nous regardons l'erreur associée aux algorithmes, nous pouvons voir que l'amélioration visuelle n'est pas accompagnée par une amélioration des métriques d'évaluation. Sur la figure VI.3, l'erreur quadratique moyenne ξ_θ et

le SSIM sont affichés pour chaque angle. Tandis que l'erreur quadratique moyenne pour ADMM est équivalente à celle de GN-P, le SSIM est moins bon. La différence du SSIM peut être attribuée au fait qu'il y a légèrement plus de bruit dans les images avec ADMM qu'avec GN-P, alors que l'erreur quadratique moyenne est faible, car la quantification de chaque matériaux est mieux réalisée.

Résultats dans le domaine de l'objet

La reconstruction tomographique des données spectrales décomposées nous permet d'avoir un volume par matériau pour chaque algorithme. Sur la figure VI.4, nous pouvons voir les coupes $z = [1, 140]$. Elles nous montrent plus clairement ce qui avait été observé dans les projections : la décomposition avec ADMM nous permet de réduire l'apparition de gadolinium dans l'os tout en étant moins bruitée que GN. Cela se voit tout particulièrement dans l'image d'os à $z = 140$. La décomposition avec GN ne nous montre que de l'os, mais très bruitée, le léger espace en haut à droite de la structure agrandie (que nous pouvons voir très clairement dans l'image de la VT) est absent. La décomposition avec GN-P nous permet de retrouver cette absence d'os, mais du gadolinium apparaît. ADMM permet d'avoir les deux : une décomposition fidèle sans pour autant avoir du gadolinium dans l'image. L'os apparaît également légèrement moins dans le gadolinium avec ADMM qu'avec GN-P. Les métriques d'évaluation présentées sur la figure VI.5 ne montrent pas d'amélioration avec ADMM pour autant. GN-P et ADMM sont très proches pour chaque métrique, mais GN-P semble mieux décomposer les données. Ceci vient du fait que ces décompositions-là sont moins bruitées.

VI.4.2 Influence de l'algorithme sur la diaphonie

Comme mentionné précédemment, ADMM ne permet pas forcément d'obtenir de meilleurs résultats pour les différentes métriques d'évaluation. Cependant, l'objectif pour cet algorithme était de réduire la diaphonie. Nous chercherons donc ici à quantifier cet apport. Dans le domaine de l'objet (dans le volume), deux masques ont été créés définissant les pixels où le gadolinium et l'os sont présents (à partir de la VT). Ces masques vont permettre de quantifier la quantité d'os dans l'image du gadolinium et inversement. Cette étude se fait sur le volume, car ces matériaux sont spatialement séparés. La figure VI.6 montre la quantité absolue de gadolinium dans l'os et réciproquement. Nous regardons bien la valeur absolue, car dans le cas de GN, des valeurs négatives pouvaient s'annuler alors que pour GN-P et ADMM, les valeurs sont positives. La quantité de gadolinium dans l'os est beaucoup plus faible avec ADMM (comme vu sur les coupes) et la quantité d'os est légèrement plus faible. L'algorithme GN nous donne de grandes valeurs car la décomposition est plus bruitée. Les différents volumes générés sont affichés sur la figure VI.7 où la dynamique des couleurs est spécifique à chaque volume. Cela montre bien que l'algorithme GN-P présente le plus de diaphonie et permet également de la placer spatialement.

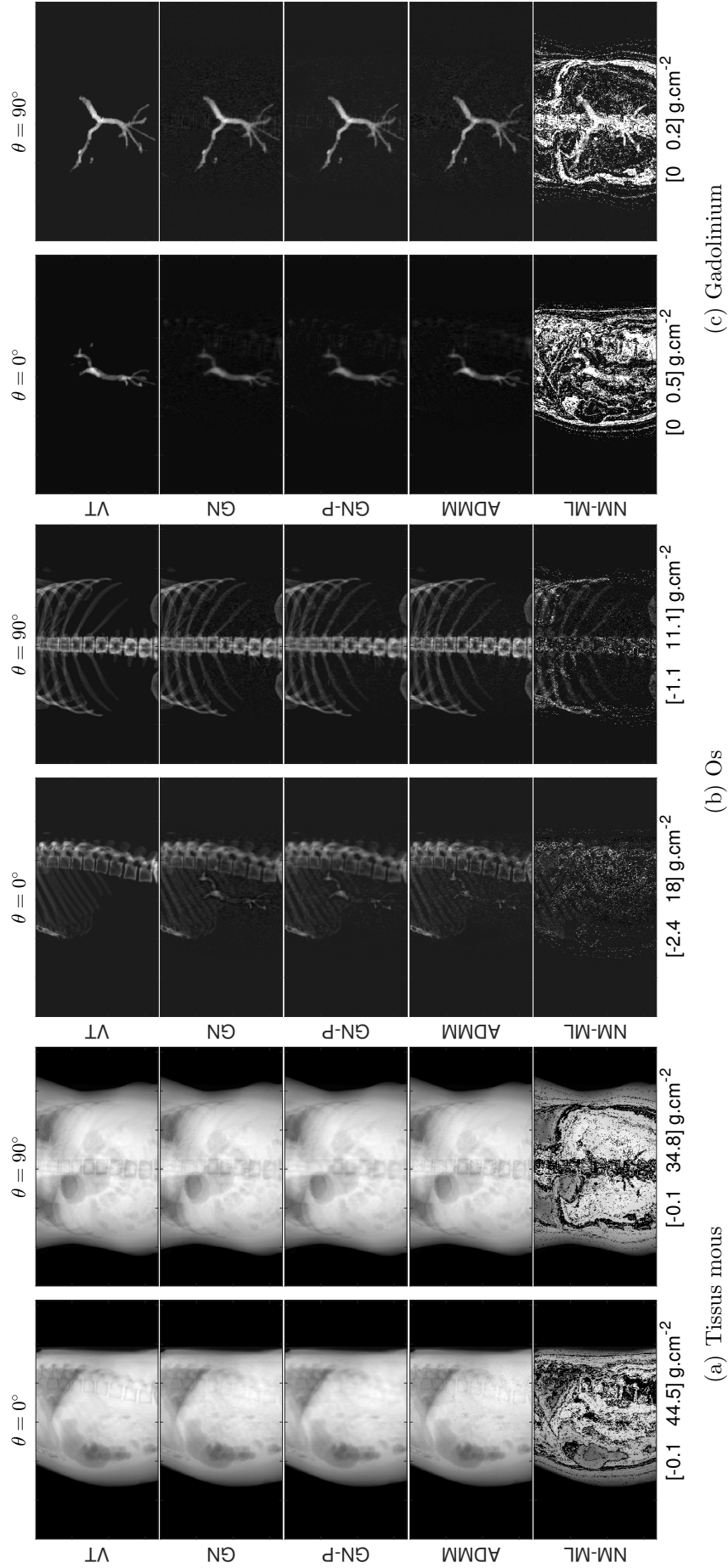


FIGURE VI.2 – Carte des matériaux décomposés pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$. De gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium, et de haut en bas : vérité terrain (VT), Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV).

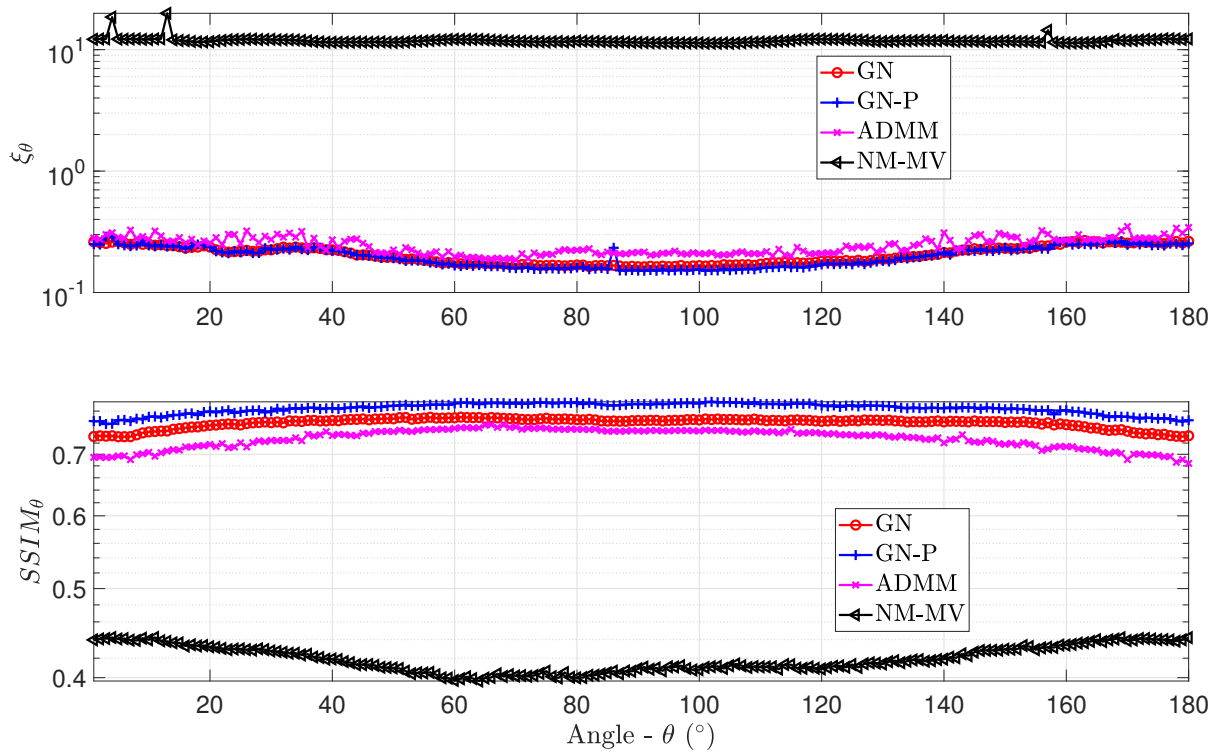


FIGURE VI.3 – Erreur quadratique moyenne ξ_θ (première ligne) et le SSIM (deuxième ligne) dans les projections pour GN, GN-P et NM-MV, $\forall \theta$.

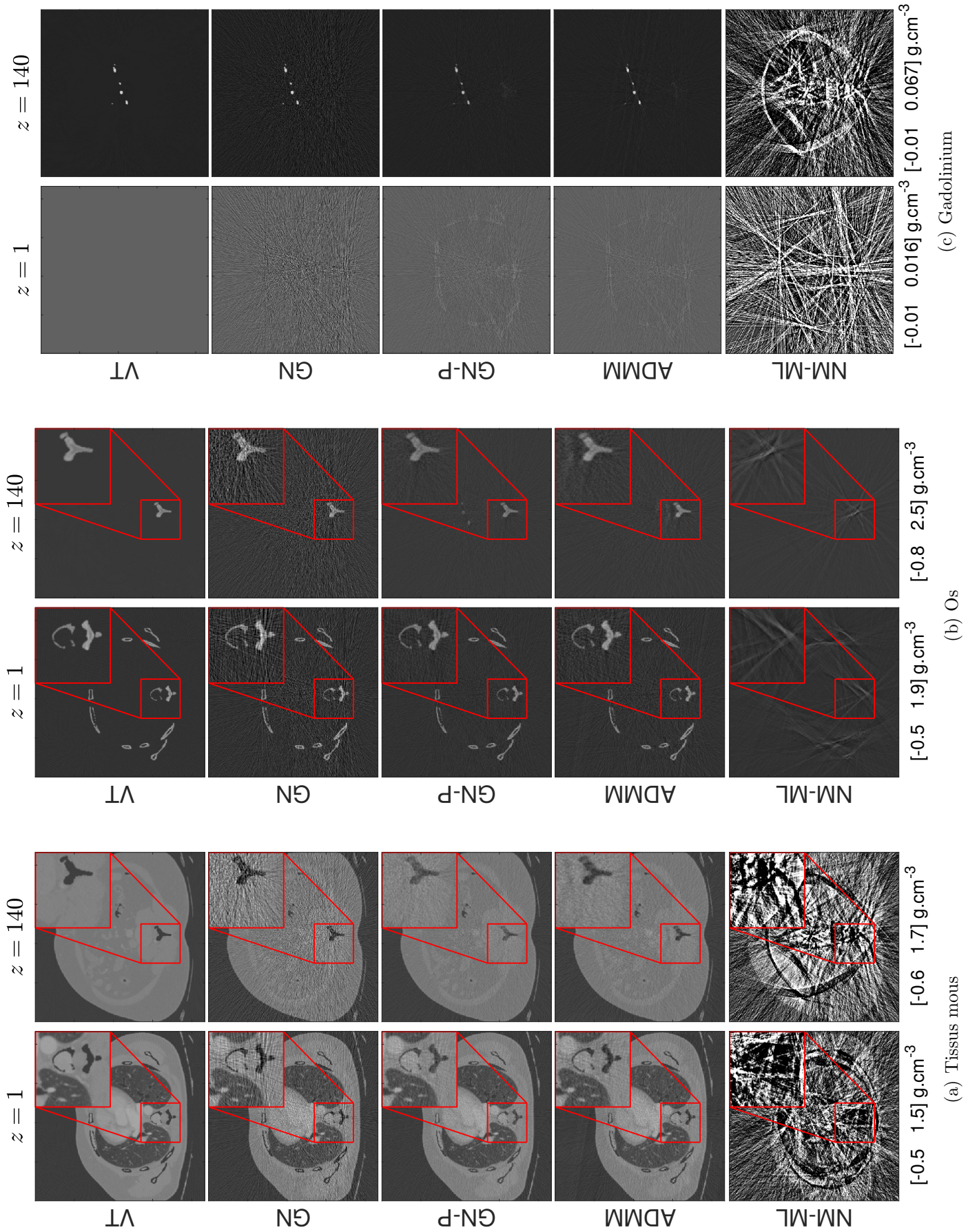


FIGURE VI.4 – Cartes des matériaux reconstruits pour $z = \{1, 140\}$. De gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium, et de haut en bas : vérité terrain (VT), Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projecté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV).

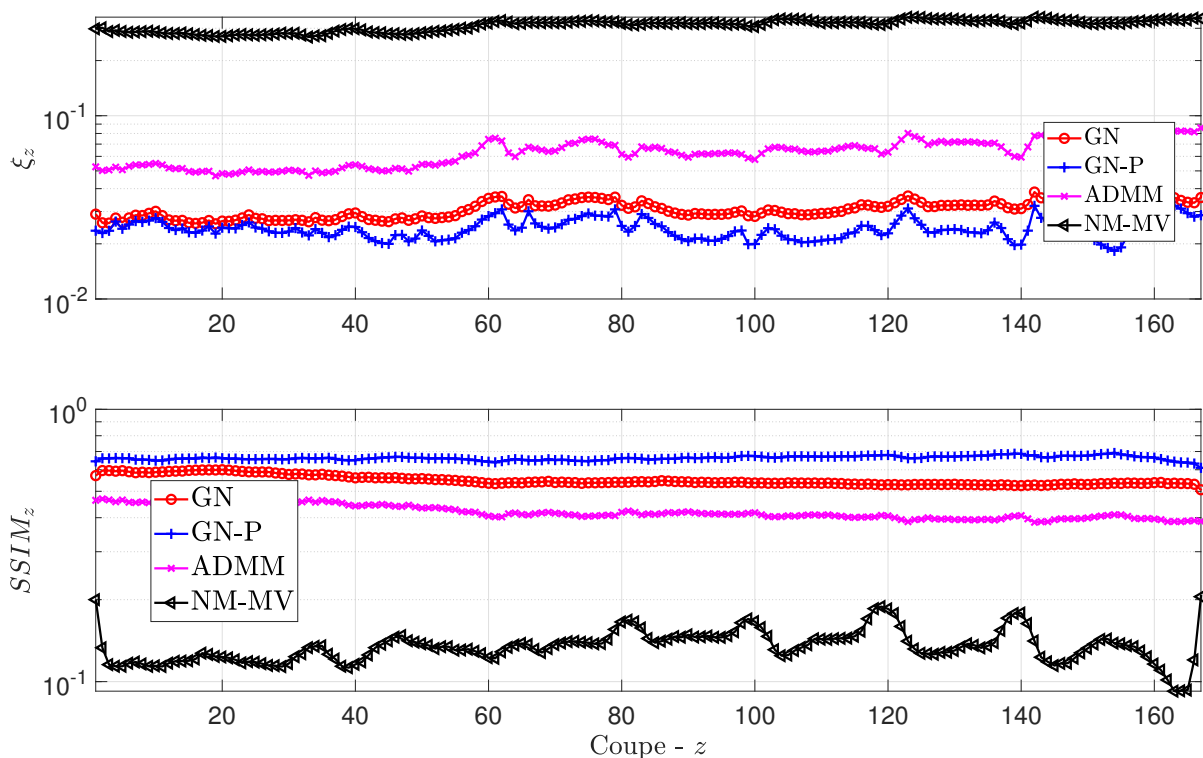


FIGURE VI.5 – Erreur quadratique moyenne ξ_z (première ligne) et le SSIM (deuxième ligne) dans l'objet pour GN, GN-P et NM-MV $\forall z$.

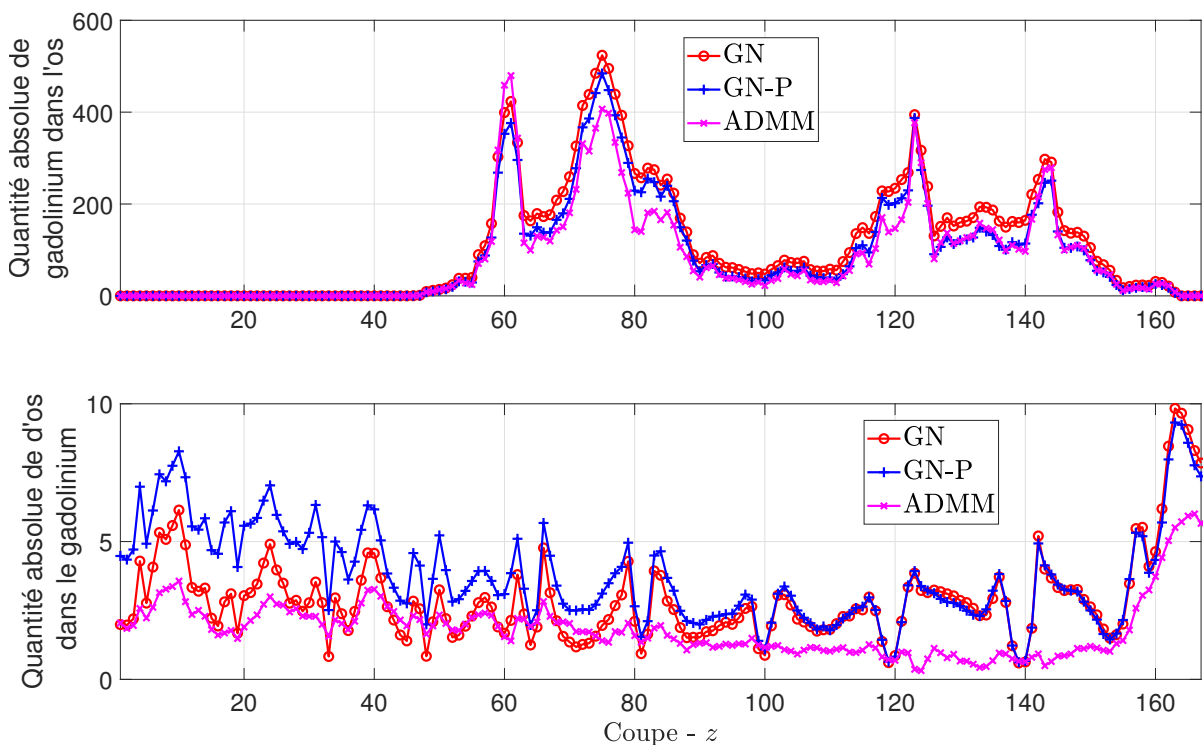


FIGURE VI.6 – Quantification absolue de la diaphonie dans le volume reconstruit du thorax avec Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projecté (GN-P) et ADMM, $\forall z$.

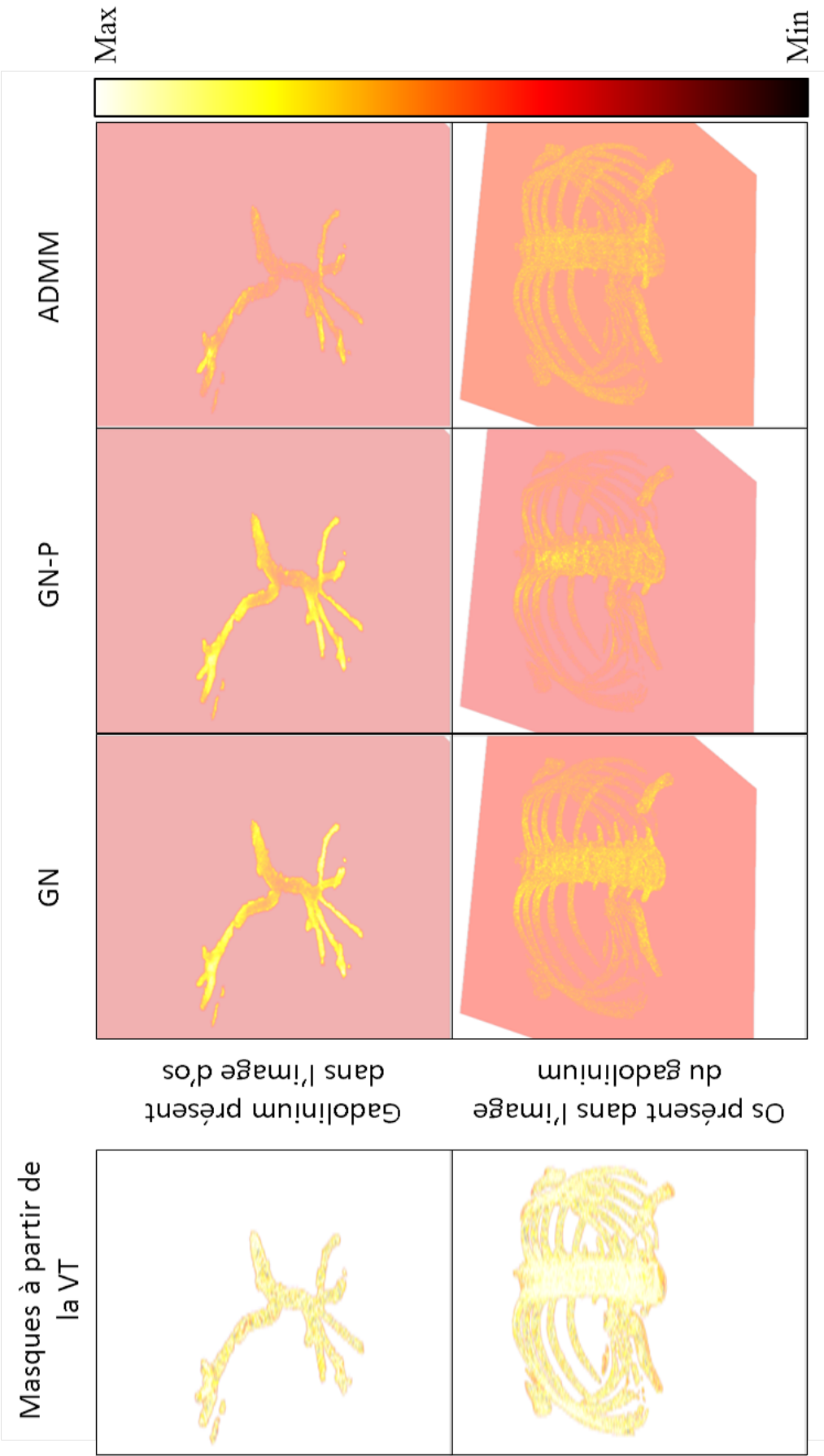


FIGURE VI.7 – Images des volumes où la diaphonie est présente pour la quantité absolue de gadolinium dans l’os (première ligne) et de gadolinium dans l’os (deuxième ligne). Les masques utilisés sont présentés sur la première colonne, les quantités absolues pour les algorithmes GN, GN-P et ADMM sont montrées sur les colonnes suivantes, respectivement.

VI.5 Conclusion

Dans ce chapitre, un algorithme pour la décomposition sous contraintes a été développé. Il a permis de décomposer les données spectrales sous une contrainte d'inégalité (positivité ici) et d'égalité. La dernière avait pour but de réduire l'apparition de gadolinium dans l'image de l'os en cherchant à décomposer la quantité exacte dans les projections. Ces contraintes ont été mises en place en utilisant un algorithme ADMM, qui a permis d'utiliser un algorithme d'ordre 2 pour la mise à jour des cartes de matériaux.

Les algorithmes GN, GN-P, ADMM et NM-MV ont été utilisés pour décomposer le thorax et voir la différence qu'il y a entre les différentes approches. Les résultats ont montré que l'ajout de la contrainte d'égalité ne permettait pas forcément d'avoir une meilleure erreur quadratique moyenne ou un meilleur SSIM dans le domaine des projections et celui de l'objet. Cette tendance vient du fait que les décompositions sont toujours assez bruitées par rapport à GN-P. Cependant, le gadolinium n'était plus présent dans l'image de l'os, confirmant l'utilité de cet algorithme. Dans le volume, une étude sur la diaphonie a été faite, quantifiant le fait que ADMM permet d'avoir moins de gadolinium dans l'image d'os.

Chapitre VII

Choix automatiques des hyperparamètres

Contents

VII.1	Introduction	113
VII.2	Problème de décomposition	114
VII.3	Choix des hyperparamètres	114
VII.3.1	Moindres carrés	114
VII.3.2	Choix de Bertero	114
VII.3.3	Choix automatique	115
VII.4	Mise en œuvre des techniques	116
VII.5	Résultats et discussions	116
VII.6	Décomposition de tous les angles avec le choix automatique	125
VII.6.1	Décomposition dans les projections	125
VII.6.2	Reconstruction des images	125
VII.7	Conclusion	129

Chapitre VII

LES méthodes présentées (chapitres IV, V et VI) nous ont permis d'améliorer les décompositions dans le domaine des projections et celui de l'objet. Cependant, ces techniques nécessitent de fixer un certain nombre de paramètres, ce qui est moins trivial lorsqu'il s'agit de décomposer des données réelles. En effet, le paramètre de régularisation était choisi comme étant le meilleur au sens de l'erreur pour un angle, puis il était appliqué pour les autres angles. Ce genre de choix *a posteriori* n'est pas envisageable avec des données dont la vérité terrain n'est pas connue.

VII.1 Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons développé des algorithmes de minimisation sous contraintes, qui permettaient d'obtenir de meilleurs résultats par rapport aux méthodes classiques. L'utilisation d'une régularisation spatiale, qui a été introduite par [Ducros et al. \(2017\)](#), a permis d'améliorer les résultats de reconstruction. Dans notre problème, chaque matériau a un terme de régularisation associé à un paramètre de pondération. Le choix de ces hyperparamètres peut requérir beaucoup de temps de calcul si nous voulons que les décompositions soient les meilleures possibles. Plusieurs méthodes de choix *a posteriori* ont été développées. Dans le cas d'un problème linéaire, la *L-curve* introduite par [Hansen et O'Leary \(1993\)](#) permet de trouver le paramètre de régularisation (ou la combinaison des paramètres dans sa version généralisée [11]) qui donne le meilleur compromis entre similarités des données et régularisation. Cependant, dans le cas où le problème est non linéaire, cela est plus complexe [40]. [Bertero et al. \(2010\)](#) ont développé une méthode utilisant la divergence de Kullback-Leibler afin de faire ce choix pour des problèmes avec un bruit de Poisson. Pour des simulations numériques, un choix évident, mais qui n'est pas faisable en pratique, consiste à choisir les hyperparamètres qui minimisent l'erreur quadratique moyenne de décomposition.

Le choix de [Bertero et al. \(2010\)](#) et celui des moindres carrés (par minimisation d'erreur) sont des choix *a posteriori* qui nécessitent le calcul préalable de toutes les combinaisons des paramètres. Nous proposons dans ce chapitre un choix des hyperparamètres de régularisation à la volée. Les hyperparamètres seront choisis au cours des itérations en suivant les travaux de [Ito et al. \(2011b\)](#), qui reposent sur le principe d'équilibre des termes de fonction de coût.

Nous introduisons dans ce chapitre différentes méthodes de choix des hyperparamètres que nous allons comparer : moindres carrés, Bertero et automatique. Les résultats seront obtenus sur le fantôme numérique du thorax où nous comparerons le temps de calcul et l'erreur pour chaque méthode.

VII.2 Problème de décomposition

Comme précédemment, nous cherchons à reconstruire la carte des matériaux $\mathbf{a}^{\theta_n} = [\mathbf{a}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_m^{\theta_n}, \dots, \mathbf{a}_M^{\theta_n}]$ pour chaque angle θ_n , où $\mathbf{a}_m^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$, avec P le nombre de pixels, M le nombre de matériaux et N le nombre de projections. Cette décomposition se fera à partir des données $\mathbf{s}^{\theta_n} = [\mathbf{s}_1^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_i^{\theta_n}, \dots, \mathbf{s}_I^{\theta_n}]$, où $\mathbf{s}_i^{\theta_n} \in \mathbb{R}^P$ et I le nombre de plages d'énergies. Pour des raisons de visibilité, nous laisserons tomber l'indice θ_n , les méthodes développées se feront de manière égale pour tout θ . Afin de récupérer la carte \mathbf{a} , nous minimiserons la fonction de coût suivante :

$$\mathcal{C}(\mathbf{a}) = \mathcal{D}(\mathbf{a}) + \mathcal{R}(\mathbf{a}) \quad (\text{VII.1})$$

où :

$$\mathcal{D}(\mathbf{a}) = \|\mathbf{s} - \mathcal{F}(\mathbf{a})\|_{\mathbf{W}}^2 \quad (\text{VII.2})$$

$$\mathcal{R}(\mathbf{a}) = \sum_{m=1}^M \beta_m \mathcal{R}_m(\mathbf{a}) \quad (\text{VII.3})$$

où β_m est le paramètre de régularisation pour le terme régularisant le matériau m (\mathcal{R}_m), \mathcal{F} est le modèle direct, \mathbf{W} est une matrice de pondération et M le nombre de matériaux. Il y a aura donc M paramètres à régler. Nous avons proposé dans les chapitres V, VI des algorithmes de minimisation sous contraintes. Dans ce chapitre, nous développerons une méthode pour choisir automatiquement les hyperparamètres de régularisations β_m .

VII.3 Choix des hyperparamètres

VII.3.1 Moindres carrés

Les β_m sont les paramètres de pondération pour chaque fonction de régularisation \mathcal{R}_m pour le matériau m . En définissant l'erreur quadratique moyenne ξ_{θ}^{β} telle que :

$$\xi_{\theta}^{\beta} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{\|\mathbf{a}_{m,\theta}^{\beta} - \mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}\|_2^2}{\|\mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}\|_2^2} \quad (\text{VII.4})$$

où $\mathbf{a}_{m,\theta}^{\beta}$ est la carte du matériau m décomposée avec la combinaison β à l'angle θ et $\mathbf{a}_{m,\theta}^{\text{VT}}$ la vérité terrain du matériau m à l'angle θ . Le choix des hyperparamètres par moindres carrés revient à choisir les β qui minimise l'erreur, tel que :

$$\hat{\beta}_{\theta} \in \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} \xi_{\theta}^{\beta} \quad (\text{VII.5})$$

VII.3.2 Choix de Bertero

En pratique, le choix par moindres carrés n'est pas possible, car nous avons besoin de la vérité terrain. C'est pourquoi, dans le cas de données bruitées par un bruit de Poisson, [Bertero et al. \(2010\)](#) ont introduit l'approximation suivante [42] :

$$KL(\mathbf{s}, \mathcal{F}(\mathbf{a}^{\beta})) \approx \frac{I \times P}{2} \quad (\text{VII.6})$$

où $I \times P$ est le nombre de variables poissonniennes du problème (c'est-à-dire le nombre de pixels), \mathcal{F} est le modèle direct ((I.26), chapitre I) et $KL(\mathbf{s}, \mathcal{F}(\mathbf{a}^\beta))$ est définie telle que :

$$KL(\mathbf{s}, \mathcal{F}(\mathbf{a}^\beta)) = \sum_i \sum_p s_i(p) \log \left(\frac{s_i(p)}{\mathcal{F}(\mathbf{a}(p))_i} \right) + \mathcal{F}(\mathbf{a}(p))_i - s_i(p) \quad (\text{VII.7})$$

est la divergence de Kullback-Leibler entre les données \mathbf{s} et l'estimation des données par les cartes de matériaux \mathbf{a}^β pour la combinaison β . Ce choix repose sur le fait que pour une variable aléatoire 1D s^δ de valeur moyenne λ , la divergence $KL(s, s^\delta) \approx \frac{1}{2}$ sera multipliée par le cardinal de notre problème, qui est ici $P \times I$. Cette méthode permet de choisir β en trouvant la carte qui approxime le mieux l'équation (VII.6). Cependant elle nécessite tout de même d'effectuer beaucoup de décompositions pour des valeurs de β_m . En essayant K valeurs pour chaque β_m pour N angles, nous devrions faire $N \times K^M$ décompositions. Par exemple, en considérant $M = 3$ matériaux, $K = 7$ valeurs pour chaque β_m pour $N = 180$ angles, nous devrions faire 61740 décompositions (343 par angle). Cela implique des calculs assez lourds. Les choix précédemment présentés sont des choix *a posteriori*, nous devons faire les décompositions, puis choisir la meilleure combinaison d'hyperparamètres selon un critère. Calculer toutes les combinaisons peut être lourd, c'est pourquoi Ito *et al.* (2011b) ont proposé une méthode qui choisit les hyperparamètres pendant les itérations et non *a posteriori*.

VII.3.3 Choix automatique

Introduisant un paramètre γ comme un poids relatif entre chaque terme, nous aurons un algorithme itératif qui va estimer β . Ito *et al.* (2011b) proposent, après minimisation de $\mathcal{C}(\mathbf{a})$, de mettre à jour les hyperparamètres comme suit :

$$\beta_m^{t+1} = \frac{1}{\gamma} \frac{\mathcal{D}(\mathbf{a}_t)}{\mathcal{R}_m(\mathbf{a}_{m,t})} \quad (\text{VII.8})$$

selon un principe d'équilibre entre les termes [51]. Le paramètre γ est un poids relatif entre le terme d'attache aux données et la régularisation pour chaque matériau. Cela permet de correspondre au mieux aux données, tout en régularisant suffisamment. L'Algorithme 7 décrit le choix automatique des hyperparamètres qui sera évalué dans ce chapitre. Cette méthode

Algorithme 7 : Algorithme du choix automatique des hyperparamètres

$t = 1$

tant que Les critères d'arrêt ne sont pas satisfaits **faire**

% Calcul de la nouvelle solution par un algorithme de minimisation (Algorithme 3, 5 ou 6)

% Mise à jour des paramètres de régularisation

$$\beta_m^{t+1} = \frac{1}{\gamma} \frac{\mathcal{D}(\mathbf{a}_t)}{\mathcal{R}_m(\mathbf{a}_{m,t})}$$

$t = t + 1$

fin

permet de réduire le choix du nombre d'hyperparamètres de M à 1 seul paramètre.

VII.4 Mise en œuvre des techniques

Nous décomposerons le thorax en trois matériaux : tissus mous, os et gadolinium (décrit en [section III.2.2](#)) avec les algorithmes de Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et ADMM. Le terme de régularisation sera :

$$\mathcal{R}(\mathbf{a}) = \beta_{\text{tissus}} \|\Delta \mathbf{a}_{\text{tissus}}\|_2^2 + \beta_{\text{os}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{os}}\|_2^2 + \beta_{\text{gd}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{gd}}\|_2^2 \quad (\text{VII.9})$$

La solution initiale sera $\mathbf{a}_0 = [0, 0, 0]$ et les paramètres de régularisation initiaux seront $\beta_0 = [0.1, 0.1, 750]$. La boucle du choix automatique des paramètres sera arrêtée si les β n'évoluent plus. Nous considérons qu'il n'y a plus d'évolution si :

$$\delta\beta_{\min} = 1 - \frac{\beta_{t+1}}{\beta_t} \quad (\text{VII.10})$$

est inférieur à 10^{-1} . Le changement automatique des paramètres se fera avec un paramètre $\gamma = 200$.

Les critères d'arrêt sont les suivants pour les différents algorithmes :

- GN (Algorithme 3, [chapitre IV](#)) et GN-P (Algorithme 5, [chapitre V](#))
 - * Décroissance de la fonction de coût : $\delta\mathcal{C}_{\min} \leq 10^{-3}$
 - * Nombre maximum d'itérations : $k_{\max} = 150$
 - * Plus petit pas calculé par *LineSearch* : $\lambda_{\min} = 5.10^{-2}$
- ADMM (Algorithme 6, [chapitre VI](#))
 - * Boucle interne (algorithme de minimisation de type Gauss-Newton pour \mathbf{a})
 - $\delta\mathcal{C}_{\min} \leq 10^{-3}$
 - $k_{\max} = 150$
 - $\lambda_{\min} = 5.10^{-2}$
 - * Boucle externe (minimisation de \mathcal{Q})
 - Si la contrainte d'inégalité est respectée : $\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_2^2 < 10^{-3}$
 - Si la contrainte d'égalité est respectée : $\left| \sum_p \frac{a_{\text{gd}}(p)}{c_{\text{gd}}} - 1 \right| < 10^{-3}$

Pour comparer les différents choix de paramètres *a posteriori* (moindres carrés et Bertero), nous ferons pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$ un grand nombre de décompositions pour trouver la meilleure combinaison de paramètres avec $\log_{10} \beta_m = [-3, -2, \dots, 3]$ pour chaque matériau. Nous comparerons les trois choix possibles : moindres carrés, Bertero et automatique.

VII.5 Résultats et discussions

Nous voulons tout d'abord nous assurer que le choix automatique des hyperparamètres est valide. Nous comparerons donc le choix par moindres carrés, c'est-à-dire choisir la combinaison β qui minimise ξ_θ , le choix de Bertero ([VII.6](#)) et le choix automatique proposé. Le temps nécessaire pour effectuer le nombre important de combinaisons possibles a fait que les calculs ne sont réalisés que pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$. Sur la table [VII.1](#), nous relevons l'erreur pour chaque méthode pour GN, GN-P et ADMM. Le choix par moindres carrés nous donne l'erreur la plus faible pour

	θ	Algorithme	Méthode		
			Moindres carrés	Bertero	Automatique
ξ_θ	$\theta = 0^\circ$	GN	0.261	0.528	0.663
		GN-P	0.250	0.600	0.284
		ADMM	0.140	0.233	0.144
	$\theta = 90^\circ$	GN	0.162	0.318	0.322
		GN-P	0.148	0.398	0.192
		ADMM	0.105	0.122	0.099

TABLE VII.1 – Erreur quadratique moyenne ξ_θ pour les différents choix des paramètres β : moindres carrés, Bertero et choix automatique.

GN et GN-P. Mais pour ADMM, il se trouve que le choix automatique donne qualitativement une meilleure décomposition à $\theta = 90^\circ$. L'algorithme GN avec le choix automatique donne une erreur quasi similaire que le choix de Bertero, alors que GN-P a une très faible erreur avec le choix automatique (par rapport au choix de Bertero). Avec GN, même si l'erreur est la même avec la méthode de Bertero ou avec le choix automatique, il est toujours plus judicieux de faire le choix du paramètre au cours des itérations pour éviter de devoir calculer toutes les combinaisons possibles. Pour ADMM, le choix automatique est très bon par rapport au choix de Bertero. Nous pouvons également noter qu'avec le choix par moindres carrés, cette méthode produit une très faible erreur. En effet, le choix automatique est très rapide par rapport au balayage des β_m . Sur les tables VII.2 et VII.3, nous relevons le temps total pour faire les décompositions, le temps moyen par itération et le nombre d'itérations nécessaires pour obtenir la solution pour $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$, respectivement. Calculer chaque combinaison de β_m est très long : avec GN, GN-P et ADMM, il faut respectivement 18 979 secondes (~ 5 h 30), 25 718 secondes (~ 7 h 15) et 1 879 496 secondes (~ 21 jours) en moyenne. Le choix automatique permet de réduire considérablement le temps de calcul, en passant à 75.8 secondes, 408.9 secondes (~ 6 min 50) et 1 156 secondes (~ 20 min) pour GN, GN-P et ADMM, respectivement, soit ~ 250 , ~ 60 et $\sim 1\,500$ fois plus vite. Les paramètres de régularisation étant bien estimés à chaque itération (nous pouvons voir que l'erreur finale est faible et donc que l'algorithme ne diverge pas), le temps de calcul moyen par itération est réduit : il est divisé par 2 pour chaque algorithme. Nous pouvons voir également que la résolution de deux systèmes linéaires dans l'algorithme GN-P impacte le temps de calcul et qu'il demande donc un temps double pour une itération. Le nombre total d'itérations est également beaucoup plus faible avec le choix automatique, car nous ne balayons pas tout l'espace. Nous observons aussi qu'avec le choix automatique, GN-P a également besoin de plus d'itérations que GN, car la contrainte met du temps à être respectée (*i.e.* $\Omega_k = [0, 0]$).

Les décompositions associées à chaque méthode sont présentées sur la figure VII.3 pour $\theta = 0^\circ$ et sur la figure VII.4 pour $\theta = 90^\circ$. Nous pouvons voir que la méthode Bertero nous donne beaucoup de diaphonie (apparition d'os dans l'image de gadolinium) ou d'images très lisses (β trop grand), ce qui nous indique la valeur choisie n'est pas optimale et ne nous permet pas d'obtenir une bonne solution. Le choix automatique nous donne un résultat acceptable visuellement par rapport au choix par moindres carrés et par rapport à la vérité terrain. Nous

	Algorithmes	Méthodes	
		Choix <i>a posteriori</i> (Moindres carrés et Bertero)	Automatique
Temps total (secondes)	GN	16446	55
	GN-P	24648	574
	ADMM	1345413	1112
Temps moyen par itération (secondes)	GN	4.69	1.81
	GN-P	8.33	3.15
	ADMM	1.64	3.49
Nombre total d'itérations	GN	3504	30
	GN-P	3080	182
	ADMM	815932	318

TABLE VII.2 – Temps de calcul total, moyen et nombre d'itérations pour le choix des hyperparamètres pour $\theta = 90^\circ$.

	Algorithmes	Méthodes	
		Choix <i>a posteriori</i> (Moindres carrés et Bertero)	Automatique
Temps total (secondes)	GN	21512	97
	GN-P	26788	244
	ADMM	2413580	1200
Temps moyen par itération (secondes)	GN	5.44	1.61
	GN-P	3.10	4.05
	ADMM	1.61	3.50
Nombre total d'itérations	GN	3954	44
	GN-P	8619	60
	ADMM	1495695	342

TABLE VII.3 – Temps de calcul total, moyen et nombre d'itérations pour le choix des hyperparamètres pour $\theta = 0^\circ$.

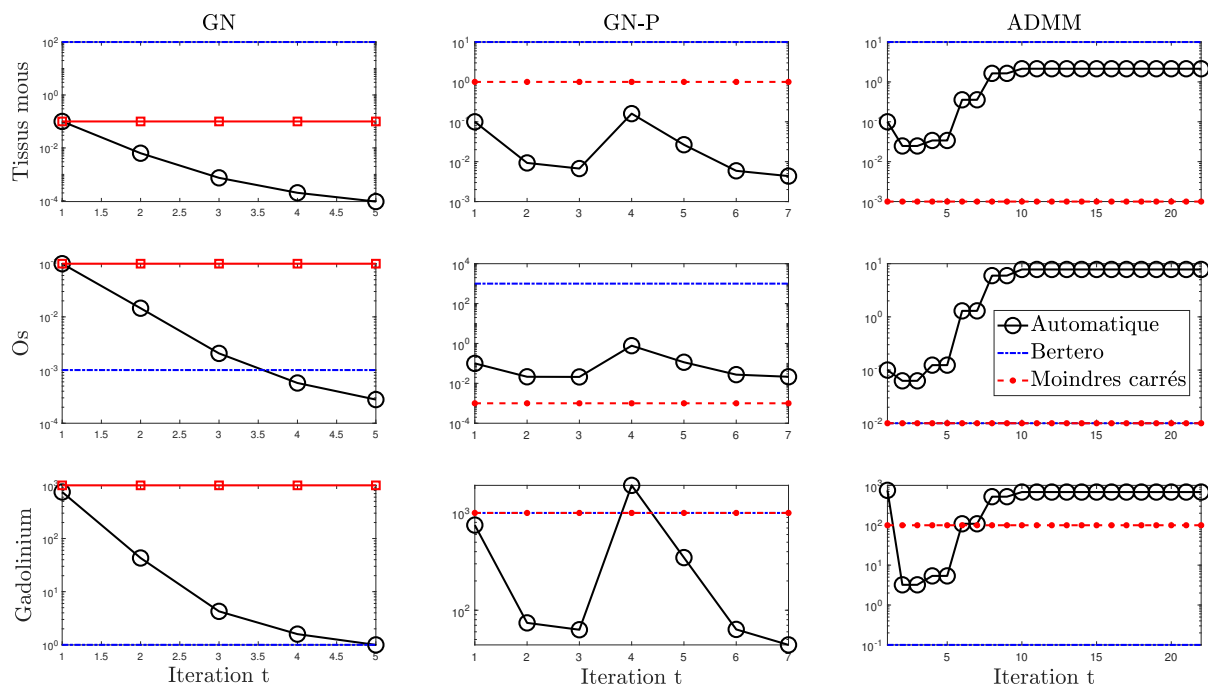


FIGURE VII.1 – Évolution de β pendant les itérations t pour un choix automatique, comparé avec le choix par moindres carrés et celui de Bertero. Nous considérons ici $\theta = 0^\circ$.

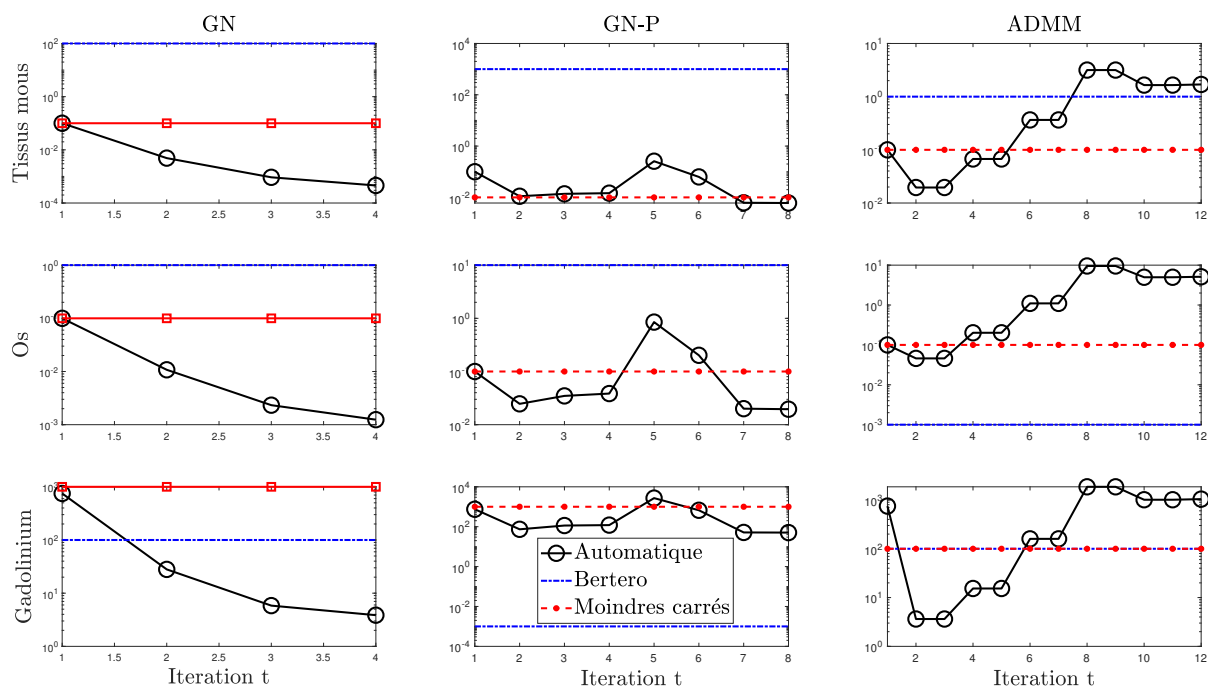
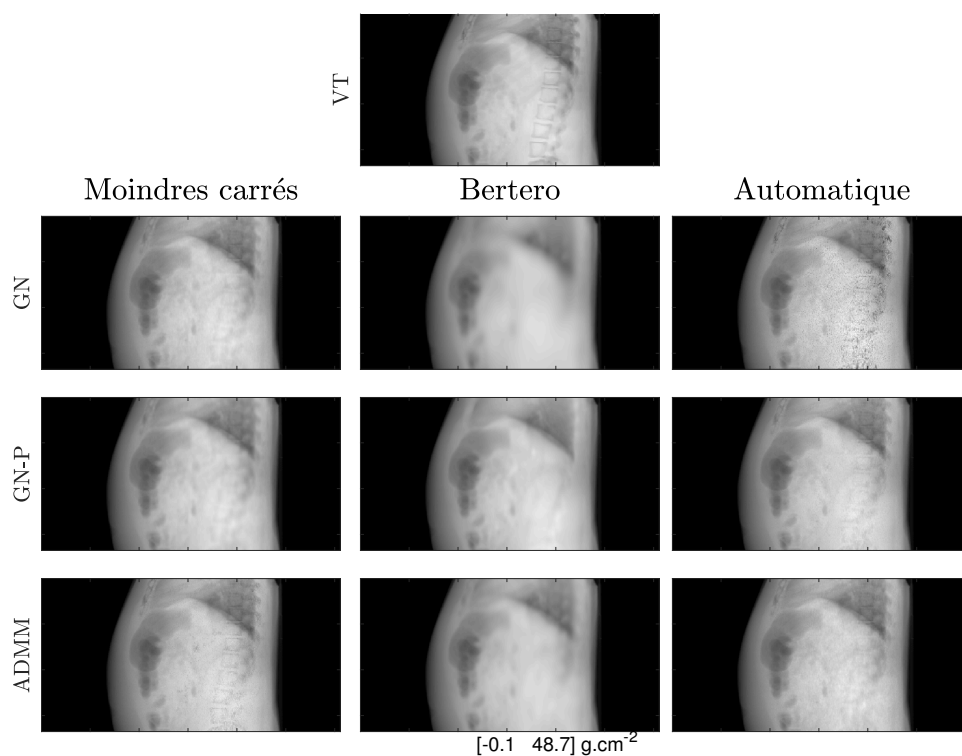
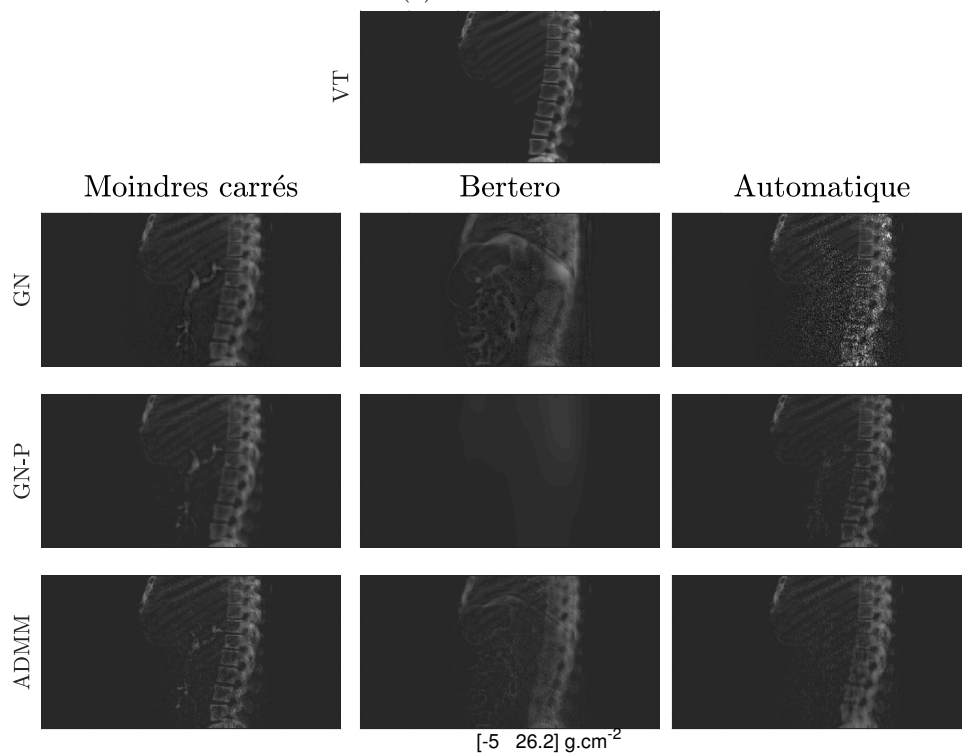


FIGURE VII.2 – Évolution de β pendant les itérations t pour un choix automatique, comparé avec le choix par moindres carrés et celui de Bertero. Nous considérons ici $\theta = 90^\circ$.

pouvons comprendre ceci en regardant l'évolution de la valeur des β_m au fur et à mesure des itérations t sur les figures VII.1 et VII.2 (pour $\theta = 0^\circ$ et $\theta = 90^\circ$). Nous pouvons voir que la valeur obtenue avec le choix par moindres carrés est la même pour les GN et GN-P, sauf pour les tissus mous. GN-P "grave" autour des valeurs optimales tout au long des itérations, tandis que GN conserve un équilibre entre chaque matériau. L'algorithme ADMM trouve des β plus grands que le choix par moindres carrés. En d'autres termes, le ratio des différents β_m est le même avec GN et le choix automatique qu'avec GN et le choix par moindres carrés. Tandis que pour ADMM, le choix automatique a tendance à lisser les décompositions.



(a) Tissus mous



(b) Os

FIGURE VII.3 – Projections décomposées avec GN, GN-P et ADMM pour les différents choix des hyperparamètres pour $\theta = 0^\circ$. De haut en bas : VT, GN et GN-P. De gauche à droite : choix par moindres carrés, choix de Bertero et choix automatique pour les trois matériaux : tissus mous (VII.3a), os (VII.3b) et gadolinium (VII.3c).

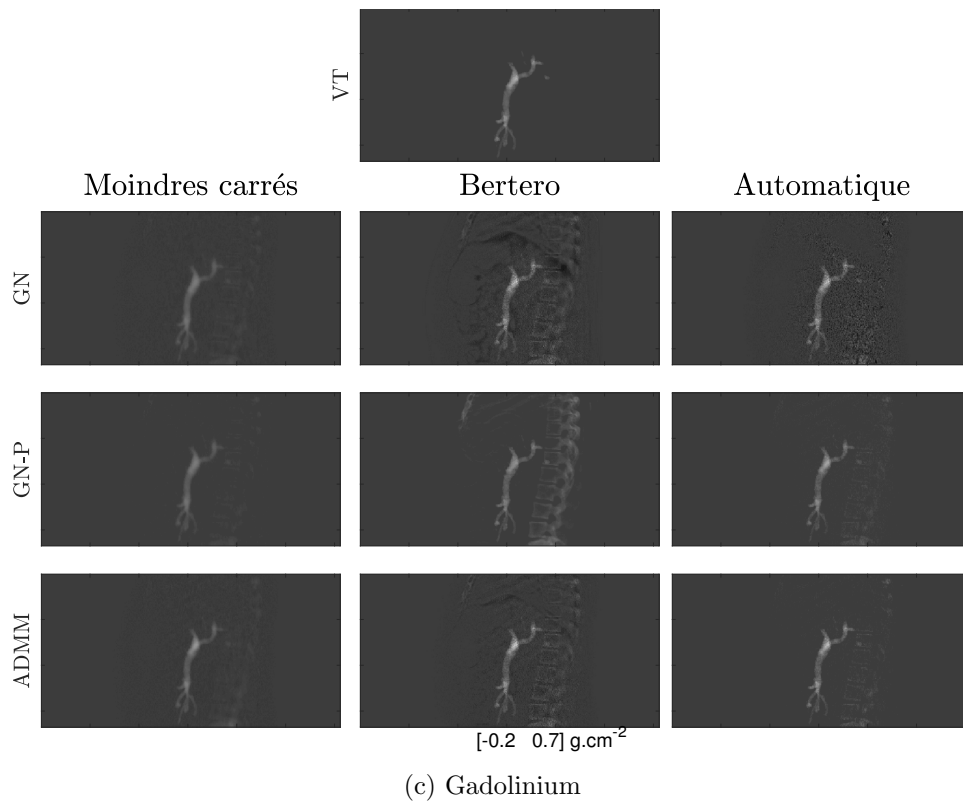


FIGURE VII.3 – Projections décomposées avec GN, GN-P et ADMM pour les différents choix des hyperparamètres pour $\theta = 0^\circ$. De haut en bas : VT, GN et GN-P. De gauche à droite : choix par moindres carrés, choix de Bertero et choix automatique pour les trois matériaux : tissus mous (VII.3a), os (VII.3b) et gadolinium (VII.3c). (cont.)

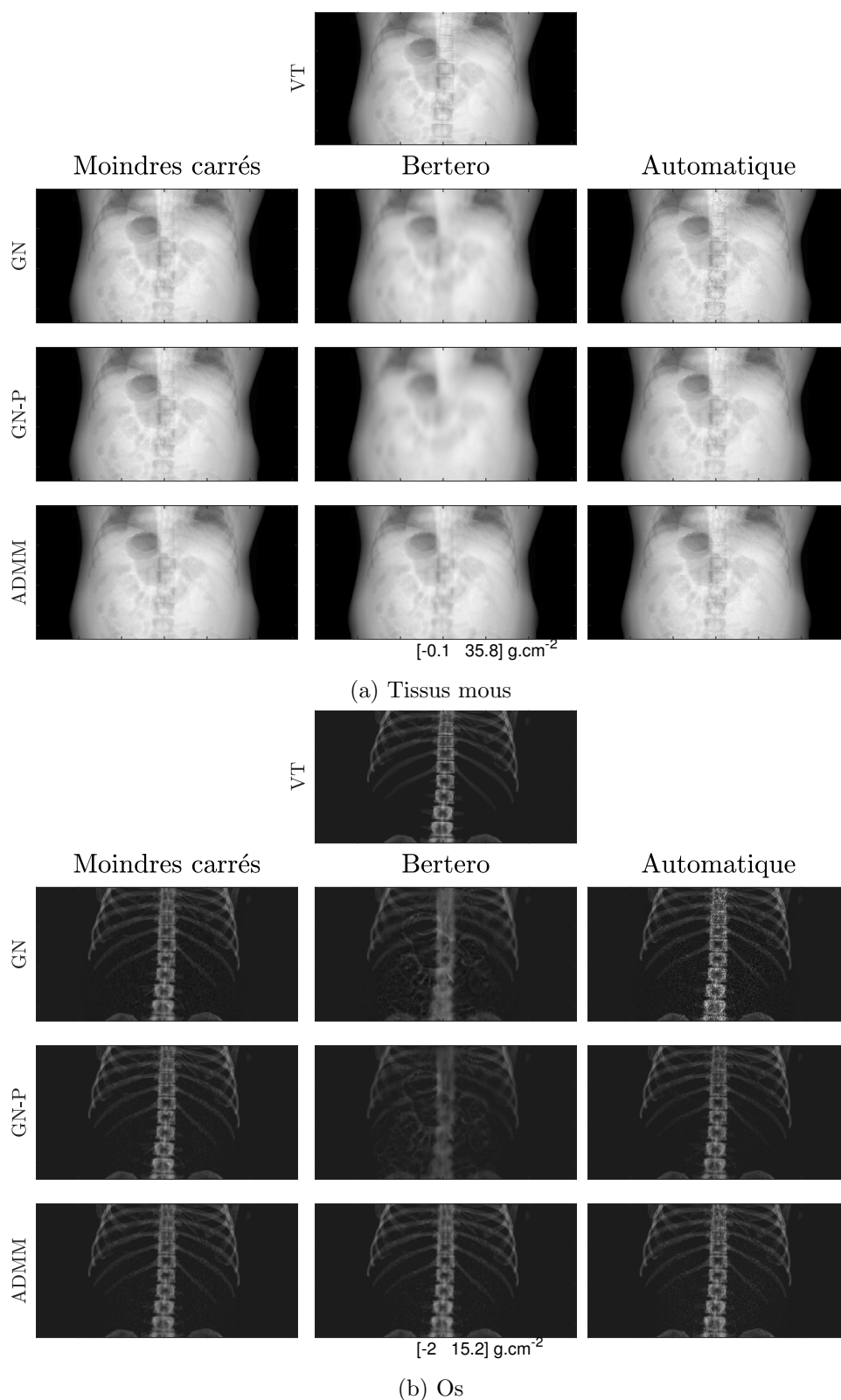


FIGURE VII.4 – Projections décomposées avec GN, GN-P et ADMM pour les différents choix des hyperparamètres pour $\theta = 90^\circ$. De haut en bas : VT, GN et GN-P. De gauche à droite : choix par moindres carrés, choix de Bertero et choix automatique pour les trois matériaux : tissus mous (VII.4a), os (VII.4b) et gadolinium (VII.4c).

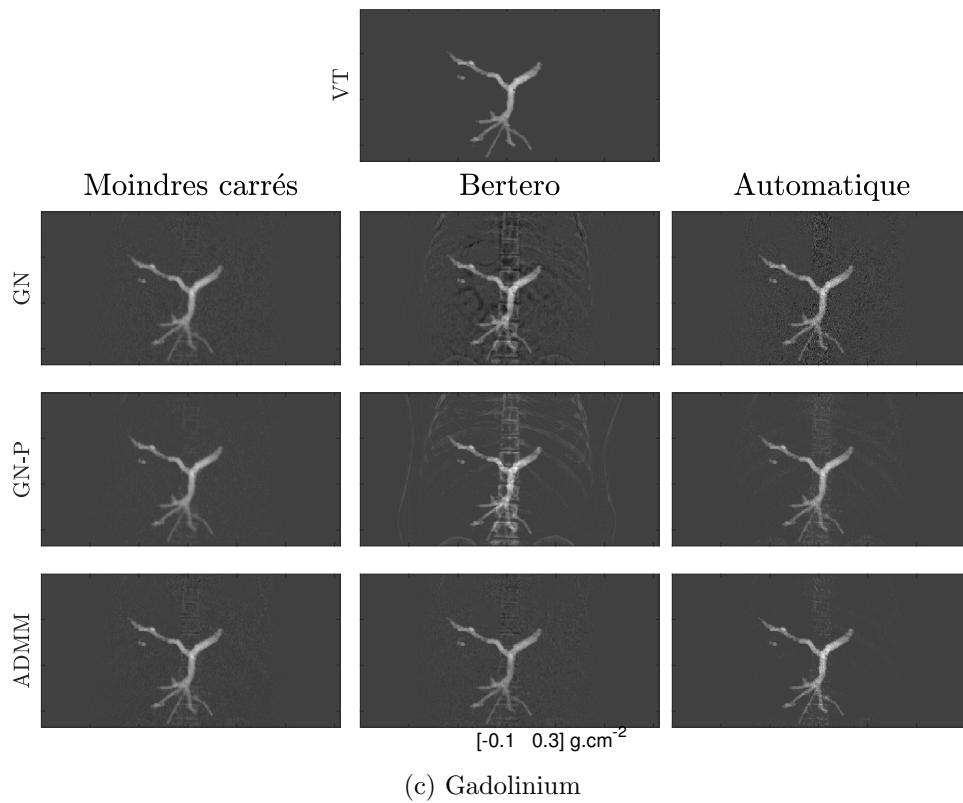


FIGURE VII.4 – Projections décomposées avec GN, GN-P et ADMM pour les différents choix des hyperparamètres pour $\theta = 90^\circ$. De haut en bas : VT, GN et GN-P. De gauche à droite : choix par moindres carrés, choix de Bertero et choix automatique pour les trois matériaux : tissus mous (VII.4a), os (VII.4b) et gadolinium (VII.4c). (cont.)

VII.6 Décomposition de tous les angles avec le choix automatique

Nous pouvons maintenant décomposer les données spectrales avec le choix automatique pour $\theta = [0^\circ, 179^\circ]$. Nous conserverons donc les paramètres précédents pour effectuer les décompositions.

VII.6.1 Décomposition dans les projections

Sur la figure VII.5, nous montrons les décompositions pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$ des trois matériaux : tissus mous, os et gadolinium avec les algorithmes GN, GN-P, ADMM et NM-MV avec le choix automatique des hyperparamètres. Nous pouvons voir que les décompositions sont visuellement bonnes pour tous les algorithmes, sauf pour NM-MV. Nous distinguons bien chaque matériau pour les deux angles. Sur les algorithmes restant, les cartes trouvées par ADMM et GN-P sont très similaires, mais restent meilleures que celles de GN. Afin de départager les algorithmes, nous montrons sur la figure VII.6 l'évolution de l'erreur ξ_θ et $SSIM_\theta$ en fonction de θ . Nous pouvons voir que NM-MV reste l'algorithme qui donne les moins bonnes cartes. Même si GN donne des cartes visuellement correctes, l'erreur quadratique et le SSIM associés sont moins bons pour ADMM et GN-P. Enfin, GN-P permet d'avoir une même erreur ξ_θ que ADMM, mais les cartes ont un meilleur $SSIM_\theta$. Des quatre algorithmes, GN-P nous donne les meilleures cartes. De plus, comme vu précédemment, cela se fait rapidement (~ 6 min par projection, parallélisable).

VII.6.2 Reconstruction des images

Sur la figure VII.8, nous montrons les coupes pour $z = \{1, 140\}$ des volumes des tissus mous, os et gadolinium décomposés avec les différents algorithmes. Nous pouvons voir que ADMM permet de réduire l'apparition de gadolinium dans l'image d'os par rapport aux autres méthodes grâce à la contrainte d'égalité. Cependant, GN-P nous donne tout de même de meilleures coupes que GN et ADMM. Visuellement, les structures anatomiques sont mieux définies (zoom sur les tissus mous) et le bruit est moins présent (zoom de l'os). De manière qualitative, GN-P se distingue maintenant de ADMM en ayant une erreur ξ_z plus faible et un $SSIM_z$ plus grand, comme affiché figure VII.7, ces deux algorithmes donnant de meilleures métriques que GN.

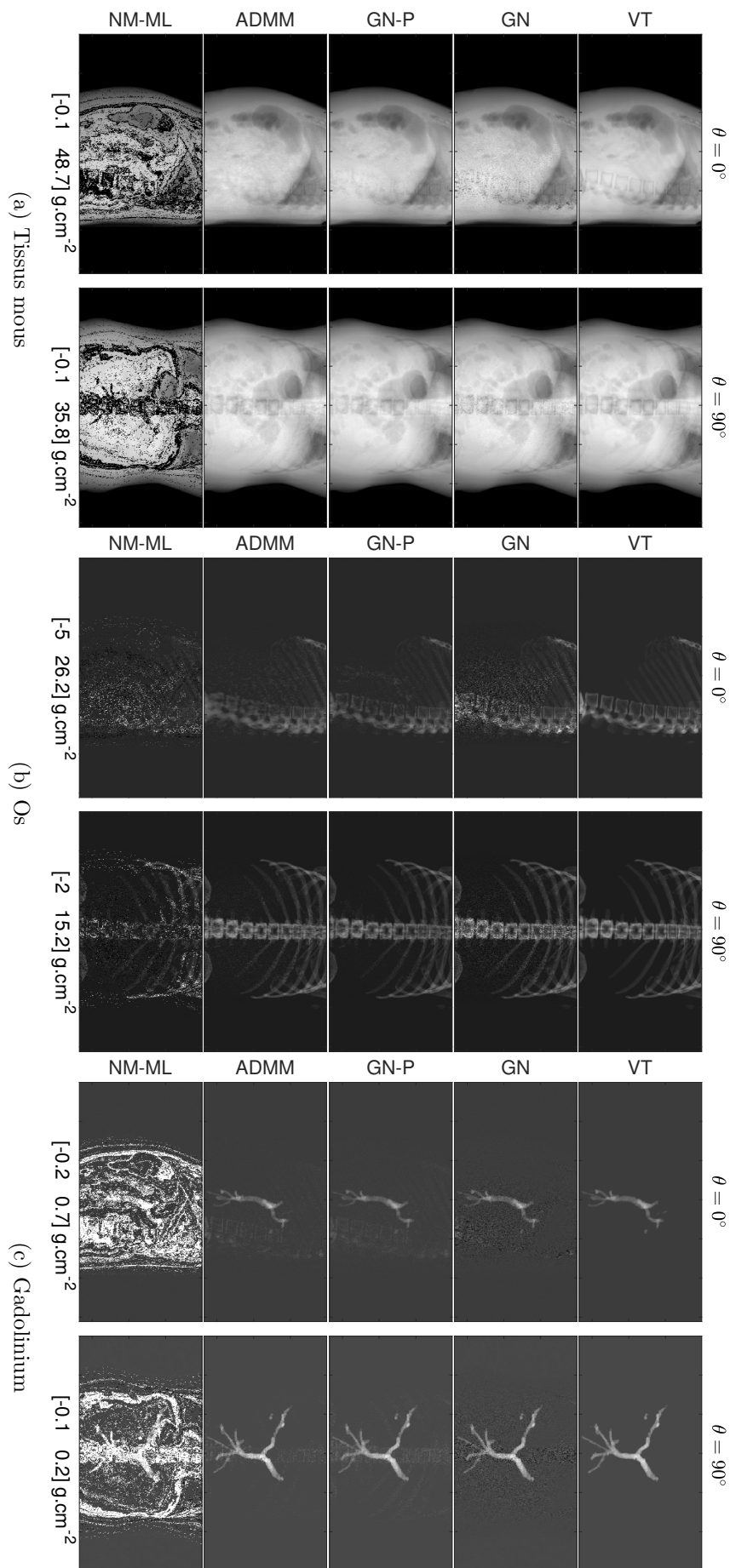


FIGURE VII.5 – Carte des matériaux décomposés pour $\theta = \{0^\circ, 90^\circ\}$. De gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium, et de haut en bas : vérité terrain (VT), Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV) avec le choix automatique des hyperparamètres.

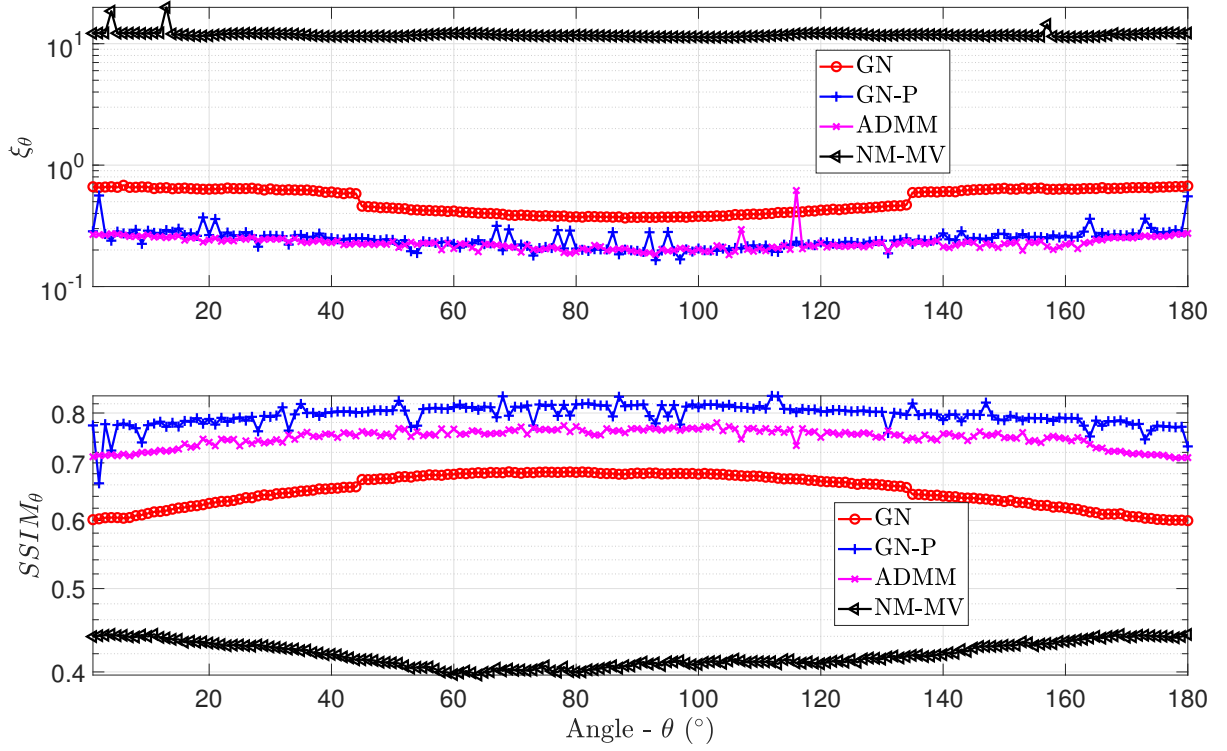


FIGURE VII.6 – Erreur quadratique moyenne ξ_θ (première ligne) et le SSIM (deuxième ligne) dans les projections pour GN, GN-P et NM-MV, $\forall \theta$ avec le choix automatique des hyperparamètres.

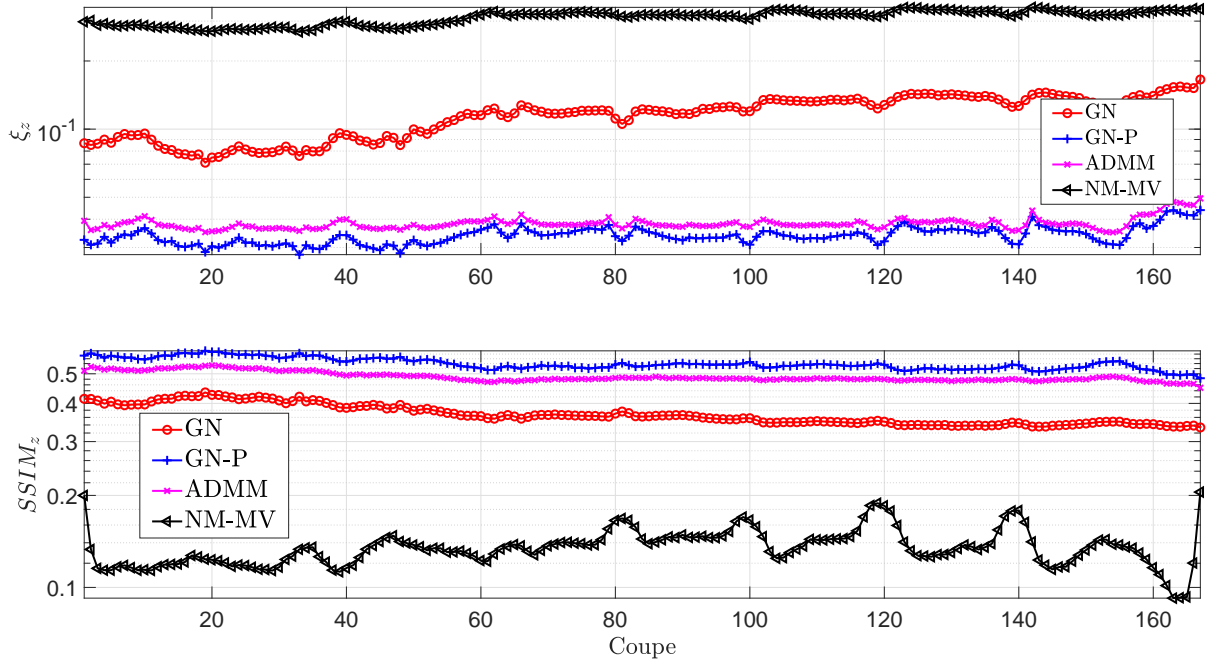


FIGURE VII.7 – Erreur quadratique moyenne ξ_z (première ligne) et le SSIM (deuxième ligne) dans l'objet pour GN, GN-P et NM-MV, $\forall z$ avec le choix automatique des hyperparamètres.

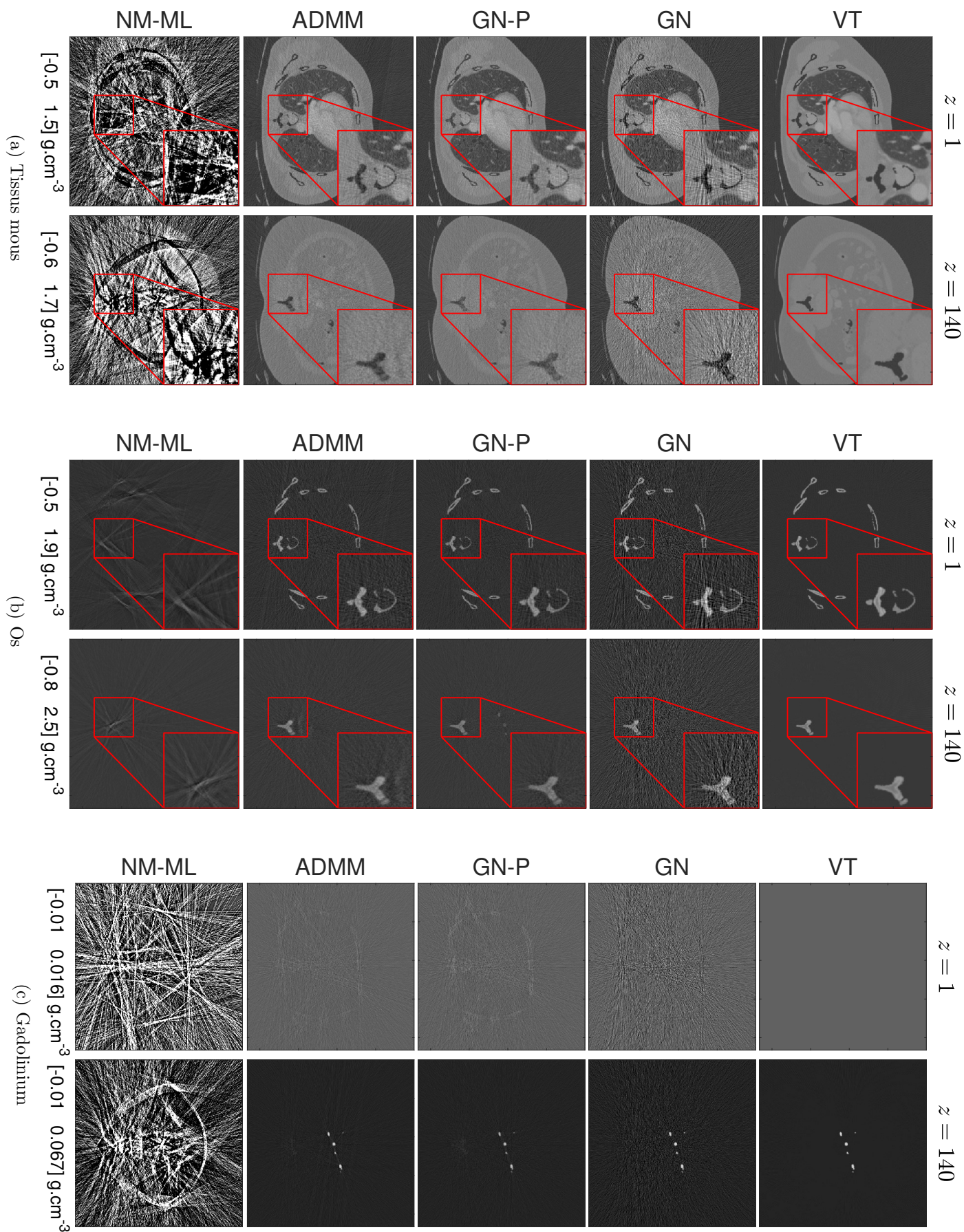


FIGURE VII.8 – Cartes des matériaux reconstruits pour $z = \{1, 140\}$. De gauche à droite : tissus mous, os et gadolinium, et de haut en bas : vérité terrain (VT), Gauss-Newton (GN), Gauss-Newton Projeté (GN-P) et Nelder-Mead (NM-MV) avec le choix automatique des hyperparamètres.

VII.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décomposé un fantôme numérique de thorax composé de trois matériaux : tissus mous, os et gadolinium (dans la veine porte). Avec trois matériaux et autant de termes de régularisation, trouver la combinaison de paramètres peut être très long. Nous avons donc utilisé un choix automatique des hyperparamètres où leur estimation était faite au cours des itérations. Nous avons montré que ce choix était très efficace en termes d'erreur et de temps de calcul par rapport au balayage de toutes les combinaisons possibles et d'un choix proposé pour le bruit de Poisson dans la littérature. La validation du choix effectuée, nous avons vu que l'algorithme proposé (GN-P) nous permettait d'obtenir de meilleures images et de meilleurs résultats pour les différentes métriques d'évaluation que l'algorithme non contraint et que l'état de l'art. Cette tendance est vérifiée dans le domaine des projections et celui de l'objet.

Chapitre VIII

Décompositions de données expérimentales

Contents

VIII.1 Introduction	133
VIII.2 Description de l'acquisition	133
VIII.3 Méthodes de décomposition	135
VIII.3.1 Fonction de coût	135
VIII.3.2 Contraintes	136
VIII.4 Paramètres des algorithmes	136
VIII.5 Décompositions sous contraintes de positivité pour les cartes de matériaux	137
VIII.5.1 Décompositions dans les projections	137
VIII.5.2 Reconstruction des projections décomposées	137
VIII.5.3 Reformulation des contraintes associées à la décomposition	137
VIII.6 Décompositions sous contraintes de positivité du coefficient d'atténuation linéique	142
VIII.7 Décompositions sous contraintes de positivité sur la carte du gadolinium .	144
VIII.7.1 Décompositions dans les projections	144
VIII.7.2 Reconstruction des projections décomposées	144
VIII.8 Conclusion	149

Chapitre VIII

LES méthodes précédentes nous ont permis d'améliorer la qualité des décompositions dans le domaine des projections par rapport aux méthodes classiques. Elles ont été testées sur des données numériques. Pendant cette thèse, nous avons eu la chance de pouvoir les tester sur des données issues d'un prototype de scanner spectral installé à Lyon, au CERMEP.

VIII.1 Introduction

Les chapitres précédents présentent des méthodes pour la décomposition des données spectrales. Elles ont été testées sur des données numériques, qu'elles aient été obtenues à partir d'une souris digitalisée (DigiMouse) ou d'un thorax humain. Cela nous a permis de valider nos approches et de comprendre le problème de la décomposition en profondeur. La TDMS présente un important potentiel dans le milieu clinique. C'est pourquoi nous allons présenter dans ce chapitre la décomposition de données acquises sur un prototype de scanner spectral. Ce nouvel appareil a été installé au CERMEP un centre d'imagerie situé aux Hospices Civils de Lyon à Bron et inauguré le 29 avril 2019. C'est grâce à cet appareil que la prise d'images a été effectuée. Il a été développé par Philips dans le cadre du projet européen SPCCT (*Spectral Photon Counting Computed Tomography*)¹. Ce projet regroupe onze institutions : Université Claude Bernard Lyon 1 (organisme de pilotage), Philips GmbH, Philips Medical Systems Technologies LTD, Mathym, Università Degli Studi Di Torino, VOXCAN, Erasmus Universiteit Rotterdam, Cliniques Universitaires Saint-Luc, LYON INGÉNIERIE PROJETS, King's College London, BRACCO IMAGING SPA.

Dans ce chapitre, nous utiliserons des données expérimentales acquises sur un fantôme contenant des tubes d'un mélange gadolinium-iode pour différentes concentrations. Nous utiliserons les algorithmes de minimisation précédents : GN-P et ADMM. De plus, le choix automatique des hyperparamètres sera également utilisé. Ces méthodes seront comparées à un algorithme de type Gauss-Newton.

VIII.2 Description de l'acquisition

Le scanner spectral installé au CERMEP (Fig. VIII.1) nous a permis d'obtenir des données. Le détecteur fournit typiquement $I = 5$ plages d'énergies et sa fonction de réponse \mathbf{d}_i a été mesurée expérimentalement à l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) par Philips (Peyrin (1999)). Un synchrotron permet d'envoyer un faisceau mono-énergétique, en balayant

1. <http://www.spcct.eu/>



FIGURE VIII.1 – Photo du scanner spectral de Philips installé au CERMEP.

Numéro du tube	1	2	3	4	5	6	7
Iode (mg.cm^{-3})	10.0	8.3	6.7	5.0	3.3	1.7	0.0
Gadolinium (mg.cm^{-3})	0.0	1.2	2.4	3.6	4.8	6.0	7.3

TABLE VIII.1 – Concentrations en gadolinium et en iode des tubes du fantôme QRM.

toute la gamme d'énergies voulues, il est donc possible d'obtenir la réponse en énergie du détecteur. Le spectre incident n^0 est donné par le constructeur.

Le fantôme imagé provient de la société QRM, référencé sur leur catalogue comme "QRM-Abdomen". Il est composé de $M = 3$ matériaux : d'une résine imitant l'atténuation de l'eau (tout le fantôme hors tubes et vertèbre), de gadolinium (dans les tubes numéro 2 à 7) et d'iode (dans les tubes 1 à 6). La vertèbre sera dans l'image de l'iode car l'atténuation de l'os peut être approximé par celle de l'iode dans cette acquisition (car le "K-edge" de l'iode se trouve dans une plage d'énergie). Les tubes sont composés d'iode et de gadolinium à différentes concentrations décrites dans la table VIII.1. L'acquisition a été effectuée avec un faisceau conique, avec une tension d'accélération du tube à rayons X de 120 kV et comme courant de 330 mA, et avec un détecteur circulaire. Les projections font 8×943 pixels et sur 2400 angles répartis entre 0 et 360° .

En plus de ce fantôme, des données sur petit animal sont en cours de traitement.

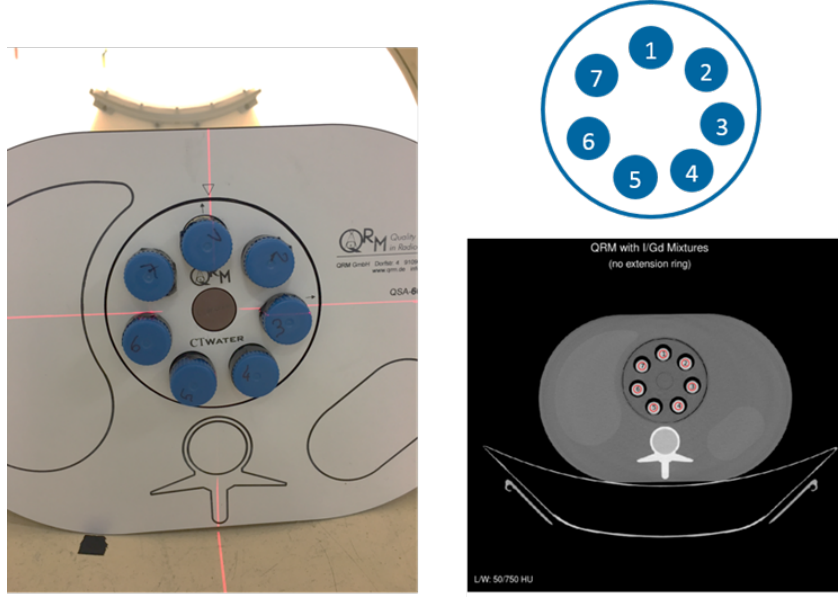


FIGURE VIII.2 – Fantôme QRM avec les tubes contenant un mélange de gadolinium et d'iode à différentes concentrations (à gauche), la numérotation de ces tubes (haut à droite) et leur emplacement sur la reconstruction à partir des données en TDM classique.

VIII.3 Méthodes de décomposition

La décomposition en base de matériaux : iode, gadolinium et eau, se fera dans le domaine des projections. Contrairement aux données simulées, nous ferons la décomposition sur le sinogramme, image représentant la projection d'une coupe de l'objet pour tous les angles. Ce choix est motivé parce que le détecteur utilisé est étroit (8 pixels) et que la régularisation spatiale est plus effective s'il y a plus de pixels. La reconstruction tomographique des données sera faite avec l'algorithme de Feldkamp, Davis et Kress (FDK) [30], qui est l'équivalent de la rétroprojection filtrée (sous-section I.5.2) pour des faisceaux coniques.

VIII.3.1 Fonction de coût

Dans ce chapitre, la décomposition se fera sur les sinogrammes (et non sur les projections comme précédemment). Nous cherchons à récupérer la carte des matériaux $\mathbf{a}(z) = [\mathbf{a}_1^\theta(z), \dots, \mathbf{a}_m^\theta(z), \dots, \mathbf{a}_M^\theta(z)]$ pour chaque coupe z , où $\mathbf{a}_m^\theta(z) \in \mathbb{R}^{N \times P}$, avec P le nombre de pixels sur une ligne du détecteur, M le nombre de matériaux et N le nombre de projections. Cette décomposition se fera à partir des données $\mathbf{s}^\theta(z) = [\mathbf{s}_1^\theta(z), \dots, \mathbf{s}_i^\theta(z), \dots, \mathbf{s}_I^\theta(z)]$, où $\mathbf{s}_i^\theta \in \mathbb{R}^{N \times P}$ et I le nombre de plages d'énergies. Pour des raisons de visibilité, nous omettrons l'indice z , les méthodes développées se feront de manière identique pour toutes les coupes z . Afin de récupérer la carte \mathbf{a} , nous minimiserons la fonction de coût suivante :

$$\mathcal{C}(\mathbf{a}) = \mathcal{D}(\mathbf{a}) + \mathcal{R}(\mathbf{a}) \quad (\text{VIII.1})$$

où \mathcal{D} est un terme d'attache aux données quadratique :

$$\mathcal{D}(\mathbf{a}) = \|\mathbf{s} - \mathcal{F}(\mathbf{a})\|_{\mathbf{W}}^2 \quad (\text{VIII.2})$$

avec $\|\cdot\|_{\mathbf{W}}$ la norme pondérée par la matrice $\mathbf{W} = \text{diag}(\frac{1}{\sqrt{s+1}})$. Le terme de régularisation est le suivant :

$$\mathcal{R}(\mathbf{a}) = \beta_{\text{Id}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{Id}}\|_2^2 + \beta_{\text{Gd}} \|\nabla \mathbf{a}_{\text{Gd}}\|_2^2 \quad (\text{VIII.3})$$

où β_m est le paramètre de régularisation associé au matériau m . L'eau n'est pas régularisée, car il s'est avéré que la décomposition était meilleure sans. De plus, les paramètres de régularisation seront choisis par la méthode automatique décrite précédemment en [section VII.3](#).

VIII.3.2 Contraintes

Nous utiliserons la contrainte de positivité (chapitres V et VI) :

$$\mathbf{a} \geq 0 \quad (\text{VIII.4})$$

Nous ne pouvons pas contraindre la solution par une contrainte d'égalité, car nous n'avons ni accès à la taille des tubes, ni à la quantité qui a été injectée. Pour respecter la contrainte (VIII.4), nous utiliserons un algorithme de Gauss-Newton Projeté (GN-P) décrit par l'Algorithme 5 et ADMM décrit par l'Algorithme 6. Pour comparaison, nous utiliserons un algorithme de type Gauss-Newton (GN) décrit par l'Algorithme 3, qui est non contraint. Nous ne présenterons pas les décompositions avec Nelder-Mead (NM-MV), car le temps de calcul était trop long (en 48 h, 1 % seulement des pixels étaient décomposés).

VIII.4 Paramètres des algorithmes

Les algorithmes de décompositions GN, GN-P et ADMM utilisent la même solution initiale $\mathbf{a}_0 = [0, 0, 0]$ g.cm⁻², les paramètres de régularisation initiaux $\beta_0 = [1, 1]$ et $\gamma = 300$ (pour le choix automatique des paramètres). La boucle du choix des paramètres sera arrêtée si l'évolution des β est trop faible, $\delta\beta_{\min} = 10^{-1}$. Les paramètres des Lagrangiens seront initialisés à $\nu_1 = 0$ et $\beta_1 = 10^{-2}$, qui sera multiplié par $\omega = 10$ à chaque itération. GN-P aura comme bornes inférieures initiales $\ell_0 = [-50, 50, 50]$ g.cm⁻² et $p_{\min} = 20$ % pour $L_m = 0$ g.cm⁻². Les critères d'arrêt pour les différents algorithmes sont les suivants :

- GN (Algorithme 3, [chapitre IV](#)) et GN-P (Algorithme 5, [chapitre V](#))
 - * Décroissance de la fonction de coût : $\delta\mathcal{C}_{\min} = 10^{-3}$
 - * Nombre maximum d'itérations : $k_{\max} = 150$
 - * Plus petit pas calculé par *LineSearch* : $\lambda_{\min} = 5.10^{-2}$
- ADMM (Algorithme 6, [chapitre VI](#))
 - * Boucle interne (algorithme de minimisation de type Gauss-Newton pour \mathbf{a})
 - $\delta\mathcal{C}_{\min} = 10^{-3}$
 - $k_{\max} = 150$
 - $\lambda_{\min} = 5.10^{-2}$
 - * Boucle externe (minimisation de \mathcal{Q})
 - Si la contrainte d'inégalité est respectée : $\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_2^2 < 10^{-3}$

VIII.5 Décompositions sous contraintes de positivité pour les cartes de matériaux

VIII.5.1 Décompositions dans les projections

La figure VIII.3 présente les décompositions des sinogrammes pour les différents matériaux avec les algorithmes GN, GN-P et ADMM pour la coupe du milieu $z = 4$. En plus des décompositions, nous traçons le profil de l'image pour le 1200-ème angle. Nous pouvons voir que les décompositions du gadolinium (VIII.3b) et de l'eau (VIII.3c) obtenues avec GN semblent correctes (à ce stade nous ne pouvons pas en être certain mais l'image après la reconstruction tomographique sera plus parlante). Cependant, l'image d'iode (VIII.3a) présente des valeurs négatives dans l'objet. Cela peut se voir sur le profil correspondant, mais également sur l'image où cela crée une "ombre" là où l'eau se situe. Cet effet rend la positivité impossible à imposer pour les algorithmes GN-P et ADMM. Le fait d'avoir imposé une concentration de gadolinium positive rend les images de l'iode et l'eau très différentes de la décomposition de GN, qui semble correcte. La reconstruction tomographique permettra de clarifier quelle est la meilleure décomposition.

VIII.5.2 Reconstruction des projections décomposées

La figure VIII.4 présente les reconstructions tomographiques des différents matériaux à partir des sinogrammes précédents. Nous affichons également une coupe faite numériquement avec les concentrations idéales pour une meilleure comparaison. Un zoom sur les tubes et sur la vertèbre est effectué pour mieux distinguer ces zones d'intérêt. Nous pouvons maintenant voir que la reconstruction obtenue avec GN est correcte : nous retrouvons les structures comme montrées sur la figure VIII.2 et sur la vérité terrain. Les reconstructions avec ADMM et GN-P sont visuellement mauvaises, aucun élément du fantôme ne peut être retrouvé.

VIII.5.3 Reformulation des contraintes associées à la décomposition

Le fait que les cartes de matériaux soient incorrectes pour les algorithmes de minimisation sous contraintes vient du fait que les fonctions d'atténuation ne correspondent pas à la réalité. Ou plutôt, le fantôme n'est pas composé uniquement des matériaux présents dans la base choisie, il peut y avoir des défauts, par exemple la résine qui est utilisée pour simuler l'eau peut avoir un écart au niveau de la fonction d'atténuation τ_m avec la valeur réelle pour l'eau. Il y a donc un effet compensatoire entre l'iode et l'eau pour que les cartes des matériaux \mathbf{a}_m corrigent l'écart au modèle. Il est donc nécessaire d'ajuster les contraintes pour résoudre ce problème. Deux conditions peuvent être utilisées pour obtenir des cartes de matériaux cohérentes en les contraignant pour obtenir de meilleures décompositions que les méthodes classiques.

- La première est le fait que le coefficient d'atténuation linéique projeté (CAL) μ doit être positif pour tous les pixels et toutes les énergies. Nous rappelons le modèle du CAL projeté au pixel p à l'énergie E :

$$\mu(p, E) = \sum_m \mathbf{a}_m(p) \tau_m(E) \quad (\text{VIII.5})$$

Dans le cas où les matériaux sont parfaits, le fait d'avoir $\mathbf{a} \geq 0$ implique $\mu \geq 0$ (τ_m sera toujours positif car cela reflète une atténuation, un τ négatif correspond physiquement à de la création de photons). Cependant, dans ce cas, toutes les fonctions d'atténuation des matériaux composant le fantôme ne peuvent pas rentrer dans la décomposition. En effet, 42 % de pixels de μ sont négatifs dans les décompositions avec GN. Nous changerons donc de contrainte et reformulons le problème sous la forme :

$$\min_{\mathbf{a}} \mathcal{C}(\mathbf{a}) \quad \text{avec} \quad \mu \geq 0 \quad (\text{VIII.6})$$

Ce problème (VIII.6) ne pourra être résolu que par ADMM. GN-P ne peut contraindre que la variable qu'il met à jour. En effet, les ensembles d'indices \mathcal{I}^1 , \mathcal{I}^2 et \mathcal{I} doivent avoir la même taille que \mathbf{a} . La contrainte d'inégalité sera écrite pour ADMM sous la forme :

$$\mu = \mathbf{b} \quad (\text{VIII.7})$$

$$\mathbf{b} \in \Omega \quad (\text{VIII.8})$$

où $\Omega = \mathbb{R}^+$, la création des fonctions de Lagrange suivra le même principe que dans la [sous-section VI.2.1](#).

- La seconde condition utilise le fait que dans le modèle (VIII.5) et dans notre cas (avec iode, gadolinium et eau), seuls les paramètres utilisés pour le gadolinium sont exacts. En effet, sa discontinuité d'atténuation (K-edge), qui est à 50.2 keV, est entre deux plages d'énergies². Il est donc possible de décomposer ce matériau précisément. Dans le cas de l'iode, son K-edge (33.2 keV) se situe uniquement dans la première plage d'énergies. Cela revient à créer un autre matériau qui a une atténuation moyennée. Nous pouvons choisir d'écrire le problème de décomposition comme étant :

$$\min_{\mathbf{a}} \mathcal{C}(\mathbf{a}) \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}_{\text{gd}} \geq 0 \quad (\text{VIII.9})$$

ce qui revient à relaxer les contraintes initiales.

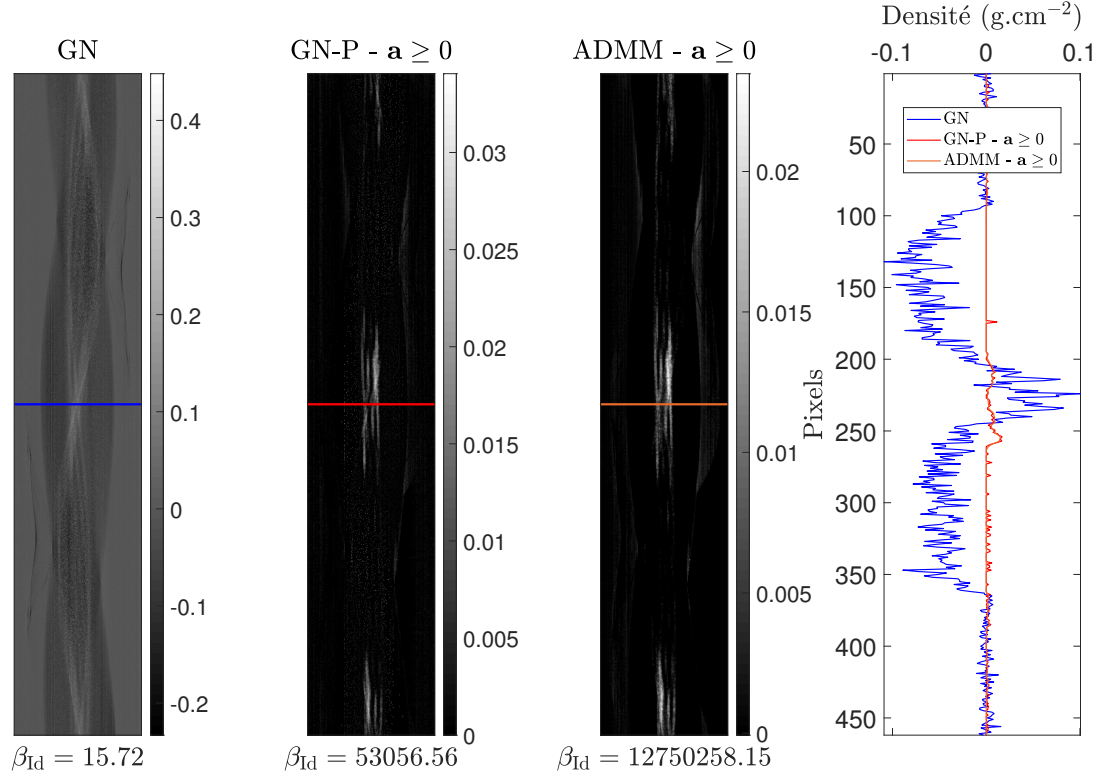
Ce problème (VIII.9) sera résolu par ADMM avec

$$\mathbf{a}_{\text{gd}} = \mathbf{b} \quad (\text{VIII.10})$$

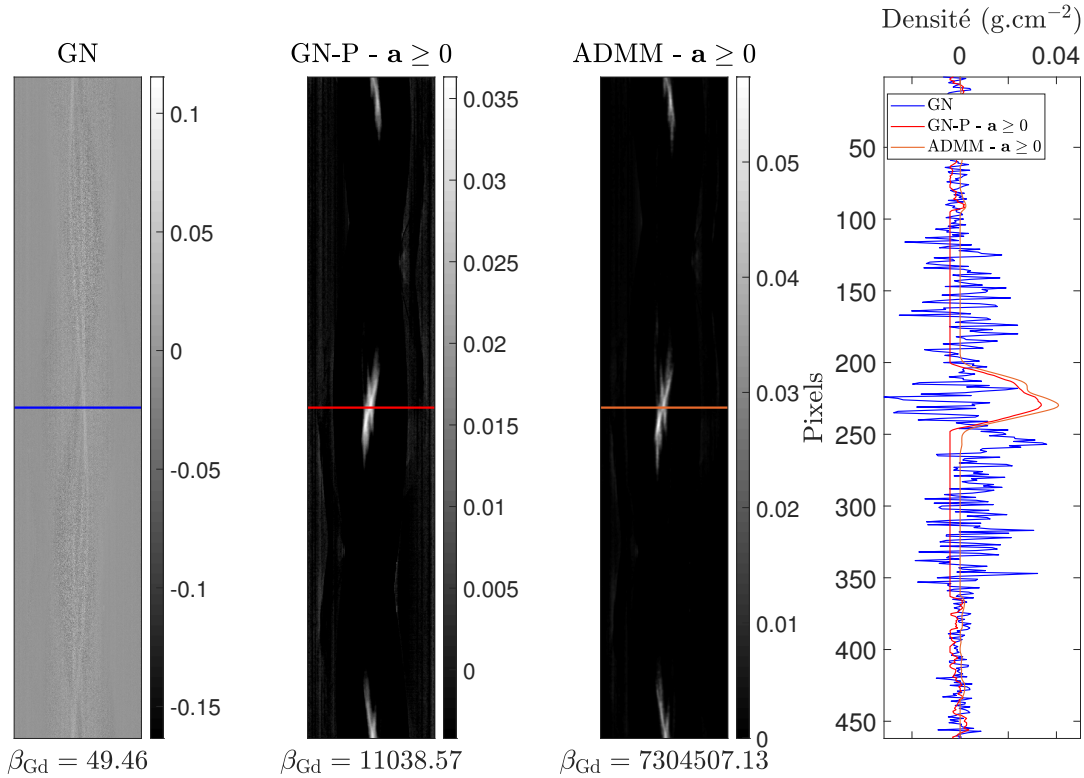
$$\mathbf{b} \in \Omega \quad (\text{VIII.11})$$

et GN-P avec comme consigne $L_{\text{gd}} = 0$ et $L_m = -\infty$ pour l'iode et l'eau.

2. Pour être plus précis, nous faisons un abus de langage en parlant de plage d'énergies. Il s'agit plutôt de réponse du détecteur. Lorsqu'une énergie se situe "dans" une plage d'énergies, cela veut dire que cette énergie va être comptée pour cette plage, qui a la plus grande probabilité de détecter cette énergie.

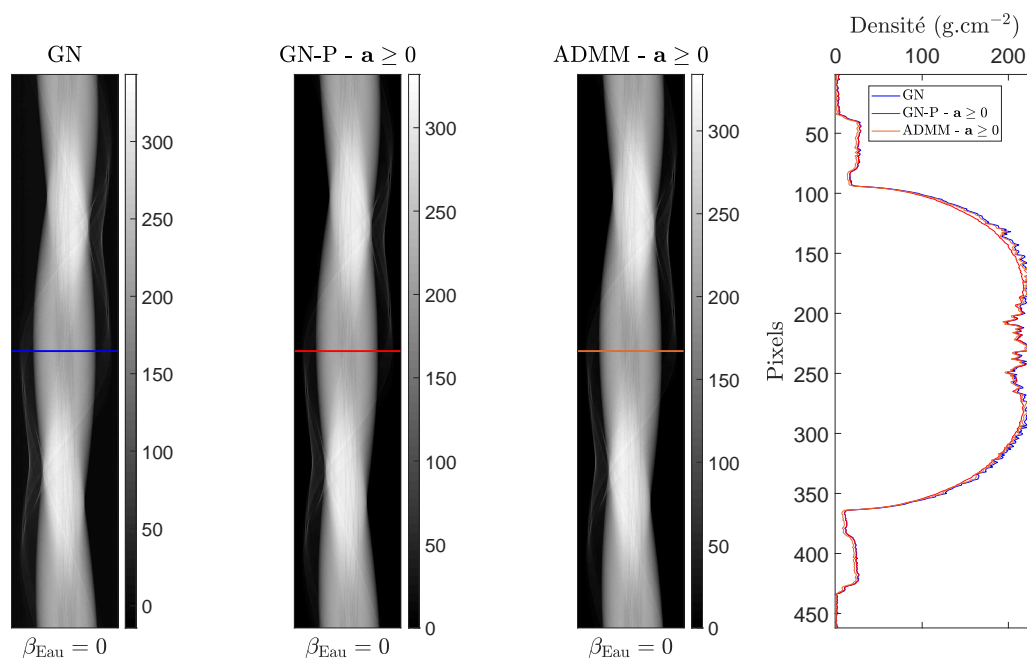


(a) Iode



(b) Gadolinium

FIGURE VIII.3 – Sinogrammes décomposés du fantôme QRM avec différents algorithmes (de gauche à droite) : GN, GN-P et ADMM. Ces deux derniers contraignent les cartes de matériaux à être positives pour l'iode VIII.3a, le gadolinium VIII.3b et l'eau VIII.3c. Le profil le long de la ligne tracée sur les sinogrammes (correspondant au 1200-ème angle) est montré tout à droite. Le paramètre de régularisation final obtenu par le choix automatique est également indiqué en dessous de l'image.



(c) Eau

FIGURE VIII.3 – Sinogrammes décomposés du fantôme QRM avec différents algorithmes (de gauche à droite) : GN, GN-P et ADMM. Ces deux derniers contraignent les cartes de matériaux à être positives pour l'iode VIII.3a, le gadolinium VIII.3b et l'eau VIII.3c. Le profil le long de la ligne tracée sur les sinogrammes (correspondant au 1200-ème angle) est montré tout à droite. Le paramètre de régularisation final obtenu par le choix automatique est également indiqué en dessous de l'image. (cont.)

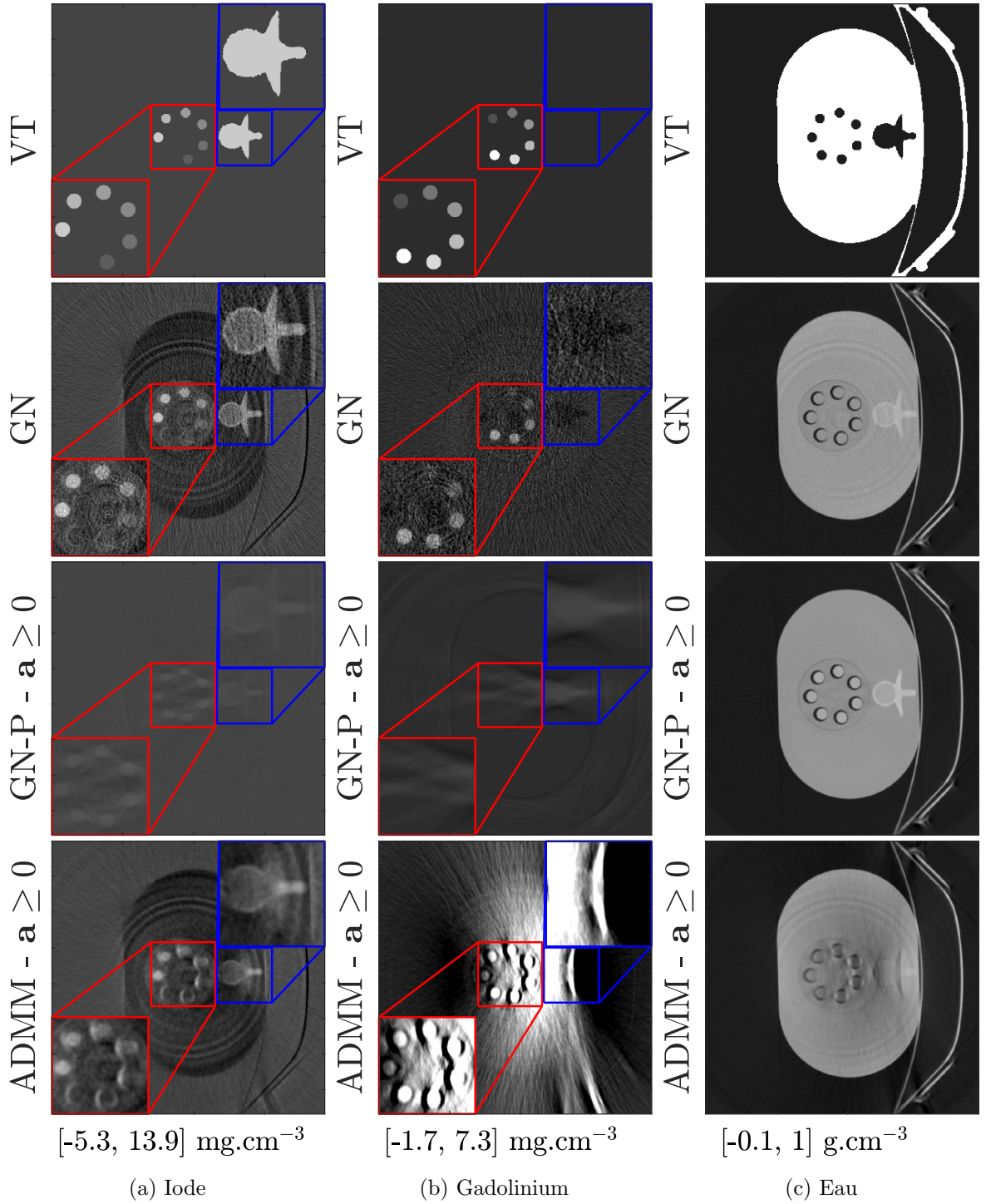


FIGURE VIII.4 – Coupes reconstruites à partir des projections décomposées du fantôme QRM avec différents algorithmes (de haut en bas, à partir de la deuxième ligne) : GN, GN-P et ADMM. La représentation numérique de la coupe idéale est affichée sur la première ligne. Les deux derniers algorithmes contraignent les cartes de matériaux à être positives pour les trois matériaux : iode VIII.4a, gadolinium VIII.4b et eau VIII.4c.

VIII.6 Décompositions sous contraintes de positivité du coefficient d'atténuation linéique

Les cartes décomposées avec GN et ADMM (avec comme contrainte $\mu \geq 0$) sont données sur la figure VIII.5. Le profil des images est également présenté. Sur le profil des images, la différence entre les méthodes est que les cartes obtenues avec ADMM semblent plus lisses, ce qui se confirme avec la valeur du paramètre de régularisation de chaque matériau qui est nettement plus grande avec ADMM. Outre un lissage plus fort, les cartes sont similaires : le profil de ADMM est une version très lissée de GN. Cependant, nous relevons 3.5 % des pixels μ négatifs avec ADMM, contre 42 % avec GN (en utilisant (VIII.5) à partir des cartes décomposées). Nous voyons que la contrainte est bien respectée avec ADMM et que cela se fait avec l'apparition d'un flou dans la solution. Pour atteindre cette contrainte, l'algorithme a dû beaucoup régulariser, ce qui ne donne pas de bons résultats visuellement. Le fait que les images soient similaires en terme de valeurs et que la contrainte est respectée nous confirme que le modèle n'est pas exact. S'il l'était, $\mu \geq 0$ serait différent par rapport à GN et ne serait pas juste une version beaucoup plus lissée. ADMM a ajusté des valeurs de pixels pour respecter la contrainte, mais sans répercussion sur la décomposition.

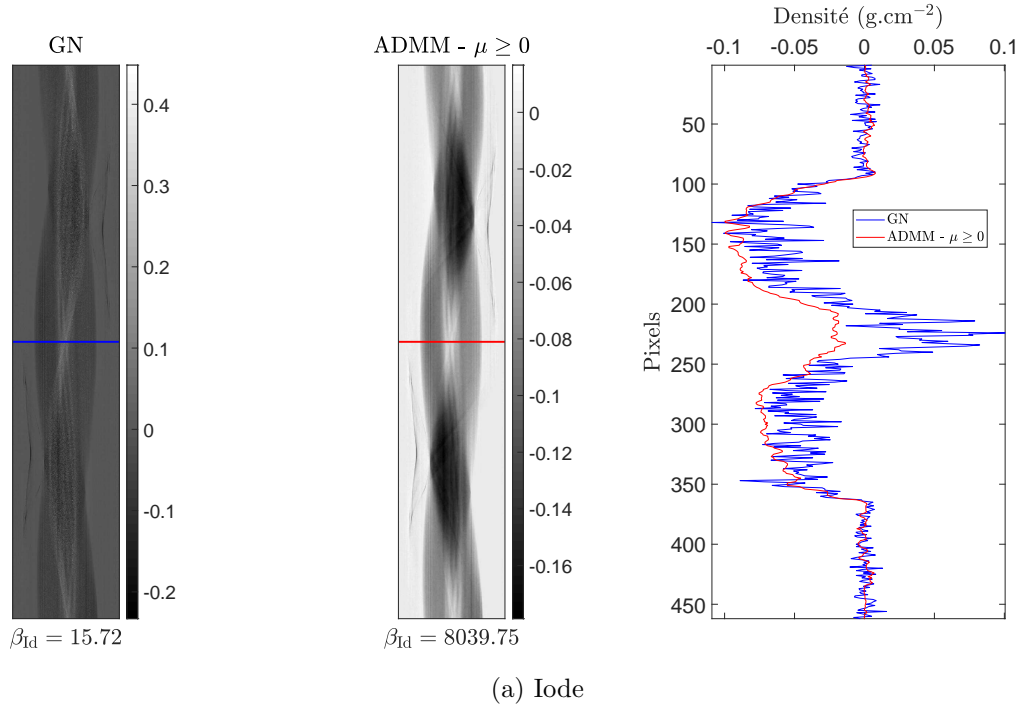


FIGURE VIII.5 – Décompositions des sinogrammes du fantôme QRM avec différents algorithmes (de gauche à droite) : GN et ADMM. Ce dernier contraint le coefficient d'atténuation linéique à être positif. Le fantôme est composé de trois matériaux : iode VIII.5a, gadolinium VIII.5b et eau VIII.5c. Le profil le long de la ligne tracée sur les images (correspondant au 1200-ème angle) est montré tout à droite. Le paramètre de régularisation final obtenu par le choix automatique est également indiqué en dessous de l'image.

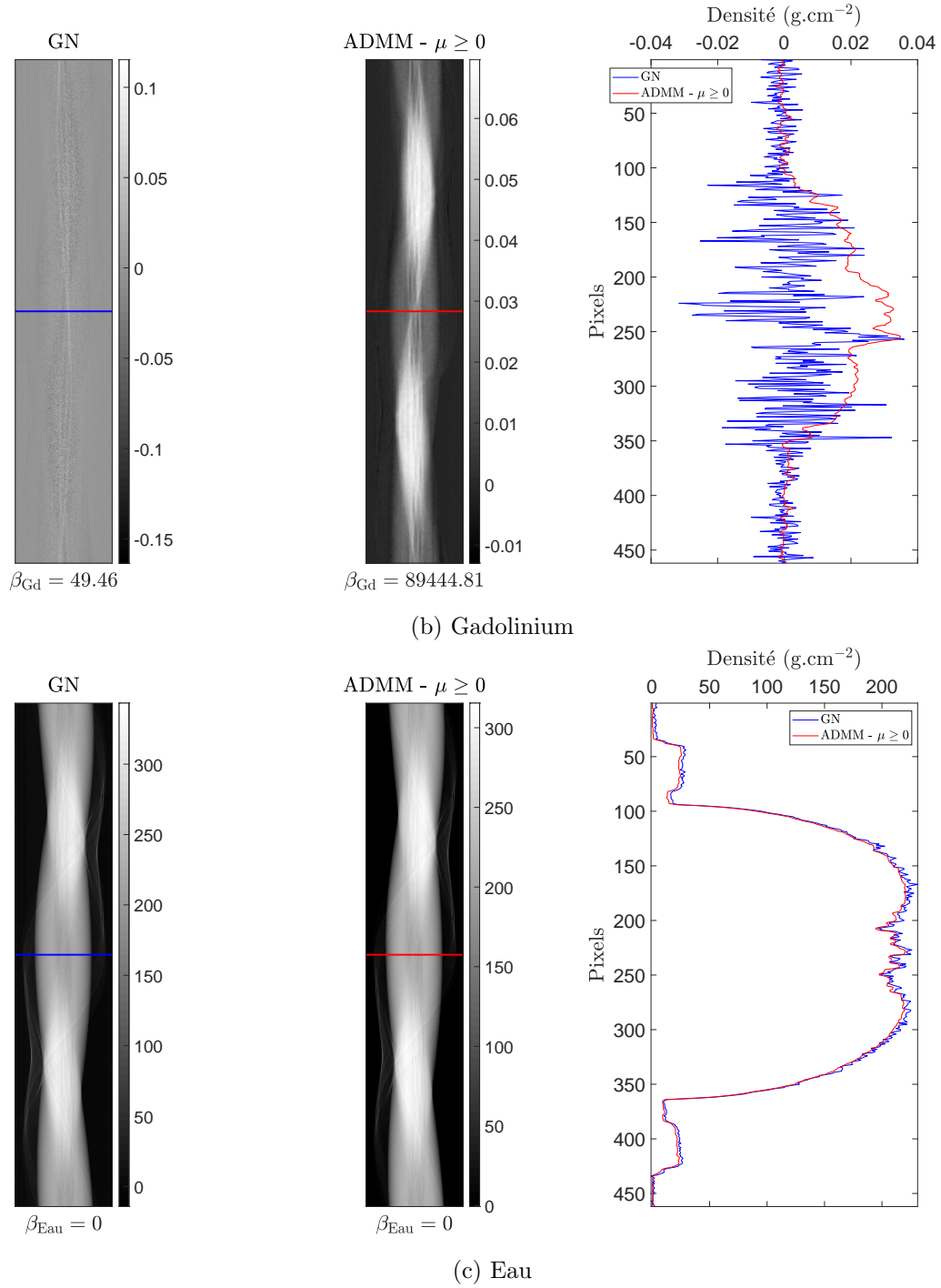


FIGURE VIII.5 – Décompositions des sinogrammes du fantôme QRM avec différents algorithmes (de gauche à droite) : GN et ADMM. Ce dernier contraint le coefficient d'atténuation linéique à être positif. Le fantôme est composé de trois matériaux : iode VIII.5a, gadolinium VIII.5b et eau VIII.5c. Le profil le long de la ligne tracée sur les images (correspondant au 1200-ème angle) est montré tout à droite. Le paramètre de régularisation final obtenu par le choix automatique est également indiqué en dessous de l'image. (cont.)

VIII.7 Décompositions sous contraintes de positivité sur la carte du gadolinium

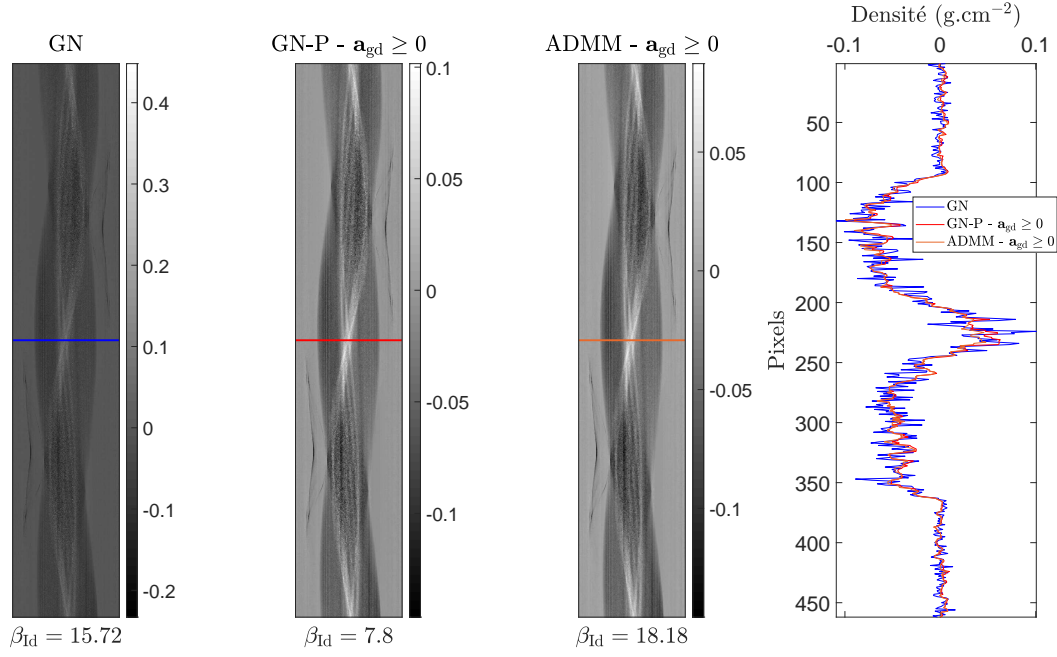
La contrainte de positivité sur les CAL n'est pas suffisante. Nous étudierons ici l'effet de la contrainte de positivité sur la carte du gadolinium ($\mathbf{a}_{\text{gd}} \geq 0$).

VIII.7.1 Décompositions dans les projections

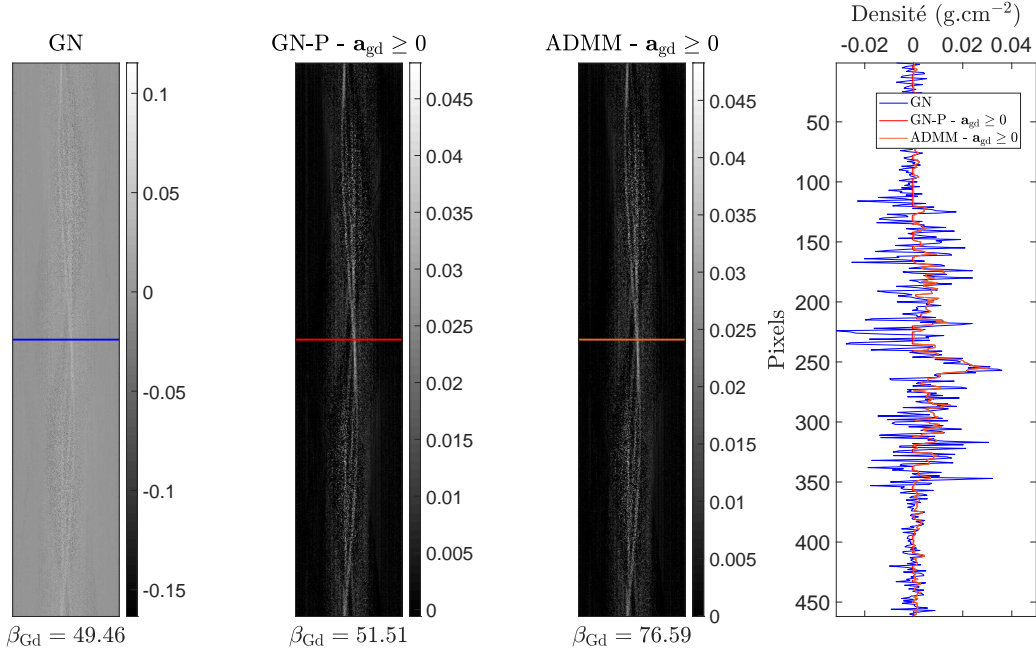
La figure VIII.6 montre les cartes décomposées avec GN, GN-P et ADMM ainsi que leurs profils. Ces derniers nous montrent qu'effectivement le gadolinium est bien positif. Il apparaît que les tubes dans le sinogramme sont plus facilement reconnaissables avec GN-P et ADMM qu'avec GN. De plus, GN-P et ADMM gardent des décompositions similaires à GN pour l'iode et l'eau. La contrainte sur le gadolinium ne se fait pas au détriment des autres matériaux.

VIII.7.2 Reconstruction des projections décomposées

La reconstruction des projections (figure VIII.7a) permet de mieux attester de la qualité des décompositions. Nous pouvons voir que les images d'iode et d'eau sont similaires pour les trois algorithmes. Cependant, l'image de gadolinium est différente. Pour GN-P et ADMM, la résolution du matériau est meilleure. De plus, la vertèbre (qui devrait être dans l'image d'iode) crée une ombre avec GN, mais qui est absente avec les autres algorithmes. À partir de ces reconstructions, nous pouvons calculer la concentration de chaque tube. En utilisant les zones d'intérêt 1 à 7 précédemment montrées sur la figure VIII.8, la concentration moyenne est calculée. La figure VIII.9 présente la concentration d'iode (VIII.9a) et de gadolinium (VIII.9b) qui montre la quantité décomposée (en abscisse) et mesurée (en ordonnée). La ligne noire représente la courbe idéale. Nous traçons également les droites correspondantes qui approximent la quantification pour chaque méthode. Nous donnons aussi l'erreur estimée avec le *fit* effectué, ce qui nous donne une bonne vision de l'erreur de quantification commise. Nous pouvons voir que les algorithmes quantifient de la même manière les matériaux. L'iode est correctement quantifié, mais le gadolinium présente un biais pour chaque algorithme et chaque tube. Nous voyons que pour l'iode, nous avons une faible erreur pour tous les tubes ($< 2.5 \text{ mg.cm}^{-3}$), tandis que pour le gadolinium, cela est plus important et dépend de la concentration mesurée. Cela indique qu'un biais constant est présent pour ce matériau. Cet effet est récurrent en TDMS : Ehn *et al.* (2018) décrivent le biais dans cette modalité, qui peut atteindre 20 % pour de faibles concentrations ($< 20 \text{ mg/mL}$). Cela est dû à une erreur sur le modèle spectral qui n'est pas parfait et qui impacte le plus le gadolinium car c'est le seul marqueur à avoir son *K-edge* visible, c'est-à-dire une plage d'énergie avant et après l'énergie où la discontinuité apparaît.

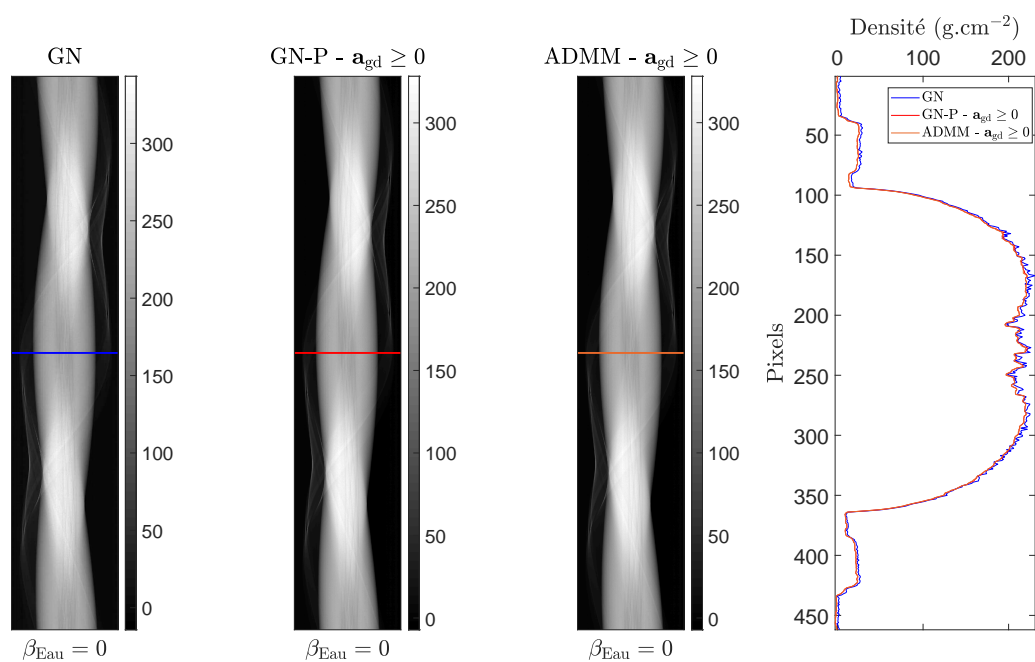


(a) Iode



(b) Gadolinium

FIGURE VIII.6 – Décomposition dans les projections du fantôme QRM avec différents algorithmes (de gauche à droite) : GN, GN-P et ADMM. Ces deux derniers contraignent la carte du gadolinium à être positive. Le fantôme est composé de trois matériaux : iode VIII.6a, gadolinium VIII.6b et eau VIII.6c. Le profil le long de la ligne tracée sur les images (correspondant au 1200-ème angle) est montré tout à droite. Le paramètre de régularisation final obtenu par le choix automatique est également indiqué en dessous de l'image.



(c) Eau

FIGURE VIII.6 – Décompositions des sinogrammes du fantôme QRM avec différents algorithmes (de gauche à droite) : GN, GN-P et ADMM. Ces deux derniers contraignent la carte du gadolinium à être positive. Le fantôme est composé de trois matériaux : iode VIII.6a, gadolinium VIII.6b et eau VIII.6c. Le profil le long de la ligne tracée sur les images (correspondant au 1200-ème angle) est montré tout à droite. Le paramètre de régularisation final obtenu par le choix automatique est également indiqué en dessous de l'image. (cont.)

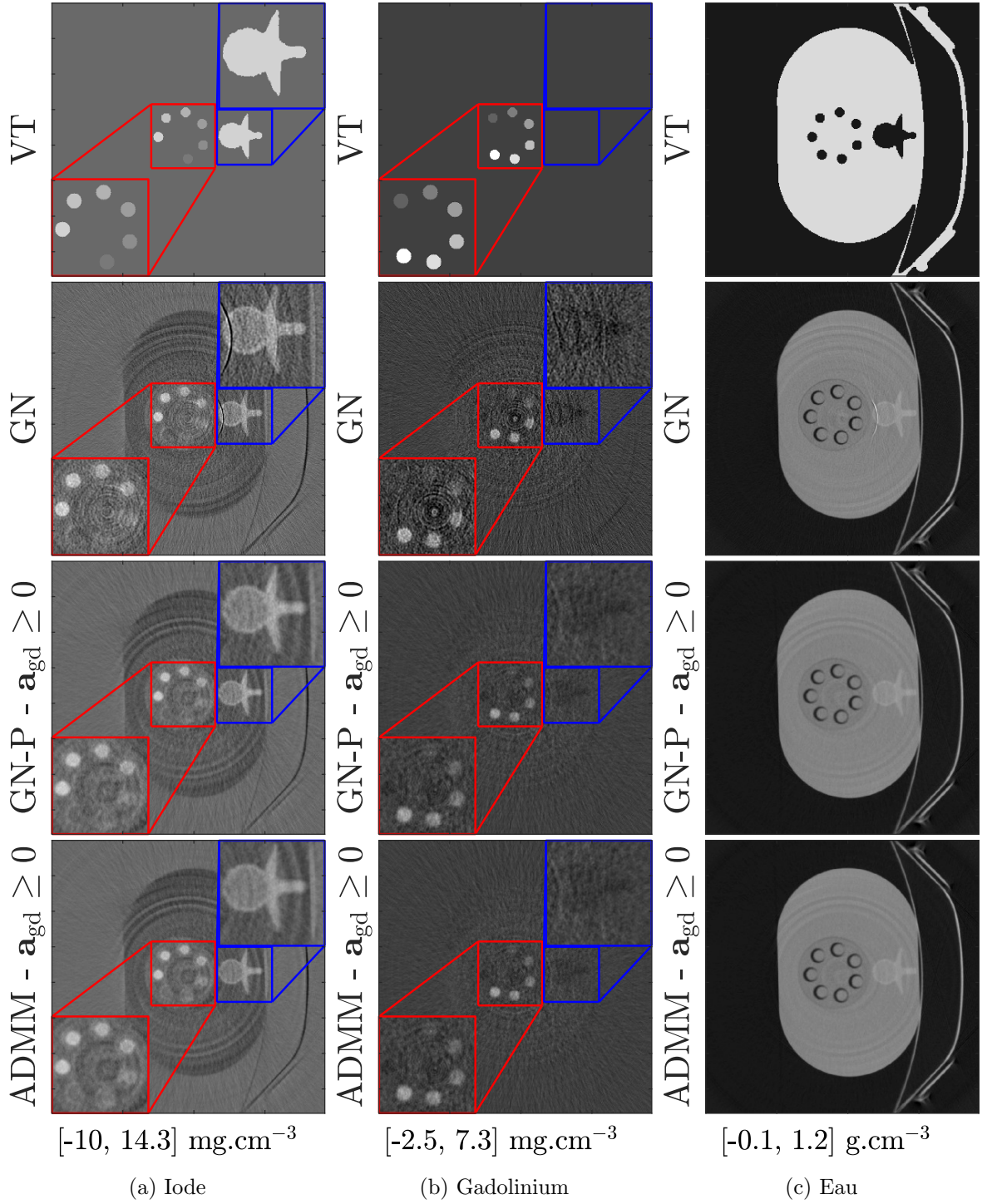


FIGURE VIII.7 – Coupe reconstruite à partir des projections décomposés du fantôme QRM avec différents algorithmes (de haut en bas) : GN, GN-P et ADMM. Ces deux derniers contraignent la carte du gadolinium à être positive. Le fantôme est composé de trois matériaux : iode VIII.7a, gadolinium VIII.7b et eau VIII.7c.

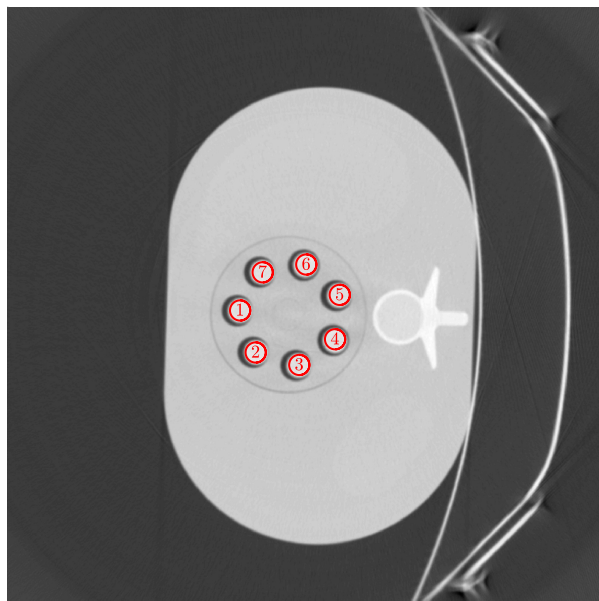


FIGURE VIII.8 – Zones d'intérêt utilisées pour calculer la concentration des tubes 1 à 7 pour le fantôme QRM.

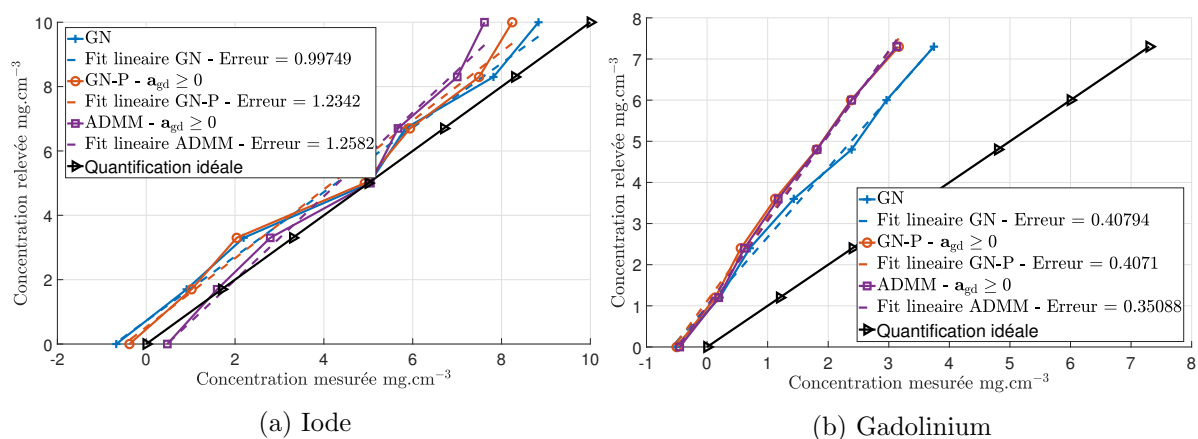


FIGURE VIII.9 – Concentrations relevées dans les tubes contenant un mélange iode-gadolinium dans le fantôme QRM. La concentration d'iode (à gauche), respectivement de gadolinium (à droite), déterminée pour les trois méthodes : GN, GN-P et ADMM, est relevée pour les 7 tubes. Ces courbes sont à comparer avec la courbe noire, qui montre la quantification idéale.

VIII.8 Conclusion

La décomposition des matériaux des données spectrales fait de la TDMS un outil d'examen clinique idéal. En plus de séparer les matériaux, la quantification de leurs concentrations est également un avantage. À travers le projet européen SPCCT, nous avons pu avoir accès à des données d'un prototype de scanner spectral développé par Philips, qui est installé aux Hospices Civil de Lyon. Des données d'un fantôme simulant un abdomen ont été récupérées et décomposées dans une base de matériaux : iode, gadolinium et eau. En effet, des tubes comportant un mélange iode-gadolinium étaient placés dans le fantôme. Les méthodes précédemment présentées ont été testées sur ces données.

Dans un premier temps, nous avons contraint la carte des matériaux \mathbf{a} à être positive avec les algorithmes GN-P et ADMM, ceux-ci étant comparés à GN. Les décompositions avec ces méthodes n'étaient pas correctes. Nous avons vu que pour GN, la densité l'iodé était négative et la contrainte de positivité n'était pas adaptée pour tous les matériaux. Par la suite, nous avons testé deux contraintes reposant sur un raisonnement physique. Tout d'abord, le coefficient d'atténuation linéique projeté ne peut lui être négatif. ADMM nous a permis d'ajouter cette contrainte sans amélioration par rapport à GN. Finalement, une contrainte sur la carte du gadolinium (seul matériau avec discontinuité d'atténuation à être entre deux plages d'énergies) a été testée. ADMM et GN-P nous donnent les mêmes cartes et les mêmes reconstructions, montrant une légère amélioration visuelle par rapport à GN. À partir de ces reconstructions, la concentration d'iodé et de gadolinium a été relevée. Nous avons vu qu'il n'y avait pas de différence significative entre les trois méthodes. L'iodé est correctement quantifiée, mais le gadolinium subit un biais de quantification, phénomène courant en TDMS.

Le traitement de ces données nous a permis d'attester le fait que nos méthodes sont utilisables sur des données acquises par un système physique et pas seulement pour des simulations numériques. Nos méthodes nous montrent une amélioration visuelle par rapport aux méthodes classiques.

Conclusions et Perspectives

LA tomodesitométrie spectrale est une modalité d'imagerie par rayons X qui permet d'acquérir des données résolues en énergies à partir desquelles nous pouvons retrouver la composition chimique des tissus imagés. Cette décomposition est possible, car l'atténuation des tissus dépend de l'énergie des photons incidents. La tomodesitométrie spectrale est particulièrement pertinente en présence de marqueurs comme l'or et le gadolinium, qui présentent une discontinuité énergétique.

L'objectif de cette thèse était de développer de nouvelles méthodes de décomposition des données spectrales dans le domaine des projections et ce pour obtenir les cartes de matériaux.

Nous avons donc proposé dans un premier temps des méthodes qui ont été évaluées pour des simulations numériques d'une souris et d'un thorax humain présentés dans le [chapitre III](#).

- Dans le [chapitre IV](#), nous avons proposé de modifier le terme d'attache aux données pour rendre compte de la nature poissonnienne du bruit. L'approche par la divergence de Kullback-Leibler a montrée des améliorations pour la décomposition bi-matériaux pour de fort niveaux de bruit par rapport aux méthodes classiques. Cependant, la décomposition tri-matériaux n'était pas concluante.
- Dans les chapitres [V](#) et [VI](#), nous nous sommes intéressés à la décomposition tri-matériaux sous contraintes. Les méthodes classiques fourniront des cartes de matériaux avec des valeurs négatives, qui ne correspondent pas à la physique. C'est pourquoi nous avons incorporé dans un premier temps une contrainte de positivité tout en utilisant un algorithme de minimisation d'ordre 2 de type Gauss-Newton pour sa rapidité. La contrainte de positivité a été mise en place en utilisant une succession d'ensembles restrictifs évoluant au fur et à mesure des itérations avec l'algorithme Gauss-Newton projeté ([chapitre V](#)).
- Dans le [chapitre VI](#) nous avons utilisé le fait que nous connaissions la quantité de marqueur injecté qui devait être retrouvée dans les décompositions. Cette contrainte d'égalité a été ajoutée en plus de la contrainte de positivité. Elles ont toutes deux été incorporées sous la forme de fonctions lagrangiennes. Pour minimiser cette nouvelle fonction de coût, un algorithme de type ADMM a été proposé. Ces contraintes ont permis de réduire l'erreur de décomposition par rapport aux méthodes classiques. L'amélioration a également été observée en calculant le SSIM, qui donne une évaluation structurelle des décompositions obtenues. Les cartes décomposées par des algorithmes contraignant la solution sont meilleures visuellement. Certains artefacts ont été diminués, notamment l'apparition d'un matériau dans une mauvaise carte.
- Dans le [chapitre VII](#), nous avons proposé une méthode de choix automatique des hy-

perparamètres qui permettent de régulariser la solution. Ce type de choix, comparé aux choix *a posteriori*, a permis de réduire fortement le temps de calcul tout en restant efficace dans la décomposition des données spectrales. Les temps de calcul sont divisés par ~ 60 à ~ 1500 , tout en donnant des résultats visuellement corrects et ne générant pas de grosses erreurs.

- Dans le [chapitre VIII](#), nous avons pu appliquer ces méthodes sur des données expérimentales provenant d'un prototype de scanner spectral installé à Lyon. Nous avons pu constater que les erreurs du modèle spectral (spectre source et réponse du détecteur) font que les décompositions avec des algorithmes sous contraintes sont difficiles. C'est pourquoi, en modifiant les contraintes, nous avons pu obtenir des volumes par matériaux validant l'intérêt et la faisabilité des méthodes développées en pratique.

Perspectives : La première perspective de ce travail de thèse serait de développer des méthodes pour corriger le modèle spectral. En traitant des données expérimentales dans le [chapitre VIII](#), nous avons vu que le modèle ne pouvait pas être exact et que des cela créait des erreurs dans les décompositions. Nos méthodes devront donc être modifiées pour pouvoir décomposer correctement ces données. Dans le modèle, deux aspects sont à prendre en compte : i) le spectre effectif (réponse du détecteur et spectre source) et ii) les matériaux composant le patient. Pour le premier aspect, il serait possible d'utiliser des méthodes de décomposition à l'aveugle ([Bleyer et Ramlau \(2013\)](#)) pour obtenir de manière alternée les cartes des matériaux et le spectre effectif. Pour le second aspect, l'utilisation d'un matériau annexe pouvant correspondre aux matériaux qui sont hors de la base permettrait d'améliorer les décompositions.

Une autre perspective serait de choisir de manière optimale les seuils des détecteurs à comptage de photons. Ces seuils, facilement réglables, pourraient être modifiés en fonction de la base de matériaux dans laquelle nous souhaitons décomposer les données. En plus de certains travaux sur les systèmes visant à minimiser le bruit dans chaque plage d'énergies ([Li et al. \(2014\)](#)), des méthodes numériques pour prédire le choix optimal constitueraient un pas en avant pour l'amélioration des décompositions.

Enfin, une toolbox Matlab a été développée, SPRAY³, qui permet de diffuser facilement les méthodes développées à CREATIS. Il pourrait être avantageux d'écrire cette toolbox dans un langage plus rapide que Matlab et libre d'accès, comme Python par exemple.

3. <https://www.creatis.insa-lyon.fr/~ducros/WebPage/spray.html>

Annexe A

Démonstration du terme KL

Dans cette annexe nous démontrons l'origine du terme KL. Cette démonstration s'appuie sur [Poeschl \(2008\)](#).

Bruit de Poisson

Le bruit de Poisson corrompt les données correspondant à un comptage de photons. La loi de la variable aléatoire x qui suit une loi de Poisson s'écrit :

$$\mathcal{P}(x = k) = \frac{\lambda^k}{k!} \exp(-\lambda) \quad (\text{A.1})$$

où λ est le nombre moyen d'occurrences et k est un entier strictement positif.

Distances de Bregman

Les distances de Bregman généralisent la norme euclidienne et sont souvent utilisées comme mesure de similarité entre les données. Elles sont construites à partir d'une fonction convexe g . Les distances de Bregman sont définies pour toute fonction g convexe par :

$$\beta_g(x, \hat{x}(\theta)) = \int_{\Omega} (b_g(x, \hat{x}(\theta))) d\mu \quad (\text{A.2})$$

où Ω est le domaine de l'image, $b_g(x, \hat{x}(\theta)) = g(x) - g(\hat{x}(\theta)) - g'(\hat{x}(\theta))(x - \hat{x}(\theta))$ est une distance intégrée sur Ω , \hat{x} est la valeur moyenne de x et θ est le paramètre de l'estimation.

Famille exponentielle

Nous définissons une famille $\mathcal{F}_{\mathcal{P}}$ de densité de probabilité $\mathcal{P}_{(\rho, \theta)}(x)$ qui peut se mettre sous la forme :

$$\mathcal{P}_{(\rho, \theta)}(x) = \exp[< x, \theta > - \rho(\theta)] p_0(x) \quad (\text{A.3})$$

Nous admettons que nous pouvons exprimer $\mathcal{P}_{(\rho, \theta)}(x)$ comme étant :

$$\mathcal{P}_{(\rho, \theta)}(x) = \exp[-b_g(x, \hat{x}(\theta))] \tilde{p}_0(x) \quad (\text{A.4})$$

où $b_g(x, \hat{x}(\theta))$ est la distance de Bregman associée à g . La fonction convexe g est la fonction duale de Fenchel ρ [31]. Les distribution de Gauss, de Poisson, de Bernoulli ou exponentielle font partie des familles exponentielles. Dans cette formule, $\hat{x}(\theta)$ est la valeur moyenne de la variable aléatoire x qui est décrit par une loi correspondant à une famille exponentielle.

Terme KL

En partant de la formule du bruit de Poisson, nous voulons démontrer que cette densité de probabilité appartient aux familles exponentielles. Ainsi :

En prenant le -log de (A.1) nous avons :

$$-\log(\mathcal{P}(x = k)) = -\log(\lambda^k) + \log(k!) + \lambda \quad (\text{A.5})$$

D'après l'approximation de Stirling, nous avons :

$$\log(x!) = x \log(x) - x \quad (\text{A.6})$$

Ainsi :

$$-\log(\mathcal{P}(x = k)) = -k \log(\lambda) + k \log(k) - k + \lambda \quad (\text{A.7})$$

En passant à l'exponentielle, nous obtenons finalement :

$$\mathcal{P}(x = k) = \exp \left[- \left(k \log \left(\frac{k}{\lambda} \right) - k + \lambda \right) \right] \tilde{p}_0(x) \quad (\text{A.8})$$

où $\tilde{p}_0(x) = 1$. Ainsi nous démontrons que $\mathcal{P}(x = k)$ appartient aux familles exponentielles. De plus, en posant $g(x) = x \log(x) - x$ nous trouvons :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(x = k) &= \exp \left[- \left(k \log \left(\frac{k}{\lambda} \right) - k + \lambda \right) \right] \tilde{p}_0(x) \\ &= \exp[-b_g(k, \lambda)] \tilde{p}_0(x) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

D'après (A.2), la mesure qui permet de calculer une distance entre des variables aléatoires décrit par des loi de Poisson et leur valeur moyenne est donnée dans le cas discret par :

$$\begin{aligned} \beta_g(k, \lambda) &= \sum_i (b_g(k_i, \lambda_i)) \\ &= \sum_i k_i \log \left(\frac{k_i}{\lambda_i} \right) - k_i + \lambda_i \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$\beta_g(k, \lambda)$ est communément appelé distance de Kullback-Leibler. Ce terme pourra donc être utilisé comme terme d'attache aux données dans le cas du bruit de Poisson.

Annexe B

Outils mathématiques

Nous développerons ici quelques outils mathématiques utilisés notamment dans le [chapitre II](#). Dans cette annexe, nous considérerons le problème :

$$\mathbf{s} = \mathcal{F}(\mathbf{y}) \quad (\text{B.1})$$

où $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^m$ sont les données, $\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ un opérateur et $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ la solution que nous cherchons. Cette dernière sera trouvée en résolvant :

$$\hat{\mathbf{y}} = \underset{\mathbf{y}}{\operatorname{argmin}} \mathcal{C}(\mathbf{y}) \quad (\text{B.2})$$

avec $\mathcal{C}(\mathbf{y}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction de coût.

B.1 Développement en série de Taylor

Le développement en série de Taylor est utile dans la résolution de l'équation (B.2), utilisé dans le [chapitre II](#) ((II.26), (II.34), par exemple). Le théorème stipule que pour une fonction \mathcal{C} indéfiniment dérivable au point \mathbf{a} , la série de Taylor est donnée par :

$$\sum_k \frac{\mathcal{C}^{(k)}(\mathbf{a})}{k!} (\mathbf{x} - \mathbf{a})^k \quad (\text{B.3})$$

où $k!$ est la factorielle de k et $\mathcal{C}^{(k)}(\mathbf{a})$ désigne la k -ième dérivée de \mathcal{C} au point \mathbf{a} . Cette série permet de créer une approximation de $\mathcal{C}(\mathbf{a})$ bien connue et valable dans le voisinage de \mathbf{a} (plus n est grand, meilleur est l'approximation). Dans le cas du [chapitre II](#), nous avons $k = 2$.

B.2 Définition du gradient

Le gradient est la représentation des dérivées partielles premières $\partial/\partial y_i$, où $i = (1, 2, \dots, n)$ et $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$. Pour la fonction $\mathcal{C} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ le gradient est donné par :

$$\nabla \mathcal{C} = \left[\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial y_1}, \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial y_2}, \dots, \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial y_n} \right]^T \quad (\text{B.4})$$

B.3 Définition de la Jacobienne

La Jacobienne est la généralisation du gradient pour les applications d'un espace \mathbb{R}^n vers \mathbb{R}^m ($\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$). La matrice jacobienne \mathbf{J} est définie par les dérivées partielles premières comme suit :

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial y_1} & \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial y_n} \\ \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial y_1} & \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial y_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial \mathcal{F}_m}{\partial y_1} & \frac{\partial \mathcal{F}_m}{\partial y_2} & \cdots & \frac{\partial \mathcal{F}_m}{\partial y_n} \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Nous pouvons remarquer que si $m = 1$, alors le gradient et la Jacobienne sont les mêmes.

B.4 Définition de la Hessienne

La Hessienne quant à elle est la représentation des dérivées partielles seconde $\partial^2 / \partial y_i \partial y_j$, où $(i, j) = (1, 2, \dots, n)$ et $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ d'une fonction $\mathcal{C} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Elle est définie par :

$$\Delta \mathcal{C} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_1^2} & \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_1 \partial y_2} & \cdots & \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_1 \partial y_n} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_2 \partial y_1} & \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_2 \partial y_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_n \partial y_1} & \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_n \partial y_2} & \cdots & \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial y_n^2} \end{bmatrix} \quad (\text{B.6})$$

À noter également que la Hessienne de $\mathcal{C} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ est la Jacobienne du gradient de cette même fonction.

Annexe C

Calcul des dérivés du terme de régularisation

Nous détaillerons ici les dérivés du terme de régularisation.

C.1 Fonctionnelle

La régularisation de \mathbf{a} peut être écrite comme étant

$$\mathcal{R}(\mathbf{a}) = \sum_m \beta_m \mathcal{R}_m(\mathbf{a}_m) \quad (\text{C.1})$$

où β_m est le paramètre de régularisation spécifique au matériau m . Différentes fonctions de potentielles $\phi()$ peuvent être choisies :

— Quadratique : La fonction de potentiel quadratique sera écrite :

$$\phi^{\text{Quad}}(x) = x^2 \quad (\text{C.2})$$

et promeut une solution lisse, qui sera utilisée comme norme ℓ_2 :

$$\mathcal{R}_m^{\text{Quad}}(\mathbf{a}_m) = \|\mathbf{L}_m \mathbf{a}_m\|_2^2 \quad (\text{C.3})$$

— Huber : La fonction de Huber permet de préserver les bords dans la solution, elle est définie comme étant :

$$\phi^{\text{Huber}}(x) = \sqrt{x^2 + \epsilon^2} - \epsilon \quad (\text{C.4})$$

où ϵ est un paramètre à régler. La fonction de Huber approxime la norme ℓ_1 , donc :

$$\mathcal{R}_m^{\text{Huber}}(\mathbf{a}_m) = \|\mathbf{L}_m \mathbf{a}_m\|_1 \quad (\text{C.5})$$

De plus, \mathbf{L}_m est un opérateur différentiel, où $\mathbf{L}_m \in \{\mathbf{D}^{(0)}, \mathbf{D}^{(1)}, \mathbf{D}^{(2)}\}$. $\mathbf{D}^{(0)} \in \mathbb{R}^{P \times P}$ est la matrice identité, $\mathbf{D}^{(1)} \in \mathbb{R}^{2P \times P}$ est le gradient discret 2D, and $\mathbf{D}^{(2)} \in \mathbb{R}^{P \times P}$ est la matrice discrète du Laplacien en 2D.

C.2 Dérivations

C.2.1 Fonction de potentiel quadratique

Nous avons assez rapidement :

$$\nabla_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Quad}}(\mathbf{a}) = 2 \begin{bmatrix} a_{1,1} \\ \vdots \\ a_{M,1} \\ \vdots \\ a_{M,P} \end{bmatrix}$$

et :

$$\Delta_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Quad}}(\mathbf{a}) = \begin{bmatrix} 2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Nous avons finalement :

$$\nabla_{\mathbf{a}} \mathcal{R}_m^{\text{Quad}}(\mathbf{a}) = \mathbf{L}_m^T \mathbf{L}_m \nabla_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Quad}}(\mathbf{a}) \quad (\text{C.6})$$

$$\Delta_{\mathbf{a}} \mathcal{R}_m^{\text{Quad}}(\mathbf{a}) = \mathbf{L}_m^T \Delta_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Quad}}(\mathbf{a}) \mathbf{L}_m \quad (\text{C.7})$$

C.2.2 Fonction de potentiel de Huber

Pour la fonction de Huber, nous avons :

$$\nabla_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Huber}}(\mathbf{a}) = \begin{bmatrix} \frac{a_{1,1}}{\sqrt{a_{1,1}^2 + \epsilon^2}} \\ \vdots \\ \frac{a_{M,1}}{\sqrt{a_{M,1}^2 + \epsilon^2}} \\ \vdots \\ \frac{a_{M,P}}{\sqrt{a_{M,P}^2 + \epsilon^2}} \end{bmatrix}$$

et :

$$\Delta_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Huber}}(\mathbf{a}) = \epsilon^2 \begin{bmatrix} (a_{1,1}^2 + \epsilon^2)^{-3/2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & (a_{M,P}^2 + \epsilon^2)^{-3/2} \end{bmatrix}$$

Nous avons donc :

$$\nabla_{\mathbf{a}} \mathcal{R}_m^{\text{Huber}}(\mathbf{a}) = \mathbf{L}_m^T \mathbf{L}_m \nabla_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Huber}}(\mathbf{a}) \quad (\text{C.8})$$

$$\Delta_{\mathbf{a}} \mathcal{R}_m^{\text{Huber}}(\mathbf{a}) = \mathbf{L}_m^T \Delta_{\mathbf{a}} \phi^{\text{Huber}}(\mathbf{a}) \mathbf{L}_m \quad (\text{C.9})$$

Bibliographie

- [1] Abascal, J. F., Si Mohamed, S., Douek, P., Chappard, C., Peyrin, F., 2019. A Sparse and Prior Based Method for 3D Image Denoising. [1](#)
- [2] Afonso, M. V., Bioucas Dias, J. M., Figueiredo, M. A., 2010. Fast Image Recovery Using Variable Splitting and Constrained Optimization. *IEEE Transactions on Image Processing* 19 (9), 2345–2356. [97](#)
- [3] Afonso, M. V., Bioucas Dias, J. M., Figueiredo, M. A., 2011. An Augmented Lagrangian Approach to the Constrained Optimization Formulation of Imaging Inverse Problems. *IEEE Transactions on Image Processing* 20 (3), 681–695. [97](#)
- [4] Almeida, I. P., Schyns, L. E., Öllers, M. C., van Elmpt, W., Parodi, K., Landry, G., Verhaegen, F., 2017. Dual-Energy CT Quantitative Imaging : A Comparison Study Between Twin-Beam and Dual-Source CT Scanners. *Medical Physics* 44 (1), 171–179. [15](#)
- [5] Alvarez, R. E., Macovski, A., 1976. Energy-Selective Reconstructions in X-Ray Computerised Tomography. *Physics in Medicine & Biology* 21 (5), 733. [1](#), [21](#), [22](#), [27](#), [33](#)
- [6] Ambrose, J., 1973. Computerized Transverse Axial Scanning (tomography) : Part 2. Clinical application. *The British Journal of Radiology* 46 (552), 1023–1047. [7](#)
- [7] Armijo, L., 1966. Minimization of Functions having Lipschitz Continuous First Partial Derivatives. *Pacific Journal of mathematics* 16 (1), 1–3. [39](#)
- [8] Barber, R. F., Sidky, E. Y., Schmidt, T. G., Pan, X., 2016. An Algorithm for Constrained One-Step Inversion of Spectral CT Data. *Physics in Medicine & Biology* 61 (10), 3784. [27](#), [81](#)
- [9] Bateman, C., Knight, D., Brandwacht, B., Mc Mahon, J., Healy, J., Panta, R., Aamir, R., Rajendran, K., Moghiseh, M., Ramyar, M., *et al.*, 2018. MARS-MD : Rejection Based Image Domain Material Decomposition. *Journal of Instrumentation* 13 (05), P05020. [25](#)
- [10] Beister, M., Kolditz, D., Kalender, W. A., 2012. Iterative Reconstruction Methods in X-Ray CT. *Physica Medica* 28 (2), 94–108. [18](#)
- [11] Belge, M., Kilmer, M. E., Miller, E. L., 2002. Efficient Determination of Multiple Regularization Parameters in a Generalized L-Curve Framework. *Inverse Problems* 18 (4), 1161. [113](#)

-
- [12] Bertero, M., Boccacci, P., Talenti, G., Zanella, R., Zanni, L., 2010. A Discrepancy Principle for Poisson Data. *Inverse Problems* 26 (10), 105004. [113](#), [114](#)
 - [13] Bertsekas, D. P., 1997. Nonlinear Programming. *Journal of the Operational Research Society* 48 (3), 334–334. [99](#)
 - [14] Bertsekas, D. P., Scientific, A., 2015. Convex Optimization Algorithms. Athena Scientific Belmont. [82](#)
 - [15] Bleyer, I. R., Ramlau, R., 2013. A Double Regularization Approach for Inverse Problems With Noisy Data and Inexact Operator. *Inverse Problems* 29 (2), 025004. [152](#)
 - [16] Bracewell, R. N., 1956. Strip Integration in Radio Astronomy. *Australian Journal of Physics* 9 (2), 198–217. [18](#)
 - [17] Brooks, R. A., 1977. A Quantitative Theory of the Hounsfield Unit and its Application to Dual Energy Scanning. *Journal of Computer Assisted Tomography* 1 (4), 487–493. [1](#), [25](#)
 - [18] Byrd, R. H., Schnabel, R. B., Shultz, G. A., 1987. A Trust Region Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 24 (5), 1152–1170. [41](#)
 - [19] Cassol Brunner, F., Dupont, M., Meessen, C., Boursier, Y., Ouamara, H., Bonissent, A., Kronland Martinet, C., Clemens, J.-C., Debarbieux, F., Morel, C., 2012. First K-Edge Imaging with a Micro-CT Based on the XPAD3 Hybrid Pixel Detector. *IEEE Transactions on Nuclear Science* 60 (1), 103–108. [15](#)
 - [20] Clark, D. P., Badea, C. T., 2014. Spectral Diffusion : An Algorithm for Robust Material Decomposition of Spectral CT Data. *Physics in Medicine & Biology* 59 (21), 6445. [26](#)
 - [21] Desai, M. A., Peterson, J. J., Garner, H. W., Kransdorf, M. J., 2011. Clinical Utility of Dual-Energy CT for Evaluation of Tophaceous Gout. *Radiographics* 31 (5), 1365–1375. [29](#)
 - [22] Desai, S. D., Kulkarni, L., 2010. A Quantitative Comparative Study of Analytical and Iterative Reconstruction Techniques. *International Journal Of Image Processing (IJIP)* 4 (4), 307. [18](#)
 - [23] Ding, Q., Niu, T., Zhang, X., Long, Y., 2017. Image-Domain Multi-Material Decomposition for Dual-Energy CT Based on Correlation and Sparsity of Material Images. *arXiv preprint arXiv :1710.07028*. [26](#)
 - [24] Ding, Q., Niu, T., Zhang, X., Long, Y., 2018. Image-Domain Multimaterial Decomposition for Dual-Energy CT Based on Prior Information of Material Images. *Medical Physics* 45 (8), 3614–3626. [97](#)
 - [25] Dogdas, B., Stout, D., Chatziioannou, A., Leahy, R., 2007. Digimouse : A 3D Whole Body Mouse Atlas from CT and Cryosection Data. *Physics in Medicine and biology* 52 (3), 577. [52](#), [53](#)

-
- [26] Ducros, N., Abascal, J. F. P.-J., Sixou, B., Rit, S., Peyrin, F., 2017. Regularization of Nonlinear Decomposition of Spectral X-Ray Projection Images. *Medical Physics* 44 (9), e174–e187. [1](#), [27](#), [28](#), [59](#), [62](#), [113](#)
 - [27] Eckstein, J., Yao, W., 2012. Augmented Lagrangian and Alternating Direction Methods for Convex Optimization : A Tutorial and Some Illustrative Computational Results. *RUTCOR Research Reports* 32, 3. [44](#), [87](#), [97](#), [99](#)
 - [28] Ehn, S., Sellerer, T., Mechlem, K., Fehringer, A., Epple, M., Herzen, J., Pfeiffer, F., Noël, P., 2016. Basis Material Decomposition in Spectral CT Using a Semi-Empirical, Polychromatic Adaption of the Beer–Lambert Model. *Physics in Medicine & Biology* 62 (1), N1. [22](#)
 - [29] Ehn, S., Sellerer, T., Muenzel, D., Fingerle, A. A., Kopp, F., Duda, M., Mei, K., Renger, B., Herzen, J., Dangelmaier, J., *et al.*, 2018. Assessment of Quantification Accuracy and Image Quality of a Full-Body Dual-Layer Spectral CT System. *Journal of applied clinical Medical Physics* 19 (1), 204–217. [144](#)
 - [30] Feldkamp, L. A., Davis, L., Kress, J. W., 1984. Practical Cone-Beam Algorithm. *Josa a* 1 (6), 612–619. [135](#)
 - [31] Fenchel, W., 1949. On Conjugate Convex Functions. *Canadian Journal of Mathematics* 1 (1), 73–77. [154](#)
 - [32] Fletcher, R., 2013. *Practical Methods of Optimization*. John Wiley & Sons. [42](#)
 - [33] Fletcher, R., Powell, M. J., 1963. A Rapidly Convergent Descent Method for Minimization. *The Computer Journal* 6 (2), 163–168. [41](#)
 - [34] Fourier, J. B. J., 1831. *Analyse des Équations Déterminées*. Vol. 1. Firmin Didot. [41](#)
 - [35] Genant, H. K., Boyd, D., 1977. Quantitative Bone Mineral Analysis Using Dual Energy Computed Tomography. *Investigative Radiology* 12 (6), 545–551. [14](#)
 - [36] Gilbert, J. C., Nocedal, J., 1992. Global Convergence Properties of Conjugate Gradient Methods for Optimization. *SIAM Journal on optimization* 2 (1), 21–42. [41](#)
 - [37] Goldstein, A. A., 2013. *Constructive Real Analysis*. Courier Corporation. [40](#)
 - [38] Hansen, P., 2002. *Regtools*. [37](#)
 - [39] Hansen, P. C., 2005. Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems : Numerical Aspects of Linear Inversion. Vol. 4. *Siam*. [37](#)
 - [40] Hansen, P. C., O’Leary, D. P., 1993. The Use of the L-Curve in the Regularization of Discrete Ill-Posed Problems. *SIAM Journal on Scientific Computing* 14 (6), 1487–1503. [113](#)

-
- [41] Hanson, R. J., 1971. A Numerical Method for Solving Fredholm Integral Equations of the First Kind Using Singular Values. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 8 (3), 616–622. [36](#)
- [42] Helou Neto, E. S., Simões, L. E. A., 2012. A New Parameter Choice Method for Inverse Problems with Poisson Noise. In : *e-Proceedings*. [114](#)
- [43] Hestenes, M. R., Stiefel, E., 1952. *Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems*. Vol. 49. NBS Washington, DC. [40](#)
- [44] Hickethier, T., Baeßler, B., Kroeger, J. R., Doerner, J., Pahn, G., Maintz, D., Michels, G., Bunck, A. C., 2017. Monoenergetic Reconstructions for Imaging of Coronary Artery Stents Using Spectral Detector CT : In-Vitro Experience and Comparison to Conventional Images. *Journal of cardiovascular computed tomography* 11 (1), 33–39. [23](#)
- [45] Hohweiller, T., Ducros, N., Peyrin, F., Sixou, B., 2017a. A Kullback-Leibler Approach for 3D Reconstruction of Spectral CT Data Corrupted by Poisson Noise. In : *Developments in X-Ray Tomography XI*. Vol. 10391. International Society for Optics and Photonics, p. 103911E. [2](#)
- [46] Hohweiller, T., Ducros, N., Peyrin, F., Sixou, B., 2017b. Spectral CT Material Decomposition in the Presence of Poisson Noise : a Kullback–Leibler Approach. *IRBM* 38 (4), 214–218. [2](#)
- [47] Hohweiller, T., Ducros, N., Peyrin, F., Sixou, B., 2018a. A Constrained Gauss-Newton Algorithm for Material Decomposition in Spectral Computed Tomography. In : *2018 IEEE 15th International Symposium on BioMedical Imaging (ISBI 2018)*. IEEE, pp. 336–339. [2](#)
- [48] Hohweiller, T., Ducros, N., Peyrin, F., Sixou, B., 2018b. An ADMM Algorithm for Constrained Material Decomposition in Spectral CT. In : *2018 26th European Signal Processing Conference (EUSIPCO)*. IEEE, pp. 71–75. [2](#)
- [49] Hounsfield, G. N., 1973. Computerized Transverse Axial Scanning (Tomography) : Part 1. Description of system. *The British journal of Radiology* 46 (552), 1016–1022. [7](#)
- [50] Hsieh, J., *et al.*, 2009. *Computed Tomography : Principles, Design, Artifacts, and Recent Advances*. SPIE Bellingham, WA. [21](#)
- [51] Ito, K., Jin, B., Takeuchi, T., 2011a. A Regularization Parameter for Nonsmooth Tikhonov Regularization. *SIAM Journal on Scientific Computing* 33 (3), 1415–1438. [115](#)
- [52] Ito, K., Jin, B., Takeuchi, T., 2011b. Multi-Parameter Tikhonov Regularization. *arXiv preprint arXiv :1102.1173*. [113](#), [115](#)
- [53] Johnson, T. R., Krauss, B., Sedlmair, M., Grasruck, M., Bruder, H., Morhard, D., Fink, C., Weckbach, S., Lenhard, M., Schmidt, B., *et al.*, 2007. Material Differentiation by Dual Energy CT : Initial Experience. *European Radiology* 17 (6), 1510–1517. [14](#)

-
- [54] Jordan, C., 1906. Réduction d'un Réseau de Formes Quadratiques ou Bilinéaires. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 2, 403–438. [35](#)
- [55] Kabanikhin, S. I., 2008. Definitions and Examples of Inverse and Ill-Posed Problems. *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems* 16 (4), 317–357. [33](#)
- [56] Kak, A. C., Slaney, M., Wang, G., 2002. Principles of Computerized Tomographic Imaging. *Medical Physics* 29 (1), 107–107. [18](#)
- [57] Kalender, W. A., 2006. X-ray Computed Tomography. *Physics in Medicine & Biology* 51 (13), R29. [12](#)
- [58] Kalender, W. A., Buchenau, S., Deak, P., Kellermeier, M., Langner, O., van Straten, M., Vollmar, S., Wilharm, S., 2008. Technical Approaches to the Optimisation of CT. *Physica Medica* 24 (2), 71–79. [29](#)
- [59] Kalender, W. A., Perman, W., Vetter, J., Klotz, E., 1986. Evaluation of a Prototype Dual-Energy Computed Tomographic Apparatus. I. Phantom studies. *Medical Physics* 13 (3), 334–339. [15](#)
- [60] Kéchichian, R., Valette, S., Desvignes, M., Prost, R., 2013. Shortest-Path Constraints for 3D Multiobject Semiautomatic Segmentation via Clustering and Graph Cut. *IEEE TIP* 22 (11), 4224–4236. [52](#), [54](#)
- [61] Kelley, C. T., 2011. Implicit Filtering. Vol. 23. SIAM. [40](#)
- [62] Kim, D., Sra, S., Dhillon, I., 2010. Tackling Box-Constrained Optimization via a New Projected Quasi-Newton Approach. *SIAM Journal on Scientific Computing* 32 (6), 3548–3563. [82](#)
- [63] Klein, O., Nishina, Y., 1929. Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen Relativistischen Quantendynamik von Dirac. *Zeitschrift für Physik* 52 (11-12), 853–868. [22](#)
- [64] Kriston, A., Mendonça, P., Silva, A., Paden, R. G., Pavlicek, W., Sahani, D., Kis, B. J., Rusko, L., Okerlund, D., Bhotika, R., 2011. Liver Fat Quantification Using Fast kVp-Switching Dual Energy CT. In : *Medical Imaging 2011 : Image Processing*. Vol. 7962. International Society for Optics and Photonics, p. 79623W. [29](#)
- [65] Kullback, S., Leibler, R. A., 1951. On Information and Sufficiency. *The annals of mathematical statistics* 22 (1), 79–86. [61](#)
- [66] Le, H. Q., Molloy, S., 2011. Segmentation and Quantification of Materials with Energy Discriminating Computed Tomography : A Phantom Study. *Medical Physics* 38 (1), 228–237. [25](#)
- [67] Lee, J. D., Sun, Y., Saunders, M., 2012. Proximal Newton-Type Methods for Convex Optimization. In : *Advances in Neural Information Processing Systems*. pp. 827–835. [94](#)

-
- [68] Lee, J. D., Sun, Y., Saunders, M. A., 2014. Proximal Newton-type Methods for Minimizing Composite Functions. *SIAM Journal on Optimization* 24 (3), 1420–1443. [94](#)
- [69] Levy, A. B., 2007. Constraint Incorporation in Optimization. *Mathematical Programming* 110 (3), 615–639. [43](#), [44](#)
- [70] Li, L., Chen, Z., Cong, W., Wang, G., 2014. Spectral CT Modeling and Reconstruction with Hybrid Detectors in Dynamic-Threshold-Based Counting and Integrating Modes. *IEEE Transactions on Medical Imaging* 34 (3), 716–728. [152](#)
- [71] Litzenberg, D., Dawson, L. A., Sandler, H., Sanda, M. G., McShan, D. L., Ten Haken, R. K., Lam, K. L., Brock, K. K., Balter, J. M., 2002. Daily Prostate Targeting Using Implanted Radiopaque Markers. *International Journal of Radiation Oncology* Biology* Physics* 52 (3), 699–703. [81](#)
- [72] Liu, X., Yu, L., Primak, A. N., McCollough, C. H., 2009. Quantitative Imaging of Element Composition and Mass Fraction Using Dual-Energy CT : Three-Material Decomposition. *Medical Physics* 36 (5), 1602–1609. [23](#)
- [73] Long, Y., Fessler, J. A., 2014. Multi-Material Decomposition Using Statistical Image Reconstruction for Spectral CT. *IEEE Transactions on Medical Imaging* 33 (8), 1614–1626. [1](#), [21](#), [81](#), [97](#)
- [74] Maaß, C., Baer, M., Kachelrieß, M., 2009. Image-based Dual Energy CT Using Optimized Precorrection Functions : A Practical New Approach of Material Decomposition in Image Domain. *Medical Physics* 36 (8), 3818–3829. [25](#), [26](#)
- [75] Mechlem, K., Ehn, S., SELLERER, T., Braig, E., Münzel, D., Pfeiffer, F., Noël, P. B., 2018. Joint Statistical Iterative Material Image Reconstruction for Spectral Computed Tomography Using a Semi-Empirical Forward Model. *IEEE Transactions on Medical Imaging* 37 (1), 68–80. [1](#), [26](#)
- [76] Mendonça, P. R., Bhotika, R., Maddah, M., Thomsen, B., Dutta, S., Licato, P. E., Joshi, M. C., 2010. Multi-Material Decomposition of Spectral CT Images. In : *Medical Imaging 2010 : Physics of Medical Imaging*. Vol. 7622. International Society for Optics and Photonics, p. 76221W. [25](#)
- [77] Mendonça, P. R., Lamb, P., Sahani, D. V., 2014. A Flexible Method for Multi-Material Decomposition of Dual-Energy CT Images. *IEEE Transactions on Medical Imaging* 33 (1), 99–116. [25](#)
- [78] Moore, E. H., 1920. On the Reciprocal of the General Algebraic Matrix. *Bull. Am. Math. Soc.* 26, 394–395. [35](#)
- [79] Mory, C., Sixou, B., Si Mohamed, S., Boussel, L., Rit, S., 2018. Comparison of Five One-Step Reconstruction Algorithms for Spectral CT. *Physics in Medicine & Biology* 63 (23), 235001. [27](#)

-
- [80] Nelder, J. A., Mead, R., 1965. A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal* 7 (4), 308–313. 38, 59
- [81] Newton, I., 1711. *De Analysi per Aequationes Numero Terminorum Infinitas*. 41
- [82] Ng, M. K., Weiss, P., Yuan, X., 2010. Solving Constrained Total-Variation Image Restoration and Reconstruction Problems Via Alternating Direction Methods. *SIAM Journal on Scientific Computing* 32 (5), 2710–2736. 97
- [83] Nocedal, J., Wright, S., 2006. *Numerical Optimization*. Springer Science & Business Media. 39
- [84] Noh, J., Fessler, J., Kinahan, P., 2009. Statistical Sinogram Restoration in Dual-Energy CT for PET Attenuation Correction. *IEEE Transactions on Medical Imaging* 28 (11), 1688–1702. 81
- [85] Nowotny, R., 1998. XMuDat : Photon Attenuation Data on PC. IAEA Report IAEA-NDS 195. 52
- [86] OCDE, 2017. *Panorama de la santé 2017*.
URL https://www.oecd-ilibrary.org/content/publication/health_glance-2017-fr 7
- [87] Pache, G., Krauss, B., Strohm, P., Saueressig, U., Blanke, P., Bulla, S., Schäfer, O., Helwig, P., Kotter, E., Langer, M., *et al.*, 2010. Dual-Energy CT Virtual Noncalcium Technique : Detecting Posttraumatic Bone Marrow Lesions—Feasibility Study. *Radiology* 256 (2), 617–624. 1, 29
- [88] Pan, D., Schirra, C. O., Senpan, A., Schmieder, A. H., Stacy, A. J., Roessler, E., Thran, A., Wickline, S. A., Proska, R., Lanza, G. M., 2012. An Early Investigation of Ytterbium Nanocolloids for Selective and Quantitative “Multicolor” Spectral CT Imaging. *ACS nano* 6 (4), 3364–3370. 29
- [89] Penrose, R., 1955. A Generalized Inverse for Matrices. In : *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Vol. 51. Cambridge University Press, pp. 406–413. 35
- [90] Petersilka, M., Bruder, H., Krauss, B., Stierstorfer, K., Flohr, T. G., 2008. Technical Principles of Dual Source CT. *European Journal of Radiology* 68 (3), 362–368. 14
- [91] Peyrin, F., 1999. *Medical Imaging and Applications I : Synchrotron Radiation MicroTomography*. Edition Frontières. 133
- [92] Phelps, M. E., Hoffman, E. J., Ter Pogossian, M. M., 1975. Attenuation Coefficients of Various Body Tissues, Fluids, and Lesions at Photon Energies of 18 to 136 keV. *Radiology* 117 (3), 573–583. 22
- [93] Poeschl, C., 2008. Tikhonov Regularization with General Residual Term, 42–47. 153

-
- [94] Poludniowski, G., Landry, G., DeBlois, F., Evans, P., Verhaegen, F., 2009. SpekCalc : A Program to Calculate Photon Spectra from Tungsten Anode X-Ray Tubes. *Phys. Med. Biol.* 54 (19). 10, 11, 49, 50, 65
 - [95] Potop, A., Rebuffel, V., Rinkel, J., Brambilla, A., Peyrin, F., Verger, L., 2014. Investigation of the Polynomial Approach for Material Decomposition in Spectral X-Ray Tomography Using an Energy-Resolved Detector. In : *Medical Imaging 2014 : Physics of Medical Imaging*. Vol. 9033. International Society for Optics and Photonics, p. 90333I. 27
 - [96] Radon, J., 2005. 1.1 über die Bestimmung von Funktionen Durch Ihre Integralwerte Längs Gewisser Mannigfaltigkeiten. *Classic Papers in Modern Diagnostic Radiology* 5, 21. 17, 18
 - [97] Resmerita, E., Anderssen, R. S., 2007. Joint Additive Kullback–Leibler Residual Minimization and Regularization for Linear Inverse Problems. *Mathematical Methods in the Applied Sciences* 30 (13), 1527–1544. 60
 - [98] Rodesch, P.-A., 2018. Méthodes Statistiques de Reconstruction Tomographique Spectrale pour des Systèmes à Détection Spectrométrique de Rayons X. Ph.D. thesis. 27
 - [99] Roessl, E., Herrmann, C., 2009. Cramér–Rao Lower Bound of Basis Image Noise in Multiple-Energy X-Ray Imaging. *Physics in Medicine & Biology* 54 (5), 1307. 28, 59
 - [100] Roessl, E., Proksa, R., 2007. K-edge Imaging in X-Ray Computed Tomography using Multi-Bin Photon Counting Detectors. *Physics in Medicine & Biology* 52 (15), 4679. 27
 - [101] Ronaldson, J. P., Zainon, R., Scott, N. J. A., Giese, S. P., Butler, A. P., Butler, P. H., Anderson, N. G., 2012. Toward Quantifying The Composition of Soft Tissues by Spectral CT With Medipix3. *Medical Physics* 39 (11), 6847–6857. 26
 - [102] Schlomka, J., Roessl, E., Dorscheid, R., Dill, S., Martens, G., Istel, T., Bäumer, C., Herrmann, C., Steadman, R., Zeitler, G., *et al.*, 2008. Experimental Feasibility of Multi-Energy Photon-Counting K-Edge Imaging in Pre-Clinical Computed Tomography. *Physics in Medicine & Biology* 53 (15), 4031. 1, 22, 27, 50, 51, 59, 62
 - [103] Sidky, E. Y., Barber, R. F., Gilat Schmidt, T., Pan, X., 2018. Three Material Decomposition for Spectral Computed Tomography Enabled by Block-Diagonal Step-Preconditioning. *arXiv preprint arXiv :1801.06263*. 27
 - [104] Silva, A. C., Morse, B. G., Hara, A. K., Paden, R. G., Hongo, N., Pavlicek, W., 2011. Dual-Energy (Spectral) CT : Applications in Abdominal Imaging. *Radiographics* 31 (4), 1031–1046. 15, 29
 - [105] Spellucci, P., 1998. An SQP Method for General Nonlinear Programs Using Only Equality Constrained SubProblems. *Mathematical Programming* 82 (3), 413–448. 44
 - [106] Stenner, P., Berkus, T., Kachelriess, M., 2007. Empirical Dual Energy Calibration (EDEEC) for Cone-Beam Computed Tomography. *Medical Physics* 34 (9), 3630–3641. 1, 27

-
- [107] Strutz, T., 2010. Data Fitting and Uncertainty : A Practical Introduction to Weighted Least Squares and Beyond. Vieweg and Teubner. 61
- [108] Taguchi, K., Itoh, T., Fuld, M. K., Fournie, E., Lee, O., Noguchi, K., 2018. “X-Map 2.0” for Edema Signal Enhancement for Acute Ischemic Stroke Using Non-Contrast-Enhanced Dual-Energy Computed Tomography. *Investigative Radiology* 53 (7), 432–439. 26
- [109] Taguchi, K., Iwanczyk, J. S., 2013. Vision 20/20 : Single Photon Counting X-Ray Detectors in Medical Imaging. *Medical Physics* 40 (10). 1, 15
- [110] Torikoshi, M., Tsunoo, T., Sasaki, M., Endo, M., Noda, Y., Ohno, Y., Kohno, T., Hyodo, K., Uesugi, K., Yagi, N., 2003. Electron Density Measurement with Dual-Energy X-Ray CT Using Synchrotron Radiation. *Physics in Medicine & Biology* 48 (5), 673. 26
- [111] Vlassenbroek, A., 2011. Dual Layer CT. In : Dual energy CT in clinical practice. Springer, pp. 21–34. 15, 29
- [112] Wang, B., Gao, Z., Zou, Q., Li, L., 2003. Quantitative Diagnosis of Fatty Liver With Dual-Energy CT : An Experimental Study in Rabbits. *Acta Radiologica* 44 (1), 92–97. 29
- [113] Wang, Z., Bovik, A. C., Sheikh, H. R., Simoncelli, E. P., *et al.*, 2004. Image Quality Assessment : From Error Visibility to Structural Similarity. *IEEE Transactions on Image Processing* 13 (4), 600–612. 56
- [114] Webb, A., Kagadis, G. C., 2003. Introduction to BioMedical Imaging. *Medical Physics* 30 (8), 2267–2267. 9
- [115] Wolfe, P., 1969. Convergence Conditions for Ascent Methods. *SIAM review* 11 (2), 226–235. 39
- [116] Wright, S., Nocedal, J., 1999. Numerical Optimization. Springer Science 35 (67-68), 7. 97
- [117] Wright, S. J., 2015. Coordinate Descent Algorithms. *Mathematical Programming* 151 (1), 3–34. 38
- [118] Xu, C., Persson, M., Chen, H., Karlsson, S., Danielsson, M., Svensson, C., Bornefalk, H., 2013. Evaluation of a Second-Generation Ultra-Fast Energy-Resolved ASIC for Photon-Counting Spectral CT. *IEEE Transactions on Nuclear Science* 60 (1), 437–445. 15
- [119] You, J., Zeng, G. L., Liang, Z., 2005. FBP Algorithms for Attenuated Fan-Beam Projections. *Inverse Problems* 21 (3), 1179. 21
- [120] Zimmerman, K. C., Schmidt, T. G., 2015. Experimental Comparison of Empirical Material Decomposition Methods for Spectral CT. *Physics in Medicine & Biology* 60 (8), 3175. 27



FOLIO ADMINISTRATIF

THESE DE L'UNIVERSITE DE LYON OPEREE AU SEIN DE L'INSA LYON

NOM : HOHWEILLER

(avec précision du nom de jeune fille, le cas échéant)

DATE de SOUTENANCE : 13/11/2019

Prénoms : Tom

TITRE : Méthodes de décomposition non-linéaire pour l'imagerie X spectrale

NATURE : Doctorat

Numéro d'ordre : 2019LYSEI097

Ecole doctorale : Électronique, Électrotechnique, Automatique (ED 160)

Spécialité : Traitement du signal et de l'image

RESUME : La tomodensitométrie spectrale est une modalité d'imagerie par rayons X émergente. Récemment des développements sur des détecteurs à comptage de photons ont permis d'acquérir des données résolues en énergies sur plusieurs plages. Cette modalité permet de remonter à la composition chimique des tissus et à l'utilisation de nouveaux agents de contraste présentant des discontinuités énergétiques. La possibilité d'utiliser d'autres marqueurs et de quantifier leur présence dans le patient donne un fort potentiel dans le domaine de l'imagerie médicale. Une approche pour le traitement des données spectrales est d'effectuer une décomposition en base de matériaux préalables à la reconstruction tomographique. Ces méthodes avec un grand nombre de plages d'énergies n'en sont qu'à leurs débuts. Les techniques classiques par calibration ne sont plus numériquement stables pour plus de deux plages disponibles.

Cette thèse a pour objectif de développer de nouvelles méthodes de décomposition dans les projections. Après formulation du problème direct, celui de décomposition est exprimé comme un problème inverse non linéaire, résolu en minimisant une fonction de coût. Ces travaux présentent première une adaptation de la fonctionnelle prenant en compte la nature du bruit. Elle permet d'obtenir de meilleures décompositions pour de forts niveaux de bruit, comparé aux méthodes classiques. Puis, deux algorithmes de minimisation incluant une contrainte de positivité sont proposés : un algorithme de Gauss-Newton projeté, permet d'obtenir des cartes rapidement et de meilleure qualité que des méthodes non contraintes et un algorithme de type ADMM, ajoute une contrainte d'égalité. Elle permet de diminuer des artefacts dans l'image. Ces méthodes sont évaluées sur des données numériques de souris et de thorax humain. Pour accélérer et simplifier les méthodes, un choix automatique des hyperparamètres est proposé. Il permet une diminution du temps de calcul tout en gardant de bonnes décompositions. Finalement, ces méthodes sont testées sur des données expérimentales.

MOTS-CLÉS : Imagerie par rayons X, imagerie spectrale, décomposition en matériaux, problèmes inverses, optimisation sous contrainte, régularisation

Laboratoire(s) de recherche : CREATIS

Directeur de thèse : Bruno SIXOU

Président de jury : Laurent DESBAT

Composition du jury :	Thomas RODET	Professeur	ENS Cachan	Rapporteur
	Christian MOREL	Professeur	Aix-Marseille Université	Rapporteur
	Laurent DESBAT	Professeur	Université Grenoble Alpes	Examinateur
	Clarisse FOURNIER	Ingénieur Chercheur	CEA LETI	Examinatrice
	Françoise PEYRIN	Directrice de recherche	INSERM	Examinatrice
	Bruno SIXOU	Maître de conférence	INSA Lyon	Directeur de thèse
	Nicolas DUCROS	Maître de conférence	INSA Lyon	Co-directeur de thèse