



HAL
open science

Fusion rapide d'images multispectrales et hyperspectrales en astronomie infrarouge.

Claire Guilloteau

► **To cite this version:**

Claire Guilloteau. Fusion rapide d'images multispectrales et hyperspectrales en astronomie infrarouge.. Autre [cs.OH]. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2021. Français. NNT : 2021INPT0090 . tel-04186373

HAL Id: tel-04186373

<https://theses.hal.science/tel-04186373>

Submitted on 23 Aug 2023

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (Toulouse INP)

Discipline ou spécialité :

Informatique et Télécommunication

Présentée et soutenue par :

Mme CLAIRE GUILLOTEAU

le mercredi 13 octobre 2021

Titre :

Fusion rapide d'images multispectrales et hyperspectrales en astronomie
infrarouge.

École doctorale :

Mathématiques, Informatique, Télécommunications de Toulouse (MITT)

Unité de recherche :

Institut de Recherche en Informatique de Toulouse (IRIT)

Directeurs de Thèse :

M. NICOLAS DOBIGEON

M. THOMAS OBERLIN

M. BERNE OLIVIER

Rapporteurs :

M. ALAIN ABERGEL, UNIVERSITE PARIS-SACLAY
M. JEAN-FRANÇOIS GIOVANNELLI, CNRS AQUITAINE

Membres du jury :

M. JOCELYN CHANUSSOT, INP GRENOBLE, Président
M. EMERIC BRON, OBSERVATOIRE DE PARIS, Membre
MME CAROLE LEGUYADER, INSA ROUEN, Membre
M. NICOLAS DOBIGEON, TOULOUSE INP, Membre
M. OLIVIER BERNE, OBS MIDI-PYRENEES TOULOUSE, Membre
M. THOMAS OBERLIN, TOULOUSE INP, Membre

Remerciements

De nombreuses personnes ont contribué à la réussite de ce travail de thèse. Je leur dois beaucoup et ces quelques lignes leur sont dédiées.

Mes premiers remerciements s'adressent à vous, Olivier, Nicolas et Thomas, qui êtes à l'origine de ce travail. Merci d'avoir accepté de placer entre mes (nos) mains ce sujet de stage et de l'avoir encadré, sans failles. J'ai beaucoup apprécié votre disponibilité, vos conseils et plus encore votre soutien. Je suis très reconnaissante d'avoir travaillé avec vous, c'était un réel plaisir.

Je souhaiterais ensuite remercier chaleureusement les membres du jury d'avoir évalué ces travaux. Merci à Alain Abergel et Jean-François Giovannelli d'avoir accepté de rapporter cette thèse et merci à Carole Le Guyader, Emeric Bron et Jocelyn Chanussot d'avoir examiné ce travail de thèse. C'était un honneur.

Cette thèse n'aurait pu être menée à bien sans l'excellent accueil des équipes SC de l'IRIT et MICMAC de l'IRAP. Je pense tout particulièrement à Camille, Vinicius et Jean-Sébastien, qui ont débuté leur thèse en même temps que moi. Merci à tous les doctorants partis ou arrivés en cours de route : Yanna, Vinicius, Gabriel, Margaux, Olivier, Louis, Adrien, Dylan, Serdar, Sacha, Étienne, Baha, Maxime, Mouna, Pierre-Hugo, Asma, Florentin. Merci pour toutes les agréables discussions, les inoubliables concours de mots-croisés, les repas et le vin partagés. Un très grand merci également à tous les permanents, post-doctorants et stagiaires que j'ai côtoyé pendant ces trois années : Marie, Nicolas, Thomas, Emmanuel, Isabelle, Olivier, Alexandre, Mathieu, Florian, Amélie, Yassine. Je souhaite que l'excellente ambiance, à l'IRIT comme à l'IRAP, perdure encore longtemps. J'aimerais remercier tout le personnel de l'IRIT, de l'ENSEEIH et de l'IRAP, en particulier Annabelle, pour sa gentillesse et sa rigueur.

Au terme de la première année de thèse, j'ai eu la très grande chance de participer au programme d'été 2019 Kavli pour l'astrophysique. Je voudrais remercier tous les participants, étudiants, post-doctorants et chercheurs seniors, d'avoir contribué à cette expérience intense et hautement enrichissante, autant humainement que scientifiquement.

Je n'oublie pas Sacha et toute l'équipe d'UniverSCiel pour cette initiation au monde de la vulgarisation scientifique. Merci à l'équipe ballon : Edoardo, Simon, Anthony, Jean-Sébastien, Paul, Christian et Jean-Claude, au bureau 2020 : David, Sacha, Wilhem et Mickaël et toutes les personnes avec qui nous avons collaboré en festival ou dans les écoles pour le partage scientifique, les discussions animées et les nombreux rires.

Mes amis, qu'ils soient camarades d'école, de soirée, de loisirs, ont tous constitué un soutien précieux. En particulier, je voudrais remercier Amaury, qui soutient sa thèse demain à l'heure où j'écris ces mots.

Pour finir, mille mercis à ma (très grande) famille pour votre soutien et votre présence à la soutenance, sur place ou à distance. De plus grands mercis encore à mes parents de m'avoir donné la liberté de faire mes propres choix et de m'avoir accompagnée sans condition.

Merci Noé, pour ton immense soutien, la vaisselle impeccable, et ton humour.

Résumé

Le James Webb Space Telescope (JWST) sera lancé en octobre 2021 et fournira des images multispectrales (à basse résolution spectrale) sur de larges champs de vue (avec une haute résolution spatiale) et des images hyperspectrales (à haute résolution spectrale) sur des petits champs de vue (avec une plus basse résolution spatiale). Les travaux de cette thèse ont pour but de développer des méthodes de fusion qui combinent ces images pour reconstruire la scène astrophysique observée à haute résolution spatiale et spectrale. Le produit fusionné permettra une amélioration de l'interprétation scientifique des données. Ces travaux s'inscrivent dans le programme d'observation prioritaire Early Release Science "Radiative Feedback of Massive Stars" qui sera mené lors de la première vague des missions scientifiques du JWST en septembre 2022.

Le problème de fusion d'images de résolutions spatiales et spectrales différentes a été largement étudié dans un contexte d'observation de la Terre. Les méthodes les plus performantes sont basées sur la résolution de problèmes inverses, en minimisant un critère de fidélité aux données complété par un terme de régularisation. Le terme d'attache aux données est formulé d'après un modèle direct des instruments d'observation. Le terme de régularisation peut être interprété comme une information a priori sur l'image fusionnée. Les principaux enjeux de la fusion de données pour le JWST sont le très gros volume des données fusionnées, considérablement plus grand que la taille typique des images rencontrées en observation de la Terre, et la complexité des deux instruments d'observation.

Dans cette thèse, nous proposons d'abord un cadre générique permettant de simuler des observations telles qu'elles seront fournies par deux instruments embarqués sur le JWST : l'imageur multispectral NIRCam et le spectromètre NIRSpec. Ce protocole repose principalement sur une image de référence à hautes résolutions spatiale et spectrale et sur la modélisation des instruments considérés. Dans ces travaux, l'image de référence est synthétiquement créée en exploitant une factorisation réaliste des caractéristiques spatiales et spectrales d'une région de photodissociation. Pour simuler les images multi- et hyperspectrales, nous établissons un modèle d'observation précis respectant les spécifications des instruments NIRCam et de NIRSpec. Ce modèle direct tient compte des particularités des instruments d'observation astrophysique, à savoir un flou spectralement variant pour chacun des instruments, et de leurs caractéristiques de bruit particulières. Ce cadre générique, inspiré par le célèbre protocole de Wald et al. (2005), rend possible la simulation de données réalistes qui seront utilisées pour évaluer les performances des algorithmes de fusion.

Ensuite, nous exploitons le modèle direct précédemment établi pour formuler la tâche de fusion comme un problème inverse. En complément du terme d'attache aux données obtenu, un certain nombre de régularisations sont explorées. Tout d'abord, une régularisation spectrale est définie en suivant une hypothèse de rang faible sur l'image fusionnée. Ensuite, les régularisations spatiales suivantes sont explorées : régularisation de type Sobolev, régularisation de type Sobolev à poids, représentation par patch et apprentissage de dictionnaires. Pour surmonter la complexité des modèles instrumentaux ainsi que la très grande taille des données, une implémentation rapide est proposée, en résolvant le problème dans le domaine spatial de Fourier et dans un sous-espace spectral. Une importance particulière a été accordée à une prise en compte des incertitudes liées au problème : erreurs de pointage du télescope et de recalage des images.

Mots-clés : Fusion de données, imagerie hyperspectrale, imagerie de grande dimension, astronomie infrarouge, modélisation de données en astronomie, régions de photodissociation, super-résolution, déconvolution.

Abstract

The James Webb Space Telescope (JWST) will be launched in 2021 and will provide multispectral images (with low spectral resolution) on wide fields of view (with high spatial resolution) and hyperspectral images (with high spectral resolution) on small fields of view (with lower spatial resolution). This Ph.D. thesis aims at developing fusion methods that will combine those images to reconstruct the astrophysical scene at high spatial and spectral resolutions. The fused product will make data analysis significantly easier. This Ph.D. project is part of the Early Release Science observing program "Radiative Feedback of Massive Stars" which will be conducted in the first wave of the JWST scientific mission in September 2022.

Fusing images of different spatial and spectral resolutions has been deeply investigated for remote sensing in Earth observation. The most powerful methods are based on the resolution of an inverse problem, i.e., by minimizing a cost function composed of a data fidelity term complemented by a regularization term. The data fidelity term is formulated from a forward model of the observation instruments. The regularization term can be interpreted as a prior information on the fused image. The main challenges of data fusion for the JWST are due to the very large scale of the fused data, considerably larger than the size encountered in remote sensing, as well as complexity of both instruments.

In a first part of this thesis, one proposes a generic framework which allows observations to be simulated as they would have been provided by two instruments on board the JWST : the NIRC*am* multispectral imager and the NIRSpec spectrometer. This protocol is mainly based on a reference image with high spatial and spectral resolutions and on the modeling of the instruments considered. In this work, the reference image is synthetically created by exploiting a realistic factorization of the spatial and spectral characteristics of a photodissociation region. To simulate multi- and hyperspectral images, one derives an accurate observation model that satisfies the specifications of the NIRC*am* and NIRSpec instruments. This direct model takes into account the specificities of astrophysical observation instruments, namely a spectrally varying blur for each of the instruments, and their particular noise characteristics. This generic framework, inspired by the famous protocol of Wald *et al.* (2005), allows realistic data sets to be simulated, that will be subsequently used to evaluate the performance of the fusion algorithms.

Then, one exploits the direct model previously established to formulate the fusion task as an inverse problem. In addition to the data fitting term, various regularizations are explored. First, a spectral regularization is defined by following a low rank hypothesis on the fused image. Then, the following spatial regularizations are envisioned : Sobolev, weighted Sobolev, patch-based representations and dictionary learning. To overcome the complexity of the instrumental models as well as the very large data volume, a fast implementation is proposed, by solving the problem in the Fourier spatial domain and in a spectral subspace. Particular importance is given to taking into account the uncertainties associated with the problem : errors in telescope jitter and in image misregistration.

Keywords : Data fusion, hyperspectral imaging, high dimensional imaging, infrared astronomy, astronomy data modeling, photodissociation regions, super-resolution, deconvolution.

Table des matières

| | |
|---|----|
| Résumé | 5 |
| Abstract | 7 |
| Notations | 13 |
| Introduction | 15 |
| 1 Imagerie et spectro-imagerie en observation astrophysique | 19 |
| 1.1 Les données d'observation astrophysique | 19 |
| 1.2 Méthodes de restauration et d'analyse de données astronomiques | 24 |
| 1.2.1 <i>Restauration de données d'observation astronomique</i> | 24 |
| 1.2.2 <i>Détection et classification d'objets</i> | 26 |
| 1.2.3 <i>Séparation de sources et de composantes</i> | 27 |
| 1.3 Le contexte JWST pour l'observation de PDRs | 28 |
| 1.3.1 <i>Le JWST et ses instruments</i> | 28 |
| 1.3.2 <i>Observation prioritaire de régions de photo-dissociation</i> | 31 |
| 1.4 Les enjeux de la spectro-imagerie en observation astrophysique avec le JWST | 34 |
| 2 Fusion d'images : un état de l'art | 37 |
| 2.1 Exploiter les caractéristiques des capteurs et des images | 37 |
| 2.2 Hypothèses de travail, notations, modèles | 38 |
| 2.3 Classes d'algorithmes | 41 |
| 2.3.1 <i>Méthodes heuristiques</i> | 42 |
| 2.3.2 <i>Factorisation de matrices</i> | 44 |
| 2.3.3 <i>Résolution de problèmes inverses</i> | 46 |
| 2.3.4 <i>Régularisations associées à la résolution de problèmes inverses</i> | 51 |
| 2.3.5 <i>Méthodes par apprentissage automatique</i> | 53 |
| 2.4 Validation des méthodes : le protocole de Wald | 56 |
| 2.5 Limites des méthodes dans le cas d'observations astronomiques | 59 |
| 3 Simulation de données pour la fusion d'images HS et MS | 61 |

| | |
|---|-----|
| 3.1 Synthèse d'une scène de PDR de la Barre d'Orion | 61 |
| 3.1.1 Région de photo-dissociation | 61 |
| 3.1.2 Synthèse | 62 |
| 3.2 Modélisation des instruments NIRC <i>Cam</i> et NIRS <i>pec</i> | 68 |
| 3.2.1 NIRC <i>Cam</i> | 69 |
| 3.2.2 NIRS <i>pec</i> | 72 |
| 3.3 Modélisation des bruits instrumentaux | 72 |
| 3.3.1 Bruit de photon | 73 |
| 3.3.2 Bruit de lecture | 73 |
| 3.3.3 Rayons cosmiques, lumière zodiacale et bruit de fond | 74 |
| 3.4 Simulation des données d'observation NIRC <i>Cam</i> et NIRS <i>pec</i> | 75 |
| 3.5 Bilan | 78 |
| | |
| 4 Fusion rapide d'images pour le JWST | 81 |
| 4.1 Formulation du problème | 81 |
| 4.2 Régularisations spatiales | 83 |
| 4.2.1 Énergie du gradient | 84 |
| 4.2.2 Énergie du gradient pondéré | 84 |
| 4.2.3 Régularisation par dictionnaire | 86 |
| 4.3 Implémentation rapide dans le sous-espace | 87 |
| 4.3.1 Résolution : cas de la régularisation de type Sobolev | 88 |
| 4.3.2 Complexité | 90 |
| 4.3.3 Résolution : cas des régularisations informées | 92 |
| 4.4 Protocole expérimental | 94 |
| 4.4.1 Métriques | 95 |
| 4.4.2 Méthodes comparées | 96 |
| 4.5 Expériences : régularisation de type Sobolev | 97 |
| 4.5.1 Résultats | 98 |
| 4.5.2 Paramétrage de la régularisation | 102 |
| 4.5.3 Étude de la robustesse de la méthode | 103 |
| 4.6 Expériences : régularisations informées | 105 |
| 4.6.1 Résultats | 105 |
| 4.6.2 Influence de la régularisation sur le choix de l'hyperparamètre μ | 111 |
| 4.7 Bilan | 112 |
| | |
| Conclusion | 115 |
| | |
| A Annexes du chapitre 2 | 121 |
| A.1 Vectorisation du problème inverse de fusion régularisé quadratiquement | 121 |

| | | |
|-------|--|-----|
| A.2 | Descente de gradient accélérée | 121 |
| A.3 | Détails de l'algorithme de fusion par résolution d'une équation de Sylvester | 122 |
| B | Annexes du chapitre 3 | 125 |
| B.1 | Scène synthétique complémentaire | 125 |
| C | Annexes du chapitre 4 | 129 |
| C.1 | Vectorisation des opérateurs | 129 |
| C.2 | Structure et calcul efficace de la matrice du système linéaire | 129 |
| C.3 | Coupe à travers les structures brillantes | 131 |
| C.4 | Performances dans le cas d'un SNR réduit | 132 |
| C.4.1 | <i>Protocole expérimental</i> | 132 |
| C.4.2 | <i>Résultats</i> | 133 |
| C.5 | Expériences sur la scène complémentaire | 135 |
| C.5.1 | <i>Protocole expérimental et méthodes comparées</i> | 135 |
| C.5.2 | <i>Résultats</i> | 136 |
| D | Generative Networks For Emulating Synthetic Sky Images | 143 |
| | Bibliographie | 165 |

Notations

| | |
|---|--|
| a | Scalaire |
| \mathbf{a} | Vecteur |
| \mathbf{a}_i | i -ème composante du vecteur \mathbf{a} |
| \mathbf{A} | Matrice |
| \mathbf{A}^i | i -ème colonne de la matrice \mathbf{A} |
| \mathbf{A}_i | i -ème ligne de la matrice \mathbf{A} |
| $\mathbf{A}_{(i)}$ | Matrice \mathbf{A} à l'itération i |
| \mathbf{A}_Ω | Entrées de \mathbf{A} dont les indices appartiennent à l'ensemble Ω |
| $(\cdot)^T$ | Transposée |
| $(\cdot)^H$ | Transposée hermitienne |
| \mathbf{AB} | Produit matriciel |
| $\mathbf{A} \odot \mathbf{B}$ | Produit de Hadamard (terme à terme) |
| $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ | Produit de Kronecker |
| $\ \mathbf{a}\ _1$ | Norme ℓ_1 du vecteur \mathbf{a} |
| $\ \mathbf{a}\ _2$ | Norme ℓ_2 du vecteur \mathbf{a} |
| $\ \mathbf{A}\ _F$ | Norme de Frobenius de la matrice \mathbf{A} |
| \mathbf{I}_n | Matrice identité de taille $n \times n$ |
| \mathbb{N} | Ensemble des entiers naturels |
| \mathbb{R} | Ensemble des nombres réels |
| \mathbb{R}^n | Ensemble des vecteurs réels de taille n |
| $\mathbb{R}^{m \times n}$ | Ensemble des matrices réelles de taille $m \times n$ |
| $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ | Loi normale de moyenne μ et d'écart-type σ |
| $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Lambda})$ | Loi normale multivariée de moyenne $\boldsymbol{\mu}$ et de matrice de covariance $\boldsymbol{\Lambda}$ |
| $p(x)$ | Densité de probabilité de x |

Introduction

Le travail de thèse synthétisé dans ce manuscrit a été réalisé au sein d'une collaboration entre l'équipe Signal et communications (SC) de l'Institut de Recherche en Informatique de Toulouse (IRIT) et l'équipe Milieu interstellaire, cycle de la matière et astro-chimie (MICMAC) de l'Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie (IRAP) de Toulouse. Les activités de recherche de l'équipe SC concernent le traitement statistique du signal et des images. Plus particulièrement, l'équipe possède une expertise en analyse d'images multivariées pour l'observation de la Terre [Ferraris *et al.*, 2018; Lagrange *et al.*, 2020], l'imagerie médicale [Cavalcanti *et al.*, 2018], la microscopie [Monier *et al.*, 2018] ou encore l'astronomie [Vono *et al.*, 2019]. L'équipe MICMAC mène des recherches sur le cycle de la matière dans l'Univers et sur la physique et la chimie du milieu interstellaire. Une partie des travaux de recherche de l'équipe MICMAC s'intéresse à la séparation aveugle de sources d'images hyperspectrales du milieu interstellaire [Berné *et al.*, 2007; Boulais, Deville et Berné, 2015; Foschino, Berné et Joblin, 2019]. La collaboration entre ces deux équipes de recherche, à travers ces travaux de thèse, concerne la restauration de données hyperspectrales à haute résolution spatiale dans le cadre d'observations du télescope spatial James Webb (JWST).

Le JWST, développé par la NASA, l'ESA et la CSA, sera lancé durant l'automne 2021 et fournira des observations dans l'infrarouge entre 0.6 et 28 microns. Le JWST a pour objectifs scientifiques l'étude de l'univers jeune, des galaxies et de leur évolution, l'étude du cycle des étoiles et l'étude des exoplanètes. Ce projet de thèse s'inscrit dans le programme d'observation prioritaire *Early Release Science* "PDRs4all : Radiative Feedback of Massive Stars" qui sera mené lors de la première vague des missions scientifiques du JWST. Il sera dédié à l'observation de régions de formation stellaire et plus particulièrement aux régions de photodissociation proches d'étoiles massives à l'aide d'images multibandes (à basse résolution spectrale) sur de larges champs de vue (avec une haute résolution spatiale) et des images spectrales (à haute résolution spectrale) sur des petits champs de vue (avec une basse résolution spatiale). Les travaux de cette thèse ont pour but de développer des méthodes de fusion qui combinent ces images pour reconstruire la scène astrophysique observée à haute résolution spatiale et spectrale.

Le problème de fusion d'images a été largement étudié pour des images d'observation de la Terre. D'abord conçues pour combiner des images en niveaux de gris et des images multispectrales, les premières méthodes dites de *pansharpening* sont rapides et faciles à implémenter. Les méthodes de fusion d'images hyperspectrales et multispectrales apparaissent, s'appuyant sur des paradigmes de démixage spectral. Les méthodes les plus performantes sont basées sur la résolution de problèmes inverses, en

minimisant un critère de fidélité aux données complété par un terme de régularisation. Le terme d'attache aux données est alors formulé d'après un modèle direct des instruments d'observation et le terme de régularisation peut être interprété comme une information *a priori* sur l'image fusionnée. Ces différentes méthodes dédiées à l'observation de la Terre ne sont cependant pas appropriées pour la fusion de données en astronomie observationnelle. Plus particulièrement, les principaux enjeux de la fusion de données pour le JWST sont le très gros volume des données fusionnées, considérablement plus grand que la taille typique des images rencontrées en observation de la Terre, et la complexité des deux instruments d'observation (e.g. flous spatiaux spectralement variants).

Pour cela, nous proposons d'abord un cadre générique, inspiré du célèbre protocole de Wald, Ranchin et Mangolini, 2005 permettant de simuler des observations telles qu'elles seront fournies par deux instruments embarqués sur le JWST. Nous formulons ensuite la tâche de fusion comme un problème inverse régularisé. Pour surmonter la complexité des modèles instrumentaux ainsi que la très grande taille des données, une implémentation rapide est proposée, en résolvant le problème dans le domaine spatial de Fourier et dans un sous-espace spectral en un temps raisonnable. Les expériences menées dans le cadre du protocole développé montrent l'efficacité de la méthode de fusion proposée et soulignent l'intérêt d'une fusion symétrique en comparaison à une reconstruction asymétrique.

STRUCTURE DU MANUSCRIT

Le manuscrit est organisé de la façon suivante. Les chapitres 1 et 2 sont des chapitres introductifs et décrivent le contexte de ces travaux de thèse. Les chapitres 3 et 4 présentent les contributions de la thèse et s'appuient respectivement sur les publications 1 et 2 (voir Liste des contributions).

Le chapitre 1 présente les données génériques en astronomie observationnelle ainsi que différentes méthodes de restauration et d'analyse de ces données. Le contexte d'observation de régions de photodissociation avec le JWST dans lequel s'inscrivent ces travaux est décrit. Enfin, les enjeux de la spectro-imagerie à haute résolution spatiale et spectrale sont détaillés.

Le chapitre 2 dresse un état de l'art des techniques de fusion d'images, majoritairement dédiées à l'observation de la Terre. Ces techniques sont classées en quatre catégories. L'accent a été placé sur les techniques basées sur la formulation et la résolution de problèmes inverses. Les limites de ces méthodes dans le cas d'observations astrophysiques sont finalement détaillées et motivent les travaux décrits par la suite.

Le chapitre 3 développe un cadre global dans le même esprit que le célèbre protocole proposé par Wald, Ranchin et Mangolini, 2005 pour évaluer les performances des algorithmes de fusion d'images en astronomie observationnelle. Dans ce chapitre, l'image de référence à haute résolution spatiale et spectrale a été synthétiquement créée pour correspondre aux propriétés spatiales et spectrales d'une région de photodissociation, un objet d'étude pour le projet d'observation PDRs4all avec le JWST.

Pour simuler les images multi- et hyperspectrales, nous établissons un modèle d'observation précis respectant les spécifications des instruments NIRCam et de NIRSpc. Ce modèle direct tient compte des particularités des instruments d'observation astrophysique, à savoir des flous spectralement variants pour chacun des instruments, et de leurs caractéristiques de bruit.

Le chapitre 4 formule d'abord le problème de fusion d'images astronomiques sous la forme d'un problème inversé régularisé. Une régularisation spectrale basée sur une représentation faible rang et trois régularisations spatiales sont alors définies : régularisation de type Sobolev, régularisation de type Sobolev à poids, représentation par dictionnaires. Ensuite, une implémentation rapide est proposée, résolvant le problème dans le domaine de Fourier et dans un sous-espace, afin de surmonter la complexité des modèles instrumentaux ainsi que la très grande dimension des données. La méthode proposée est comparée avec d'autres méthodes de fusion et de reconstruction de données de la littérature. Une étude de la robustesse de la méthode face aux incertitudes liées au problème est enfin menée.

Les annexes A, B et C enrichissent respectivement les chapitres 2, 3 et 4. Plus particulièrement, les annexes B et C présentent des résultats de fusion supplémentaires.

LISTE DES CONTRIBUTIONS

Les travaux effectués pendant cette thèse ont été valorisés par les publications et présentations orales suivantes.

Journaux internationaux

1. C. Guilloateau, T. Oberlin, O. Berné, E. Habart, N. Dobigeon, *Simulated JWST Data Sets for Multispectral and Hyperspectral Image Fusion*, The Astronomical Journal, vol. 160, no. 1, 2020.
2. C. Guilloateau, T. Oberlin, O. Berné and N. Dobigeon, *Hyperspectral and Multispectral Image Fusion Under Spectrally Varying Spatial Blurs – Application to High Dimensional Infrared Astronomical Imaging*, IEEE Transactions on Computational Imaging, vol. 6, pp. 1362-1374, 2020.

Conférences internationales

3. C. Guilloateau, T. Oberlin, O. Berné, N. Dobigeon, *Fusion of hyperspectral and multispectral infrared astronomical images*, Workshop on Signal Processing with Adaptive Sparse Structured Representations (SPARS 2019), 2019. (Poster)
4. C. Guilloateau, T. Oberlin, O. Berné, N. Dobigeon, *Fusion of hyperspectral and multispectral infrared astronomical images*, IEEE 11th Sensor Array and Multichannel Signal Processing Workshop (SAM), 2020, pp. 1-5. (Présentation orale)

Conférences nationales

5. C. Guilloteau, T.Oberlin, O. Berné, N. Dobigeon, *Fusion d'images multispectrales et hyperspectrales pour l'observation en astronomie infrarouge*, 27e colloque du Groupe de Recherche et d'Etudes du Traitement du Signal et des Images (GRETSI 2019), 2019. (Présentation orale)

Présentations orales

6. C. Guilloteau, T.Oberlin, O. Berné, N. Dobigeon, *Fusion of hyperspectral and multispectral infrared astronomical images*, Journée des thèses de l'IRAP, 2019. (Présentation orale et poster)

7. C. Guilloteau, T.Oberlin, O. Berné, E. Habart, N. Dobigeon, *Simulated JWST Data Sets for Multispectral and Hyperspectral Image Fusion*, 236th meeting of the American Astronomical Society (AAS 236), 2020.

8. C. Guilloteau, T.Oberlin, O. Berné, E. Habart, N. Dobigeon, *Synthetic maps and creation of a synthetic scene cube from spectra. NIRSpec forward model simulations to create simulated cubes (to be used for science enabling products)*, Monthly teleconference PDRs4all, 2021.

Rapport technique

Pendant ces trois années de thèse, j'ai eu l'occasion de participer au programme d'été en astrophysique Kavli se déroulant durant 6 semaines à l'Université de Californie à Santa Cruz. Ce programme a regroupé 15 chercheurs seniors, 15 chercheurs post-doctoraux et 15 étudiants doctorants pour collaborer à différents projets de recherche sur le thème de l'apprentissage automatique à l'ère des grands jeux de données en astrophysique. Plus précisément, j'ai contribué à l'étude de réseaux génératifs pour l'émulation d'images synthétiques de galaxies. Le rapport technique suivant est disponible dans l'annexe [D](#) :

9. C. Guilloteau, N. Ramachandra, F. Lanusse, S. Hassan, Y.S. Ting, M. Huertas-Company, A. Leauthaud, S. Huang, *Generative networks for emulating synthetic sky images*, Kavli Summer Program in Astrophysics (KSPA 2019), University of California Santa Cruz, 2019.

Imagerie et spectro-imagerie en observation astrophysique

1

Contenu du chapitre

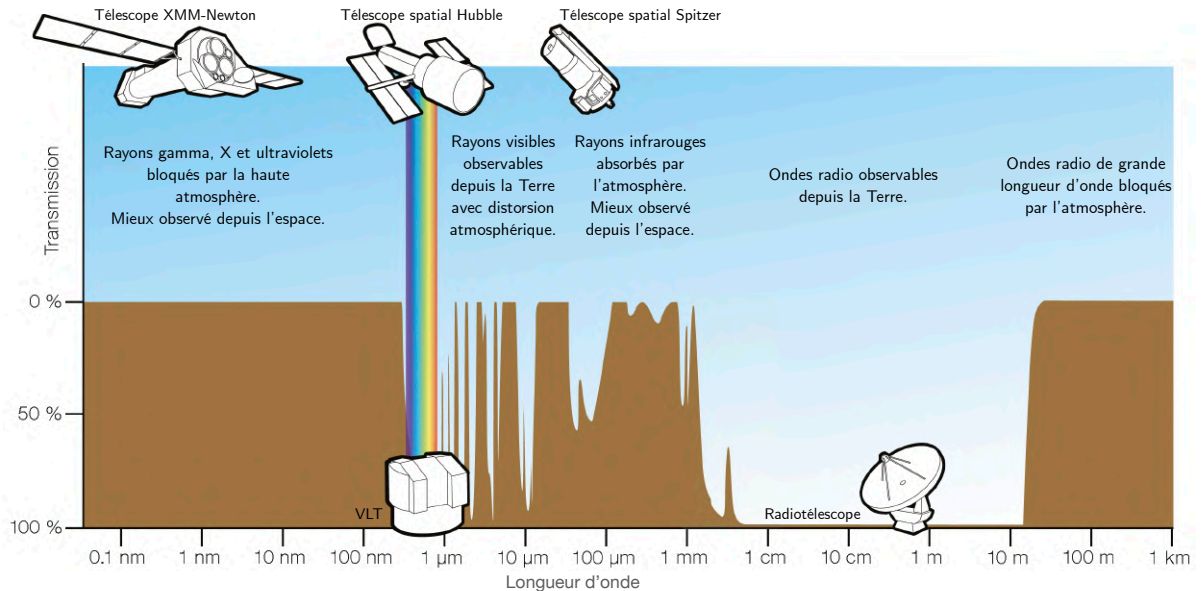
1.1 LES DONNÉES D'OBSERVATION ASTROPHYSIQUE

L'astronomie observationnelle est l'étude des objets célestes de l'univers observable via l'acquisition de données par des instruments astronomiques et télescopes. Ces données d'observation captent majoritairement le rayonnement électromagnétique de ces objets. On classe les différentes régions du spectre électromagnétique par longueur d'onde (voir figure 1.1) : le rayonnement de haute énergie, incluant les rayons gamma, X et ultraviolets extrêmes jusqu'à une longueur d'onde de 10 nm, le rayonnement ultraviolet et visible jusqu'à 800 nm, le rayonnement infrarouge jusqu'à 300 microns et les ondes radio au-delà.

L'atmosphère est relativement transparente à certaines longueurs d'ondes. La figure 1.1 décrit la transmission de l'atmosphère (en pourcentage) en fonction de la longueur d'onde observée. Ainsi, l'observation du rayonnement visible et d'une partie du rayonnement radio peut être effectuée à l'aide d'observatoires terrestres. Le passage des rayons lumineux à travers l'atmosphère induit des distorsions qui limitent la résolution spatiale des données observées depuis la Terre. Les observatoires terrestres sont alors habituellement situés à haute altitude afin de minimiser ces effets atmosphériques. Le très grand télescope (en anglais *very large telescope*, *VLT*) est par exemple situé dans le désert d'Atacama, au Chili, à une altitude de 2635 m. Les observatoires de Mauna Kea, sur l'île d'Hawaï, sont situés à 4205 m d'altitude. L'opacité presque totale de l'atmosphère dans l'infrarouge mentionnée dans la figure 1.1 est due à l'absorption par la vapeur d'eau présente dans l'atmosphère, excepté pour quelques fenêtres de longueurs d'onde transmises. Observer dans l'infrarouge depuis la Terre est donc possible mais très difficile en pratique. De plus, les télescopes et l'instrumentation d'observation sont source de rayonnement infrarouge. Les émissions thermiques des capteurs doivent donc être réduites en les refroidissant. Une alternative pour s'affranchir de ces limitations, ainsi que de l'opacité de l'atmosphère et la limitation de la résolution spatiale due aux turbulences atmosphériques, est l'utilisation d'observatoires spatiaux ou de ballons stratosphériques. Ces types d'observatoires sont obligatoirement utilisés pour l'observation du rayonnement de haute énergie (e.g. le télescope spatial XMM-Newton) et sont préférés pour l'observation infrarouge (e.g. les télescopes spatiaux Spitzer, Herschel et le futur télescope spatial James Webb). Lorsque qu'elle n'est pas limitée par les turbulences atmosphériques, la résolution angulaire θ des observations est inversement proportionnelle au diamètre D du miroir primaire du télescope selon le critère de Rayleigh [Rayleigh, 1880] : $\theta = 1.22 \frac{\lambda}{2D}$, où λ désigne la longueur

| | |
|--|-----------|
| 1.1 Les données d'observation astrophysique | 19 |
| 1.2 Méthodes de restauration et d'analyse de données astronomiques | 24 |
| Restauration de données d'observation astronomique | |
| Détection et classification d'objets | |
| Séparation de sources et de composantes | |
| 1.3 Le contexte JWST pour l'observation de PDRs | 28 |
| Le JWST et ses instruments | |
| Observation prioritaire de régions de photo-dissociation | |
| 1.4 Les enjeux de la spectro-imagerie en observation astrophysique avec le JWST | 34 |

d'onde observée. La mise en orbite de télescopes spatiaux ayant de très grands miroirs primaires constitue encore aujourd'hui un enjeu technologique important. Le télescope spatial Herschel [Pilbratt *et al.*, 2010], avec un miroir primaire de 3.5 m de diamètre, est à ce jour le plus grand télescope spatial jamais envoyé dans l'espace.



Les données issues de l'observation astronomique peuvent être classées en plusieurs catégories. Les deux catégories principales sont les données de spectroscopie et les données d'imagerie et sont détaillées par la suite.

Spectroscopie

La spectroscopie, en observation astronomique, est l'étude des spectres électromagnétiques de divers objets dans l'univers. Le rayonnement de ces objets est classé selon sa longueur d'onde, allant des rayons gamma aux ondes radio. La mesure de ces spectres est l'un des principaux moyens d'étude de l'univers et des propriétés physiques des objets célestes. Le spectre d'une étoile peut ainsi renseigner ses propriétés chimiques, ainsi que sa température ou encore sa taille. De par l'expansion de l'univers et l'éloignement de presque toutes les galaxies, le spectre de ces objets lointains est décalé vers le rouge. La mesure de ce décalage permet d'en estimer grossièrement la distance. Par ailleurs, le spectre de la matière occupant l'espace entre les étoiles, appelée matière interstellaire, peut révéler des informations sur la densité des nuages interstellaires, leur vitesse de déplacement, leur température ou encore la nature de leurs constituants. La composition chimique des planètes, exoplanètes et autres petits objets célestes peut également être étudiée grâce à leur spectre.

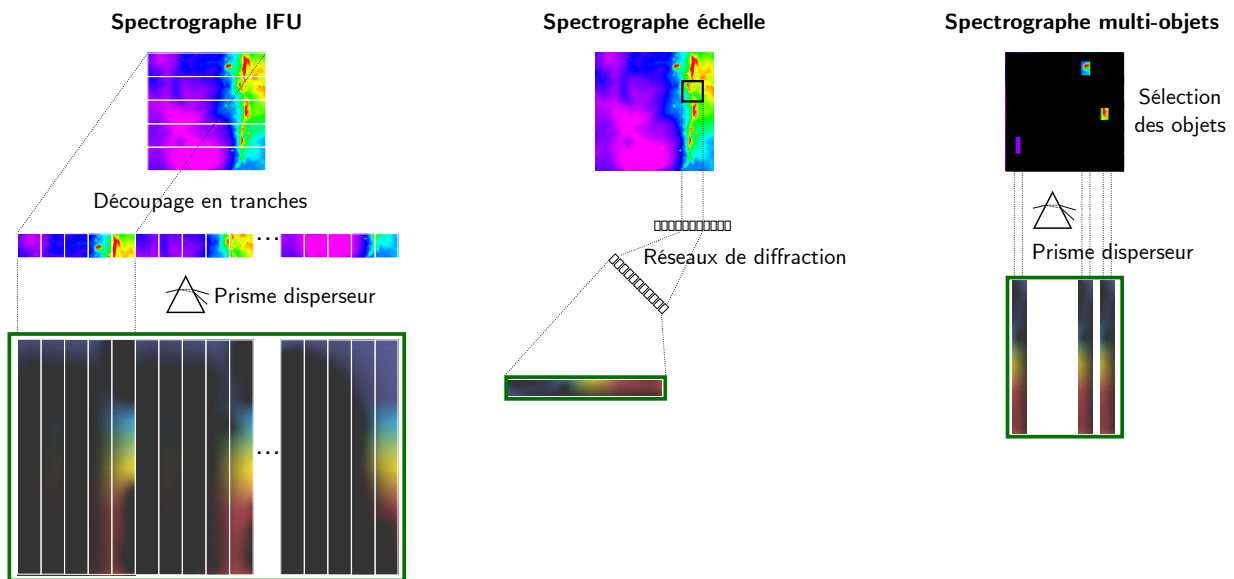
La mesure des spectres peut être effectuée, en observation astronomique, de différentes manières. Tout d'abord, les spectrographes les plus simples sont composés d'une fente étroite à travers laquelle la lumière provenant de l'objet visé passe. Cette lumière, traversant la fente, est ensuite dispersée par un prisme ou un réseau et projetée sur un détec-

FIGURE 1.1 – Transmission de l'atmosphère (en pourcentage) en fonction de la longueur d'onde. Source : ESO.

teur. Les spectrographes multi-objets permettent, à l'aide d'un panneau à fentes ou volets à l'entrée de l'instrument, de mesurer le spectre de différentes sources dans un champ de vue d'observation déterminé, avec une résolution spectrale moyenne à haute. Après sélection des sources, la lumière incidente est dispersée par un prisme ou un réseau et projetée sur un détecteur. Les spectrographes échelle, plus complexes, permettent d'observer le spectre d'une source ponctuelle en atteignant des résolutions spectrales très élevées. La lumière provenant de la source est diffractée à l'aide de 2 éléments dispersifs consécutifs. Finalement, les spectrographes à intégrale de champ (en anglais *integral field unit, IFU*), particulièrement utilisés pour observer des sources étendues, combinent spectroscopie et imagerie pour obtenir des spectres avec une information spatiale. La lumière provenant de la scène observée, généralement sur un petit champ de vue, est découpée en tranches à l'aide d'un miroir trancheur, appelé *mirror slicer*, puis ces tranches sont dispersées à l'aide d'un prisme qui produit une série de spectres sur le détecteur, correspondant à différentes positions spatiales. Les spectres ainsi capturés forment alors des données en 3 dimensions, autrement désignées par spectro-images ou encore images hyperspectrales. La résolution spatiale de ces images est habituellement très limitée par les contraintes instrumentales : le nombre et la largeur des tranches ainsi que la dimension du détecteur. Le principe général de ces types de spectrographes est illustré dans la figure 1.2. La capture des photons incidents sur le détecteur peut se faire grâce à un dispositif photosensible qui convertit ces photons en électrons. Les dispositifs photosensibles utilisés aujourd'hui sont des capteurs à transfert de charge (en anglais *charge coupled device, CCD*), qui sont des grilles de photomètres où un photomètre correspond à un pixel de l'image mesurée. La lumière provenant d'une source ponctuelle sera étalée sur plusieurs pixels par l'optique du télescope et de l'instrument selon une fonction d'étalement du point (en anglais *point spread function, PSF*) modélisant la réponse impulsionnelle de l'instrument.

Il existe un très grand nombre de spectrographes à bord de télescopes terrestres ou spatiaux, observant presque l'intégralité du rayonnement électromagnétique. Nous présenterons ici seulement quelques exemples de spectrographes, en nous focalisant principalement sur le rayonnement infrarouge proche ou moyen. Sur Terre, l'instrument MUSE [Bacon *et al.*, 2010] (*multi-unit spectroscopic explorer*) du VLT est un spectrographe à intégrale de champ à haute résolution spectrale, observant le rayonnement visible et infrarouge proche sur de petits champs de vue avec une résolution spectrale ($R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$) de $R \sim 3000$ à 750nm . Il produit des images hyperspectrales dont les objectifs scientifiques principaux sont l'étude de la formation et de l'évolution des galaxies et l'étude des populations stellaires. Il contient un module d'optique adaptative permettant de corriger en temps réel les déformations du signal dues aux turbulences atmosphériques, augmentant par conséquent la résolution spatiale de l'instrument. L'instrument VISIR [Lagage *et al.*, 2004] (*VLT imager and spectrometer for the infrared*, en français imageur et spectromètre des infrarouges du VLT) contient un spectrographe à fente unique utilisant un réseau de diffraction et observe les infrarouges moyens entre 8 et 24 microns à

très haute résolution spectrale ($R \sim 25000$ à 10 microns). Dans l'espace, où les déformations du signal par l'atmosphère sont absentes, l'instrument IRS [Houck *et al.*, 2004] (*infrared spectrograph*) embarqué sur le télescope spatial Spitzer a fourni jusqu'en 2009 des spectres de résolution spectrale moyenne ($R \sim 600$) entre 5 et 38 microns avec une sensibilité instrumentale bien meilleure qu'elle ne l'aurait été sur Terre. À bord du télescope spatial Hubble, l'instrument NICMOS (*Near Infrared Camera and Multi-Object Spectrometer*) comporte un spectrographe multi-objets observant le rayonnement infrarouge proche de 0.8 à 2.5 microns avec une résolution spectrale moyenne ($R \sim 200$ en moyenne).



Imagerie et imagerie multibande

L'imagerie, en observation astronomique, est la mesure du flux ou de l'intensité lumineuse provenant d'objets célestes sur une fenêtre de longueurs d'onde afin d'obtenir une carte de la répartition spatiale de ce flux ou de cette intensité lumineuse. Une image d'observation astronomique peut renseigner sur la distribution spatiale de la brillance des galaxies, la luminosité ou la distance des objets célestes. Certaines propriétés chimiques peuvent aussi être déduites lorsque la fenêtre de longueurs d'onde utilisée est étroite. Les variations de luminosité lors de l'acquisition de séries temporelles de divers objets comme les étoiles variables ou les planètes mineures du système solaire, peuvent aussi permettre de calculer leur période orbitale, de rotation ou encore de détecter des planètes extra-solaires (exoplanètes).

L'acquisition d'images en astronomie se fait par la collecte de photons lumineux passés à travers un filtre passe-bande, i.e. qui ne laisse passer que les photons dont la longueur d'onde est comprise dans une certaine fenêtre. Lorsque plusieurs filtres, correspondant à différentes fenêtres de longueur d'onde, sont utilisés pour produire plusieurs images, on parle d'imagerie multibande. La figure 1.3 illustre le principe de fonctionnement

FIGURE 1.2 – Illustration du principe de fonctionnement de 3 types de spectrographes utilisés en observation astronomique : les spectrographes à intégrale de champ (IFU), échelle et multi-objets.

d'un imageur. La capture des photons incidents sur le détecteur se fait, comme pour les spectrographes, grâce à un dispositif CCD qui convertit ces photons en électrons. La lumière provenant d'une source ponctuelle sera également étalée sur plusieurs pixels par l'optique du télescope et de l'instrument selon la PSF modélisant la réponse impulsionnelle de cet instrument.

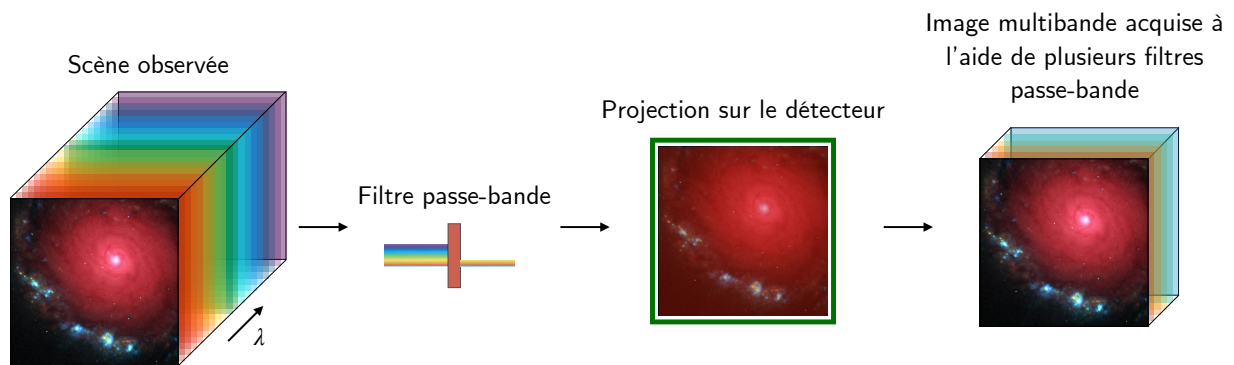


FIGURE 1.3 – Illustration du principe de fonctionnement d'un imageur en observation astronomique.

Pour les imageurs comme pour les spectromètres, le nombre d'instruments mis en service à bord de télescopes spatiaux ou terrestres est très grand. Nous en présenterons seulement quelques exemples, en nous concentrant sur le rayonnement infrarouge. L'instrument terrestre NaCo, diminutif de NAOS-CONICA [Lenzen *et al.*, 2003] (*Nasmyth adaptive optics system - near infrared imager and spectrometer*), du VLT, est un imageur des proches infrarouges, assisté par optique adaptative, observant le rayonnement de 1 à 5 microns à travers 35 filtres passe-bande à haute résolution spatiale (avec une taille de pixel allant de 0.01×0.01 à 0.1×0.1 arcsec). Cet instrument est impliqué dans l'acquisition de la première image directe d'une exoplanète [Chauvin *et al.*, 2004] et est utilisé pour l'observation du centre galactique de la Voie Lactée, des corps du système solaire et des étoiles jeunes. L'instrument WIRC*am* [Puget *et al.*, 2004] (*wide-field infrared camera*) de l'observatoire Canada-France-Hawaï appartenant aux observatoires de Mauna Kea est un imageur terrestre à très grand champ de vue et fournit des mosaïques d'images grâce à ses 4 détecteurs. Il observe les infrarouges proches, de 1 à 2.5 microns, à l'aide de 17 filtres à bandes étroite à large, pour une taille de pixel de 0.3 arcsec de côté. Cet instrument est principalement utilisé pour l'observation du milieu interstellaire de notre galaxie, notamment les régions de formation d'étoiles et l'étude des galaxies. Les imageurs embarqués sur des observatoires spatiaux montrent, pour l'observation du rayonnement infrarouge, des sensibilités très supérieures aux instruments terrestres. Parmi eux, l'instrument WFC3 (*wide field camera 3*) à bord du télescope spatial Hubble, observe, grâce à un canal dédié, les infrarouges proches de 0.8 à 1.7 microns sur un grand champ de vue (quelques minutes d'arc) à l'aide de 18 filtres passe-bande pour une taille de pixel de 0.13 arcsec de côté [Kimble *et al.*, 2008]. Cet instrument est très utilisé pour l'étude des galaxies et a produit le très célèbre champ ultra-profond d'Hubble

[Beckwith *et al.*, 2006] en contribuant également à la création de catalogues de données tel que le catalogue CANDELS [Grogin *et al.*, 2011]. Il est tout aussi bien utilisé pour étudier le milieu interstellaire, les nébuleuses proches et les objets du système solaire. L'instrument PACS [Poglitsch *et al.*, 2010] (*photodetector array camera and spectrometer*), embarqué sur le télescope spatial Herschel observe les infrarouges lointains, de 60 à 200 microns avec 3 filtres passe-bande, sur un champ de vue de quelques minutes d'arc pour une taille de pixel allant de 3 à 6 secondes d'arc de côté. Il observe principalement les régions de formation stellaire des nébuleuses proches et les galaxies.

1.2 MÉTHODES DE RESTAURATION ET D'ANALYSE DE DONNÉES ASTRONOMIQUES

Cette section présente les principales méthodes de restauration et d'analyse de données d'astronomie observationnelle utilisées dans la littérature sans viser l'exhaustivité. Nous tentons ici de donner un panorama en se focalisant notamment sur les travaux réalisés par les équipes françaises dans les 15 dernières années et uniquement pour des applications en astrophysique, i.e. sans prendre en compte les travaux dédiés aux applications en planétologie.

1.2.1 Restauration de données d'observation astronomique

L'acquisition de données de spectroscopie et/ou d'imagerie en observation astronomique induit des distorsions. La nature discrète de la lumière ainsi que la lecture des électrons sur la surface photosensible du détecteur entraîne la présence de bruit dans les données. De plus, l'optique du télescope cause un étalement de la lumière incidente sur le détecteur résultant en un flou spatial selon une PSF. Des erreurs de lecture peuvent également aboutir à des données manquantes. Les spécificités des techniques d'acquisition en observation astronomique ont amené le développement de méthodes de reconstruction spécifiques.

Un exemple de restauration de spectres peut être la méthode développée par Bourguignon, Mary et Slezak, 2011, qui restaurent les spectres acquis par l'instrument MUSE en inversant un modèle direct instrumental linéaire représentant le processus d'acquisition de ces spectres. Ce modèle inclut une réponse impulsionnelle spectrale, aussi appelée *line spread function* variant spectralement ainsi que la prise en compte d'un modèle de bruit dépendant de la longueur d'onde observée. Les spectres observés sont alors modélisés comme une décomposition parcimonieuse d'éléments d'un dictionnaire de composantes spectrales de basse fréquence construit à partir de la connaissance *a priori* des spectres observés. Au delà du débruitage des données et de la reconstruction spectrale, la méthode vise également à identifier des composantes spectrales physiquement interprétables.

Le débruitage d'images, en observation astronomique, consiste à estimer les effets aléatoires du processus d'acquisition : bruit de photon (contribution poissonnienne) et bruit de lecture (contribution additive

gaussienne) [Starck et Murtagh, 2006]. Les méthodes standards de débruitage d'images dans la littérature estiment plutôt uniquement un bruit gaussien additif [Olsen, 1993]. Dans le même esprit que Bourguignon, Mary et Slezak, 2011, les méthodes de débruitage spécifiques aux images astronomiques cherchent à représenter les détails de l'image dans une base particulière : une base d'ondelettes, de curvelets, ou un dictionnaire [Starck et Murtagh, 2006]. De nombreuses approches montrent notamment qu'une décomposition dans une base d'ondelettes de Haar est particulièrement adaptée au traitement d'images dont le bruit est poissonnien [Bijaoui et Jammal, 2001 ; Starck et Murtagh, 2006].

Le défloutage d'images d'observation astronomique, autrement appelé déconvolution, cherche à faire apparaître des structures cachées non résolues spatialement par le télescope, c'est-à-dire floutées par le processus d'acquisition. Cette déconvolution s'effectue généralement en inversant un modèle d'observation linéaire [Starck, Pantin et Murtagh, 2002]. L'acquisition des données d'imagerie sur de très grands champs de vue peut être effectuée à l'aide d'un balayage du ciel aboutissant à l'observation d'une mosaïque d'images observées. Ayasso, Rodet et Abergel, 2012 ; Orioux *et al.*, 2012 proposent des méthodes de reconstruction de mosaïques d'images appliquées à des données acquises par l'instrument SPIRE à bord de l'observatoire spatial Herschel. Ces deux méthodes reposent sur l'inversion d'un modèle instrumental reflétant le processus d'acquisition des données. Orioux *et al.*, 2012 complètent ce modèle d'un *a priori*, i.e. une régularisation, favorisant un contenu spatial lisse tandis que Ayasso, Rodet et Abergel, 2012 proposent de séparer les sources ponctuelles et étendues de l'image en attribuant une régularisation spécifique à chacune des composantes. La déconvolution spatiale de données multibandes ou hyperspectrales demande des méthodes dédiées puisque le flou spatial dû à l'optique du télescope et de l'instrument est spectralement variant suivant le critère de Rayleigh. Le flou est d'autant plus important que la longueur d'onde observée est grande [Rayleigh, 1880]. Soulez, Thiébaud et Denis, 2013 proposent une méthode de déconvolution spectralement variante par approximation des PSFs et résolution d'un problème inverse appliquée à des données hyperspectrales de l'instrument MUSE du VLT. Rodet *et al.*, 2009 reconstruisent des objets célestes d'images hyperspectrales acquises par le spectrographe du télescope spatial Spitzer. Ces objets sont modélisés par une décomposition en fonctions gaussiennes et leur résolution spatiale est améliorée d'un facteur 1.5 par l'inversion du modèle direct de l'instrument prenant en compte les flous spectralement variants. Villeneuve et Carfantan, 2014 combinent déconvolution spatio-spectrale et estimation de paramètres physiques de galaxies à partir d'images hyperspectrales acquises par l'instrument MUSE du VLT. Les auteurs proposent un modèle d'observation dépendant non linéairement de paramètres spectraux comme l'amplitude, la position et la largeur de raies d'émission, et dépendant linéairement d'un flou spatial invariant spatialement et spectralement et de flous spectraux spatialement et spectralement variants. L'inversion de ce modèle permet de déterminer le flux, la vitesse relative et la dispersion de vitesse des galaxies observées, intégrées le long de la ligne de visée.

Les télescopes d'interférométrie ne fournissent pas d'images directes et nécessitent donc des méthodes de reconstruction spécifiques. Ils collectent des mesures parcimonieuses dans le plan de Fourier de la distribution spatiale des fréquences d'objets célestes observés. La reconstruction de ces images doit donc couvrir la restauration des fréquences spatiales échantillonnées ainsi que les données de phase manquantes. Les approches de la littérature sont basées sur la résolution de problèmes inverses régularisés [Thiébaud et Giovannelli, 2010].

1.2.2 Détection et classification d'objets

L'acquisition massive de spectres et d'images de régions variées du ciel ont mené au développement de méthodes automatiques de détection et de classification d'objets remplaçant rapidement la classification subjective effectuée par l'humain.

Boudineau, 2019 proposent ainsi une méthode de détection d'exoplanètes par la méthode des vitesses radiales, i.e. par l'observation de décalages spectraux dans des séries temporelles du spectre de l'étoile autour de laquelle orbitent les planètes, basée sur la résolution d'un problème inverse non linéaire. À partir d'un signal dépendant de manière non linéaire au nombre d'exoplanètes en orbite et de leurs paramètres orbitaux, les auteurs présentent un algorithme d'échantillonnage stochastique permettant de détecter le nombre d'exoplanètes en orbite autour de l'étoile observée mais aussi leur période orbitale. Gulati *et al.*, 1994 proposent deux méthodes de classification automatique de spectres d'étoiles. La première s'effectue en minimisant un critère statistique comparant le spectre à classer avec des spectres d'une collection de spectres de référence. La seconde s'appuie sur une technique d'apprentissage statistique par réseaux de neurones. Le réseau développé est entraîné à classer correctement les spectres de la collection de spectres de référence, puis est utilisé pour classer des spectres d'étoiles. Plusieurs études décomposent des collections de spectres de galaxies dans une base d'un espace de faible dimension afin de classer ces spectres dans plusieurs catégories selon leur décomposition [Galaz et de Lapparent, 1998 ; Fraix-Burnet, Bouveyron et Moutaka, 2021]. Une telle décomposition permet également de filtrer le bruit présent dans les spectres étudiés.

Un des logiciels de détection et d'extraction de sources à partir d'images le plus utilisé à ce jour est SExtractor [Bertin et Arnouts, 1996]. Ce logiciel est capable de détecter et classer les sources de grandes images d'observation astronomique : sources ponctuelles (étoiles), quasi-ponctuelles (galaxies lointaines), sources étendues à la structure plus complexe (galaxies proches, nébuleuses, etc.). L'analyse d'une image est effectuée en plusieurs étapes : estimation du fond du ciel, seuillage, séparation des sources qui se recouvrent, filtrage, construction d'un catalogue d'objets à partir de cette image et séparation des galaxies et des étoiles. De nombreuses autres techniques de détection de sources ont été développées en astronomie observationnelle [Masias *et al.*, 2012]. La classification automatique d'images de galaxies selon leur morphologie (spirales, elliptiques, etc.) en utilisant des techniques d'apprentissage statistique est une section

à part entière de la littérature scientifique [Cheng *et al.*, 2020 ; Huertas-Company, 2021]. Les techniques supervisées les plus efficaces sont basées sur des réseaux de neurones entraînés à classier des galaxies appartenant à un jeu de données dit d'entraînement dont le type est déjà connu. Une fois cet entraînement effectué, le réseau est théoriquement capable de classier automatiquement correctement des images de galaxies selon leur morphologie. Lorsqu'il n'existe pas de jeu de données d'entraînement, les réseaux de neurones non supervisés tentent de représenter les images de galaxies dans un espace latent de faible dimension afin de les classier [Hocking *et al.*, 2017 ; Martin *et al.*, 2020]. Des algorithmes similaires ont également été développés pour la classification d'objets célestes divers à partir d'imagerie multibande [Zhang et Zhao, 2004].

1.2.3 Séparation de sources et de composantes

Le développement de l'imagerie hyperspectrale et multibande en astronomie observationnelle a permis l'apparition de nouveaux types de méthodes d'analyse de données astronomiques dont la séparation aveugle de sources (en anglais *blind source separation, BSS*). Ces techniques de BSS sont généralement basées sur une hypothèse de mélange linéaire. L'idée sous-jacente est que les spectres composant l'image hyperspectrale sont des combinaisons linéaires de spectres de référence, i.e. ils appartiennent à un sous-espace spectral de faible dimension. En observation astrophysique, les spectres de référence sont considérés comme étant des spectres émis par différentes sources. En exprimant les spectres de l'image observée comme une combinaison linéaire de spectres sources, on peut extraire, de manière complémentaire, la répartition et l'abondance spatiale de ces spectres source. Berné *et al.*, 2007 proposent une analyse statistique en composantes indépendantes et une décomposition par factorisation de matrices non-négatives afin de démélanger une image hyperspectrale du milieu interstellaire obtenue par l'instrument IRS à bord du télescope spatiale Spitzer. Les auteurs extraient alors plusieurs spectres sources et leur répartition spatiale qu'ils identifient comme étant les spectres d'émission de différents types de poussière dans le milieu interstellaire. Les travaux complémentaires de Berné *et al.*, 2008 extraient d'images du télescope spatial Hubble et du télescope Canada-France-Hawaï les cartes de distributions spatiales d'émissions particulières dans l'infrarouge et les attribuent, à l'aide de leurs travaux précédents, à un type d'interaction moléculaire spécifique se déroulant dans le milieu interstellaire. Plus récemment, Boulais *et al.*, 2021 proposent une amélioration des techniques de séparation aveugle de sources usuelles basée sur une factorisation en matrices non-négatives couplée à un algorithme parcimonieux. Les méthodes hybrides ainsi proposées tirent parti des avantages des deux types de techniques et les auteurs montrent qu'elles fournissent de meilleurs résultats que chacune des méthodes utilisées séparément. Une des méthodes proposées a été appliquée par Foschino, Berné et Joblin, 2019 pour caractériser les variations chimiques et spatiales des populations de grains de poussière du milieu interstellaire à partir d'images hyperspectrales acquises par l'instrument *short wavelength spectrograph* (SWS) de l'observatoire

spatial des infrarouges ISO. Meganem *et al.*, 2011 présentent une méthode d'extraction de spectres d'étoiles d'images spectrales acquises par l'instrument MUSE du VLT. Les auteurs proposent une technique de séparation de sources par factorisation en matrices non-négatives effectuée sur des sous-intervalles spectraux afin de prendre en compte un modèle de flou instrumental ayant une variabilité spectrale. Dans le but d'accroître la probabilité de convergence vers une solution satisfaisante, l'algorithme est initialisé par une méthode des moindres carrés non-négatifs fournissant une approximation de la solution au problème de démélange à partir d'une connaissance *a priori* des données.

Bobin *et al.*, 2007 ; Leach *et al.*, 2008 utilisent une technique d'analyse en composantes morphologiques afin de séparer les différentes contributions physiques des images obtenues par la mission Planck dans le domaine des micro-ondes [The Planck Collaboration, 2006] dont le fond diffus cosmologique, les émissions de la poussière de la galaxie, etc. L'objectif principal de cette méthode est d'exprimer chacune des composantes de manière parcimonieuse dans un dictionnaire approprié. Plus récemment, Carloni Gertosio et Bobin, 2020 proposent une méthode de déconvolution et de séparation de sources jointes et démontrent son application à des données d'interférométrie.

Dans le but de segmenter des régions physiquement et chimiquement similaires dans le nuage moléculaire géant Orion B, situé autour de la nébuleuse à la tête de cheval, à partir de données multibandes issues d'intégration de raies émissions moléculaires, Bron *et al.*, 2018 utilisent une méthode d'apprentissage basée sur une estimation de la fonction densité de probabilité des intensités de l'image. Les points d'observation sont alors associés au maximum local le plus proche de la fonction densité apprise. En exploitant des modèles de transferts radiatifs pour interpréter les résultats, les auteurs sont capables de séparer finement des régions de densité différentes ou encore les zones illuminées ou non par des rayons ultraviolets.

1.3 LE CONTEXTE JWST POUR L'OBSERVATION DE PDRs

1.3.1 *Le JWST et ses instruments*

Le télescope spatial James Webb (en anglais *James Webb space telescope*, *JWST*), développé par l'agence spatiale américaine (NASA), l'agence spatiale européenne et l'agence spatiale canadienne, est considéré comme le successeur du télescope spatial Hubble (en anglais *Hubble space telescope*, *HST*). La mission, dont le lancement est prévu pour la fin de l'année 2021, permettra d'effectuer des observations dans l'infrarouge entre 0.6 et 28 μm . La figure 1.4, à droite, présente une vue d'artiste du télescope spatial James Webb. Le JWST emportera le plus grand miroir primaire jamais envoyé dans l'espace (6,5m de diamètre contre 2.4m pour le HST, voir dans la figure 1.4, à gauche). Le diamètre du miroir est trop grand pour permettre au télescope d'entrer tel quel dans la coiffe de la fusée Ariane 5 qui le placera en orbite. Il est donc segmenté, et composé de 18 miroirs hexagonaux montés sur une structure pouvant se replier

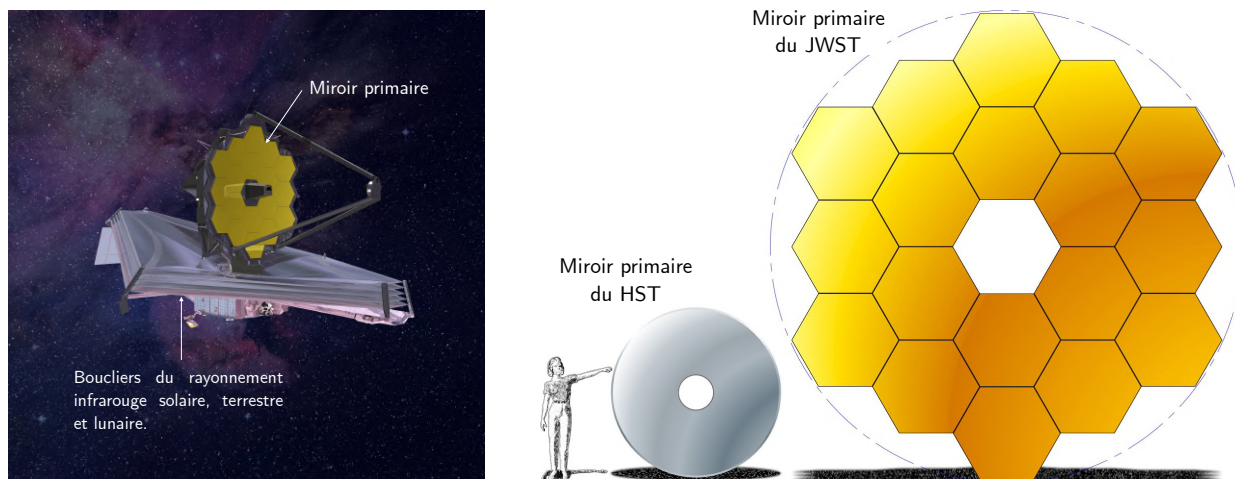


FIGURE 1.4 – **À gauche** : Vue d'artiste du télescope spatial James Webb. **À droite** : Comparaison illustrative des miroirs primaires du télescope spatial Hubble et du télescope spatial James Webb. Source : [NASA/JWST](#).

sur elle-même. Le JWST sera placé en orbite autour du Soleil au point de Lagrange L2, au-delà de l'orbite lunaire à environ 1.5 millions de kilomètres de la Terre. Le miroir et les instruments du JWST doivent être maintenus à basse température afin de détecter dans l'infrarouge même les sources les plus faibles et lointaines de l'univers. La conception du télescope prévoit alors un refroidissement passif à l'aide de boucliers plaçant le miroir et les instruments dans l'ombre du Soleil, de la Terre et de la Lune. Ces très grands panneaux, dont on a un aperçu dans la figure 1.4 se replient également sur eux-mêmes et seront déployés une fois en vol. Les 4 objectifs principaux du JWST sont l'étude de l'univers jeune, l'étude des galaxies et de leur évolution (i.e. comprendre l'organisation de la matière à grande échelle dans l'univers), l'étude du cycle des étoiles et l'étude des exoplanètes (e.g. l'étude de leur atmosphère et la recherche de conditions favorables à la vie). Le JWST est particulièrement adapté à ces thèmes de recherche puisque, d'abord, les premières galaxies et étoiles, du fait de l'expansion de l'univers ont des émissions qui sont décalées vers le rouge (e.g. le JWST pourra détecter des galaxies de l'univers jeune que le HST, observant principalement le rayonnement ultraviolet et visible, ne peut pas). Ensuite, le JWST sera capable de voir à travers les nuages de poussière, opaques à la lumière visible mais pas au rayonnement infrarouge, où les étoiles et systèmes planétaires naissent et évoluent.

Le JWST est doté de 4 instruments scientifiques. Trois de ces instruments sont dédiés à l'observation des infrarouges proches tandis que le dernier instrument observera les infrarouges moyens.

Near-infrared spectrograph. L'instrument NIRSpec est un spectrographe captant le rayonnement entre 0.6 et 5.3 microns à travers 4 modes d'observation. Le spectrographe multi-objets (MOS) observera simultanément les spectres de plusieurs sources de la manière décrite dans la section 1.1 sur un champ de vue de $3.6' \times 3.4'$. Le spectrographe à fente (FS) pourra fournir des spectres de très grande sensibilité pour des sources uniques. Un mode d'acquisition est dédié à l'observation spectrale temporelle d'objets brillants (BOTS) sur de petits champs de vue ($1.6'' \times 1.6''$).

Enfin, le spectrographe à intégrale de champ (IFU) fournira des images hyperspectrales sur de petits champs de vue ($3'' \times 3''$) à haute, moyenne ou faible résolution spectrale et à faible résolution spatiale pour une taille de pixel de $0.1'' \times 0.1''$. Ce mode d'observation est dédié à l'étude d'objets spécifiques ou à l'échantillonnage de petites régions d'objets étendus.

Near-infrared camera. L'instrument NIRCam est un imageur des infrarouges proches observant le rayonnement entre 0.6 et 5.0 microns à travers 5 modes d'observation. L'imagerie coronographique permet d'observer la couronne des étoiles en masquant leur partie centrale. L'instrument NIRCam permet également d'effectuer de la spectroscopie de résolution spectrale moyenne sur de très larges champs de vue (jusqu'à $9' \times 9'$) sur des fenêtres spectrales limitées. Le mode d'observation imageur permet d'acquérir des images multibandes à l'aide de 29 filtres passe-bande répartis en 2 canaux, de 0.6 à 2.3 microns et de 2.4 à 5 microns sur un grand champ de vue séparé en 2 modules de taille $2.2' \times 2.2'$. Le canal des longueurs d'onde courtes (resp. longues) permet d'obtenir des images dont la taille d'un pixel est de $0.031''$ (resp. $0.063''$). Les deux derniers modes d'acquisition de NIRCam permettent d'effectuer des séries temporelles d'images et de spectres.

Near infrared imager and slitless spectrograph. L'instrument NIRISS est un imageur et spectrographe du JWST fournissant 4 modes d'observation pour observer le rayonnement entre 0.6 et 5 microns sur un champ de vue de $2.2' \times 2.2'$. Le premier mode d'observation permet d'effectuer de la spectro-imagerie à basse résolution spectrale sur un grand champ de vue entre 0.8 et 2.2 microns. Le second mode d'observation est optimisé pour la spectroscopie temporelle de sources brillantes entre 0.6 et 2.8 microns. Le troisième mode permet d'obtenir des images d'interférométrie à haute résolution spatiale entre 2.8 et 4.8 microns et le dernier mode permet d'obtenir des images multibandes entre 0.8 et 5 microns à l'aide de 12 filtres passe-bande et peut être utilisé en parallèle du mode imageur de l'instrument NIRCam.

Mid infrared instrument. L'instrument MIRI observe le rayonnement infrarouge moyen entre 5 et 28 microns et comporte 4 modes d'observation. L'imageur fournit des images multibandes à l'aide de 9 filtres large bande entre 5.6 et 25.5 microns sur un champ de vue de taille $74'' \times 113''$ et pour une taille de pixel de $0.11''$. Le spectrographe basse résolution fournit des images spectrales de basse résolution spectrale entre 5 et 12 microns sur de petits champs de vue ($0.51'' \times 4.7''$) pour une taille de pixel de $0.11''$. Le spectrographe de moyenne résolution (MRS) fournit des images spectrales de résolution spectrale moyenne sur un champ de vue de taille $3.9'' \times 3.9''$ à $7.7'' \times 7.7''$ et pour une taille de pixel comprise entre 0.2 et 0.3 secondes d'arc. Ce spectrographe observe le rayonnement entre 4.9 et 28.3 microns à l'aide de 4 canaux d'observation. Le dernier mode d'acquisition permet d'obtenir des images coronographiques dans 4 bandes spectrales entre 10 et 23 microns. Tous ces modes d'acquisition montrent une sensibilité réduite au delà de 15 microns due aux émissions

thermiques du télescope. Le champ de vue de quelques modes d'observation des instruments du JWST, choisis par cohérence de ces travaux de thèse, est comparé illustrativement dans la figure 1.5.

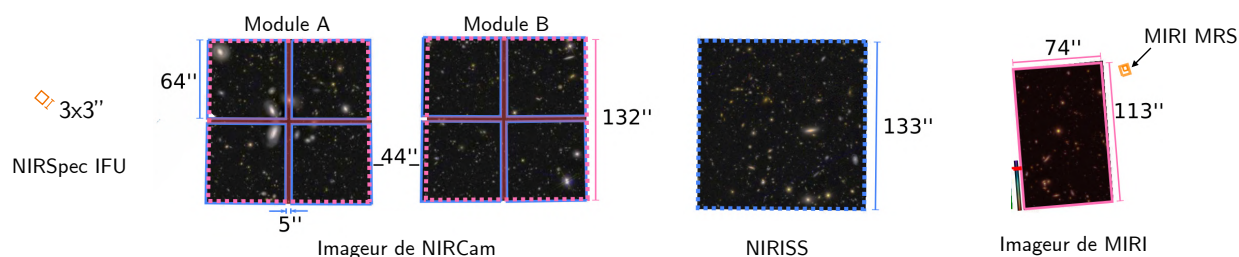


FIGURE 1.5 – Comparaison illustrative des champs de vue de quelques modes d'observation des instruments du JWST : l'IFU de NIRSpec, l'imageur de NIRCam, les modes d'observation de NIRISS et l'imageur et le MRS de MIRI. Source : [NASA/JWST](https://www.nasa.gov/jwst).

1.3.2 Observation prioritaire de régions de photo-dissociation

Les premières observations du JWST seront exploitables dans le courant de l'année 2022 via 13 programmes d'observation prioritaires, appelés en anglais *early release science* (ERS). Un de ces programmes ERS, intitulé "PDRs4all : Radiative Feedback of Massive Stars" (ID1288) sera dédié à l'observation de régions de formation stellaire et plus particulièrement aux régions de photodissociation (en anglais *photodissociation region*, *PDR*) [Berné *et al.*, s.d.]. Ces régions se situent à proximité d'étoiles massives qui chauffent leur environnement, ionisent des atomes et molécules et dissocient des molécules par leur rayonnement ultraviolet lointain. Ces interactions se déroulent majoritairement dans les PDRs, zones de transition entre régions ionisées (plus proches des étoiles massives) et nuages moléculaires. Leurs émissions dominent le spectre infrarouge dans les régions de formation stellaire. Le concept de PDR est cependant applicable à beaucoup de régions de l'univers. L'étude de ces régions et plus précisément des processus physiques et chimiques s'y déroulant est alors essentiel pour comprendre les mécanismes qui ont lieu dans les nuages diffus, les disques protoplanétaires, les nuages moléculaires, les nébuleuses planétaires ou encore les galaxies à sursaut de formation d'étoiles. Une compréhension approfondie de ces régions et de ses structures à petite échelle nécessite de les observer avec une haute résolution spatiale et spectrale.

Le programme PDRs4all prévoit d'observer une région de photodissociation située dans la Barre d'Orion, au sud-ouest des étoiles du Trapeze. La région de la Barre d'Orion qui sera observée par le programme PDRs4all est présentée dans la figure 1.6, en haut, par une composition colorée vue par le télescope spatial Hubble à des longueurs d'onde visibles. Des spectro-images de résolution spatiale modérée seront obtenues avec les IFUs des instruments NIRSpec et MIRI afin d'extraire les signatures spectrales de la PDR dans l'infrarouge proche et moyen. Ainsi, une mosaïque de 9 images spectrales couvrant les longueurs d'onde de 1 à 5.3 microns sera obtenue par l'IFU de NIRSpec, sur un champ de vue $27'' \times 3''$. La résolution spectrale ($R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$) de ces données sera d'environ $R = 2700$. L'IFU du MRS de MIRI acquerra une mosaïque de 7×2 spectro-images sur un champ de vue similaire, pour des longueurs d'onde

allant de 5 à 28.5 microns. La résolution spectrale des images sera d'environ $R = 3000$. La figure 1.6 présente le champ de vue d'observation des IFUs des instruments MIRI et NIRSpec. L'observation des données spectrales sera faite perpendiculairement à la PDR, pour capturer toutes les signatures spectrales de la transition de la région ionisée au nuage moléculaire.

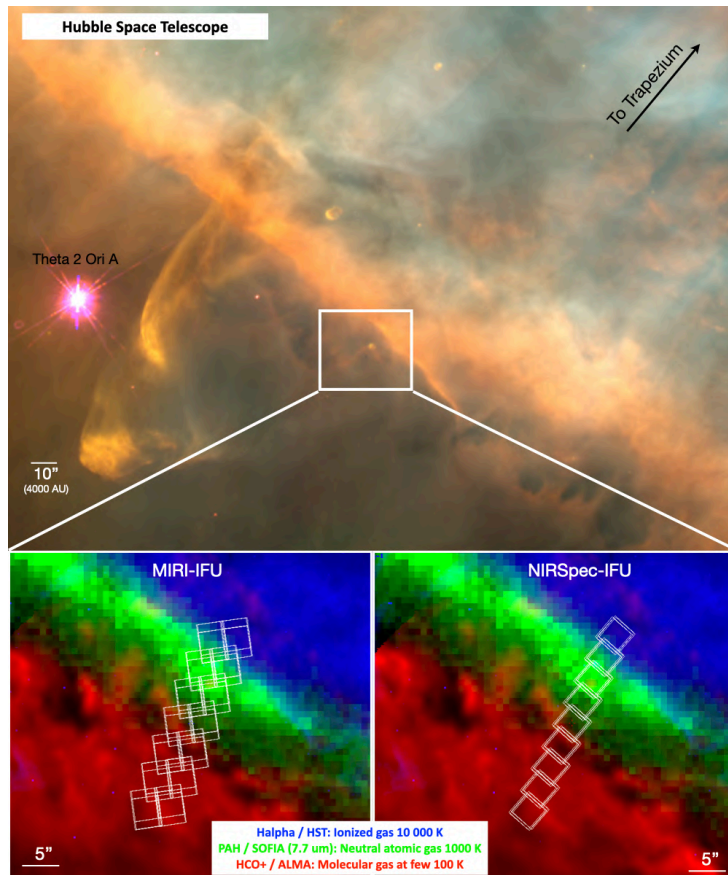


FIGURE 1.6 – **En haut** : Image de la Barre d'Orion vue par le télescope spatial Hubble à des longueurs d'onde visibles. **En bas** : Superposition des champs de vue d'observation de l'IFU de MIRI (à gauche) et de NIRSpec (à droite) prévus par le programme PDRs4All et d'une vue de la Barre d'Orion composée d'une image de raie d'émission à 1.2 microns (en bleu, HST [Bally, 2015]), d'une image d'émission de PAH (en vert, SOFIA [Salgado *et al.*, 2016]) et d'une image de raie d'émission $\text{HCO}^+(4-3)$ à 356.7GHz (en rouge, ALMA [Goicoechea *et al.*, 2016]). Image tirée de [Berné *et al.*, s.d.].

En complément, des images multibandes à haute résolution spatiale et à grand champ de vue seront acquises par les imageurs des instruments MIRI et NIRCам. 18 filtres de bande étroite à large de NIRCам seront utilisés pour capturer la structure de la PDR entre 1 et 5 microns sur un champ de vue de 9.7×9.7 minutes d'arc. La taille d'un pixel de ces images multibandes sera compris entre 0.03 et 0.06 secondes d'arc. L'imageur de MIRI observera cette région à travers une mosaïque de 3×3 acquisitions utilisant 4 filtres à large bande entre 7.7 et 25.5 microns. Le champ de vue des observations sera de $40'' \times 40''$ pour une taille de pixel de 0.1''. La figure 1.7 présente le champ de vue d'observation des imageurs des instruments NIRCам et MIRI superposée à une image de la Barre d'Orion vue par le télescope spatial Hubble (raie d'émission à 1.2 microns). Un dépointage du télescope est prévu pour couvrir un champ de vue plus grand. La table 1.1 résume les propriétés des observations de la PDR de la Barre d'Orion par le programme d'observation prioritaire PDRs4all.

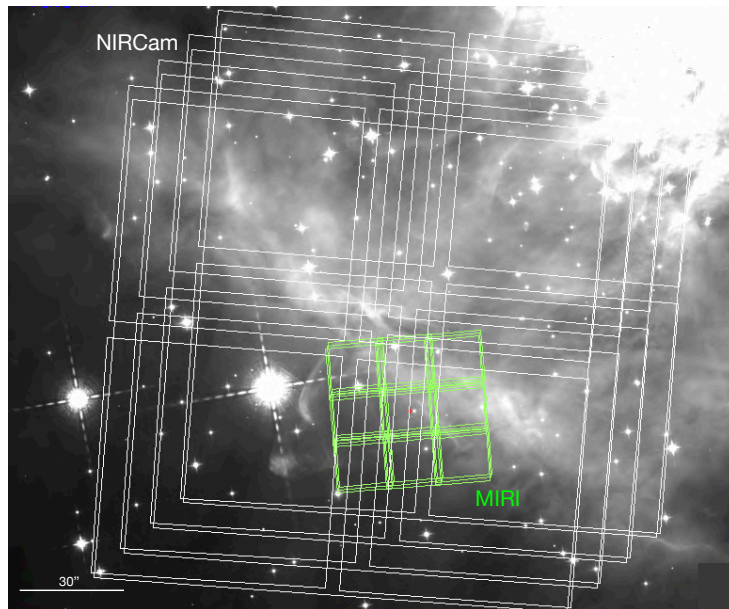


FIGURE 1.7 – Superposition des champs de vue d'observation de l'imageur de NIRCcam (en blanc) et de MIRI (en vert) prévus par le programme PDRs4All et d'une image de la Barre d'Orion vue par le télescope Hubble à 1.3 microns. Un dépointage du télescope est prévu pour couvrir un champ de vue plus grand. Image tirée de [Berné *et al.*, s.d.].

| | NIRCcam Imageur | NIRSpec IFU | MIRI Imageur | MIRI MRS |
|--|-----------------|-------------|--------------|-----------|
| Couverture spectrale (microns) | 1 à 5 | | 7.7 à 25.5 | 5 à 28.5 |
| Champ de vue (arcsec ²) | 132 × 300 | 3 × 3 | 40 × 40 | 4 × 4 |
| Taille de pixel (arcsec) | 0.031 à 0.063 | 0.1 | 0.11 | 0.2 à 0.3 |
| Résolution spectrale ($R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$) | ~10-100 | ~2700 | ~16 | ~3000 |

TABLE 1.1 – Propriétés des observations de la PDR de la Barre d'Orion par le programme d'observation prioritaire PDRs4all : couverture spectrale, champ de vue, taille de pixel et résolution spectrale.

1.4 LES ENJEUX DE LA SPECTRO-IMAGERIE EN OBSERVATION ASTROPHYSIQUE AVEC LE JWST

Observer l'Univers à hautes résolutions spatiale et spectrale est un enjeu crucial pour comprendre de nombreux mécanismes clés se déroulant dans ces régions. Améliorer la résolution spatiale des champs profonds du ciel (e.g. obtenus par MUSE) peut permettre de résoudre les galaxies petites et lointaines et ainsi en mesurer la structure interne. Mesurer la cinématique du gaz à l'intérieur d'une galaxie et les abondances d'éléments chimiques qui permettent le calcul de gradient de métallicité et de détecter la présence de gaz en rotation sont des éléments déterminants pour comprendre la formation et l'évolution de la chimie des galaxies [Sokoloff, 2011]. Une cartographie à haute résolution spatiale et spectrale des régions de formation stellaire est essentielle pour caractériser précisément les propriétés physico-chimiques des régions de formation stellaire. En utilisant des cartes spatio-spectrales de raies de refroidissement d'ions, atomes ou molécules (e.g. C^+ , O, H_2 , CO ou HCO^+), on peut extraire des cartes de température, de densité électronique ou de gradient de pression des nuages dans lesquels les étoiles se forment. Le processus de formation du H_2 peut être décrit à l'aide de raies d'émission spatialement résolues rovibrationnelles et rotationnelles du H_2 [Bron, Le Bourlot et Le Petit, 2014]. Certains grains de poussière du milieu interstellaire appelés hydrocarbures aromatiques polycycliques (en anglais *polycyclic aromatic hydrocarbons*, PAH) constituent une part importante de la matière interstellaire et prennent part à de nombreux processus astrophysiques [Tielens et Hollenbach, 1985]. Il est donc capital d'être capable de résoudre leurs émissions spatialement et spectralement. Le JWST est un observatoire idéal pour l'observation de ces grains de poussière émettant principalement dans l'infrarouge. Plus généralement, la séparation aveugle de sources effectuée sur des spectro-images à haute résolution spatiale et spectrale permettrait de fournir des composantes spectrales à haute résolution et leur cartes de distribution spatiale également à haute résolution.

Cependant, comme suggéré dans les sections 1.1 et 1.3.1, les contraintes instrumentales ne permettent généralement pas une acquisition directe de données de spectro-imagerie combinant simultanément les plus hautes résolutions spatiale et spectrale du JWST. Certains instruments fournissent des images multibandes à haute résolution spatiale et basse résolution spectrale. De manière complémentaire, d'autres instruments fournissent des images spectroscopiques à haute résolution spatiale et basse résolution spectrale. La fusion de données d'imagerie et de spectro-imagerie permet de combiner ces observations complémentaires, et ainsi leurs avantages respectifs, pour reconstruire une image spectrale à haute résolution spatiale et spectrale. Dans le cadre du programme d'observation prioritaire PDRs4all avec le JWST, fusionner les données de l'imageur de NIRCcam et de l'IFU de NIRSpec et les données de l'imageur et du MRS de MIRI permettrait d'obtenir une cartographie à haute résolution spatiale et spectrale de la PDR de la Barre d'Orion observée.

Les travaux de thèse décrits dans ce manuscrit s'intéressent à la fusion rapide de données pour l'astronomie infrarouge. Le chapitre 2 fait

un état des méthodes de fusion d'images déjà existantes dans la littérature, majoritairement utilisées pour fusionner des images d'observation de la Terre, et de leur limites dans le cas d'observations astronomiques. Les contributions de la thèse se concentrent plus particulièrement sur la fusion de données obtenues par l'imageur de NIRC*am* et l'IFU de NIRSpec du JWST. Plus précisément, le chapitre 3 décrit l'établissement d'un protocole de simulation de données d'observation de l'imageur de NIRC*am* et de l'IFU de NIRSpec tandis que le chapitre 4 détaille la méthode de fusion rapide d'images pour le JWST et ses performances dans le cadre des observations simulées.

Fusion d'images : un état de l'art

2

Contenu du chapitre

2.1 EXPLOITER LES CARACTÉRISTIQUES DES CAPTEURS ET DES IMAGES

L'idée de combiner les techniques d'imagerie et de spectroscopie est devenue très populaire durant les deux dernières décennies, aboutissant à un nouveau paradigme de détection appelé imagerie hyperspectrale ou imagerie spectrale. Les images hyperspectrales peuvent être décrites comme un cube de données en trois dimensions qui fournit une description complète de la scène observée ou l'échantillonne spatialement et spectralement. Ce type d'image est ainsi très adapté à de nombreuses analyses physiques ou chimiques dans divers domaines d'application, incluant l'observation de la Terre [C.-I Chang, 2003, 2007], la planétologie [Douté *et al.*, 2007], la science des matériaux [Colliex *et al.*, 1994 ; Dobigeon et Brun, 2012 ; Monier *et al.*, 2018], la dermatologie [De Beule *et al.*, 2007] et le contrôle qualité alimentaire [Gowen *et al.*, 2007].

Comme détaillé dans le chapitre précédent, observer l'univers à hautes résolutions spatiale et spectrale est aussi d'un intérêt particulier pour étudier des mécanismes clés en astrophysique et en cosmologie. Il s'agit, entre autres, d'observer de manière combinée les signatures spectrales et la morphologie des disques protoplanétaires, du milieu interstellaire ou des galaxies dans l'univers proche ou lointain. Pour cela, de nombreux instruments ont, dans les deux décennies précédentes, utilisé des modes d'observation pour acquérir des jeux de données hyperspectrales. C'est le cas par exemple du télescope spatial Spitzer de la NASA [Gehrz *et al.*, 2007], de l'observatoire spatial Herschel de l'ESA [Pilbratt *et al.*, 2010] ainsi que du futur télescope spatial James Webb.

Cependant, les contraintes instrumentales ne permettent généralement pas une acquisition directe de cubes de données combinant simultanément des hautes résolutions spatiale et spectrale. Quand c'est le cas, c'est au prix d'un temps d'intégration bien plus long. Une alternative courante pour les astronomes consiste à acquérir deux images complémentaires de la même scène, à savoir une image hyperspectrale avec une haute résolution spectrale et une image multispectrale avec une haute résolution spatiale. La fusion de données hyperspectrale et multispectrale a pour objectif de combiner ces observations complémentaires pour reconstruire un cube de données à hautes résolutions spatiale et spectrale. La figure 2.1 illustre le processus de fusion d'images hyperspectrales et multispectrales. D'un point de vue astronomique, le produit fusionné résultant, incluant les avantages de chacune des images observées, devrait fournir un aperçu intéressant de la scène d'intérêt.

| | |
|---|----|
| 2.1 Exploiter les caractéristiques des capteurs et des images | 37 |
| 2.2 Hypothèses de travail, notations, modèles | 38 |
| 2.3 Classes d'algorithmes | 41 |
| Méthodes heuristiques | |
| Factorisation de matrices | |
| Résolution de problèmes inverses | |
| Régularisations associées à la résolution de problèmes inverses | |
| Méthodes par apprentissage automatique | |
| 2.4 Validation des méthodes : le protocole de Wald | 56 |
| 2.5 Limites des méthodes dans le cas d'observations astronomiques | 59 |

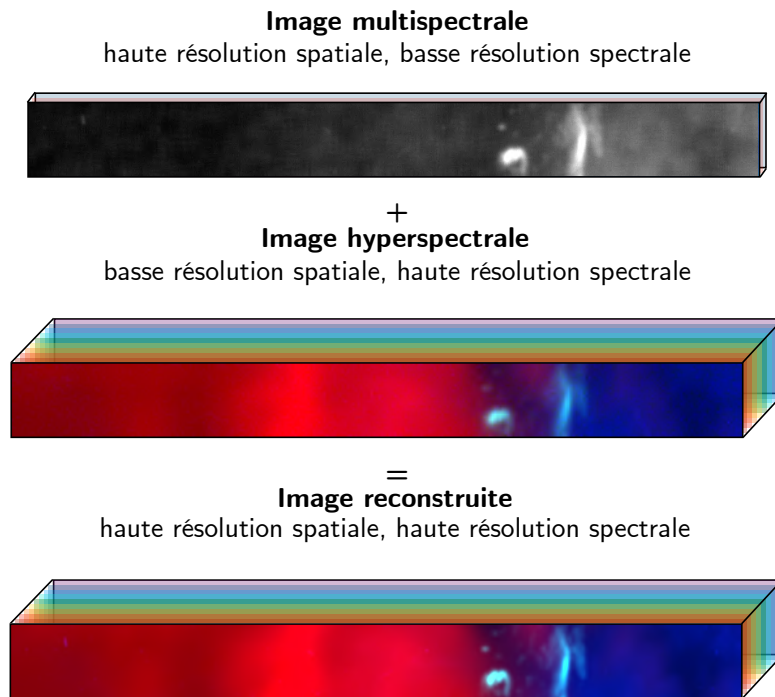


FIGURE 2.1 – Illustration du principe de la fusion d'images hyperspectrales et multispectrales.

2.2 HYPOTHÈSES DE TRAVAIL, NOTATIONS, MODÈLES

Les images observées multispectrales et hyperspectrales à combiner, étudiées dans la littérature et dans ces travaux, obéissent à certaines hypothèses de travail. On suppose d'abord que les images d'un même jeu de données sont recalées et alignées spatialement, c'est-à-dire qu'elles représentent la scène observée sur un champ de vue strictement commun et que leurs pixels sont orientés selon des angles égaux dans un même référentiel. Dans le cas de données d'observation provenant de divers instruments dont le champ de vue ou l'orientation des pixels sont différents, on suppose qu'une étape de recalage et de réalignement des images, similaire au processus décrit dans la figure 2.2, a déjà été effectuée. On considérera également par la suite que le rapport de la taille des pixels des images hyperspectrale et multispectrale (i.e. le rapport sous-échantillonnage) est entier. Dans le cas de données provenant d'instruments dont le rapport d'échantillonnage est différent, on suppose alors que l'image hyperspectrale, ne contenant pas les détails spatiaux du produit fusionné à reconstruire, est interpolée ou super- ou sous-résolue de telle sorte que le rapport d'échantillonnage entre les deux images à fusionner soit entier.

Les images multispectrales, hyperspectrales et à haute résolution conjointe impliquées dans le processus de fusion sont naturellement perçues comme des objets en 3 dimensions, appelés cubes de données, dont les 2 premières dimensions sont spatiales et la troisième est spectrale. Par simplicité, il sera fait référence par la suite à ces cubes de données comme des matrices en 2 dimensions dont les colonnes contiennent les spectres associés à chaque localisation spatiale. Le processus de dépliage des cubes de données est illustré dans la figure 2.3. On note alors $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{l_h \times p_m}$ l'image

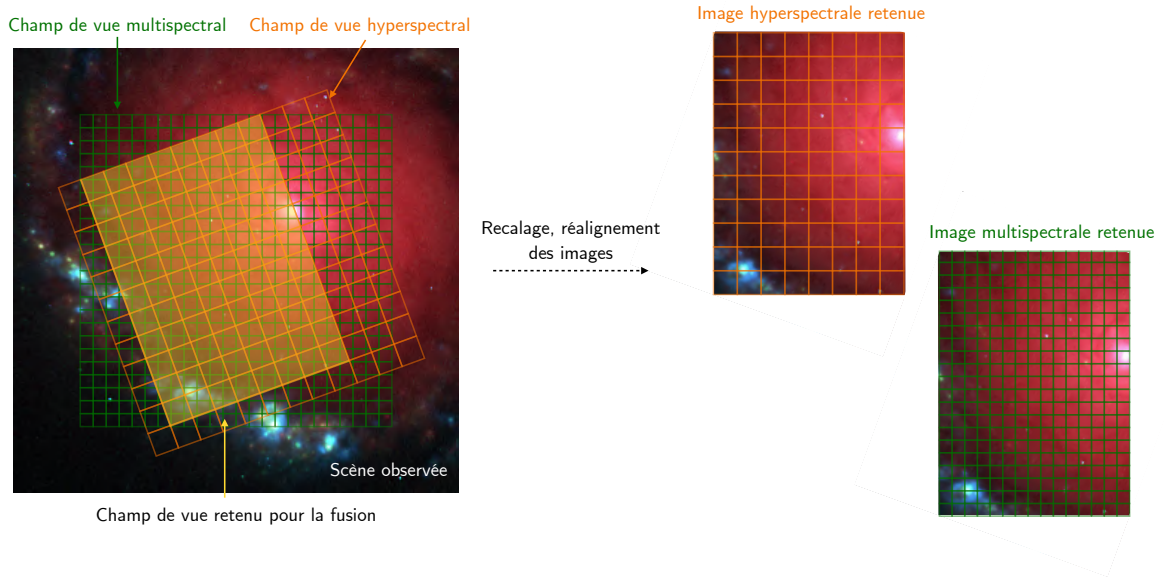


FIGURE 2.2 – Illustration d'un exemple de recalage et réalignement d'images en amont de la fusion.

haute résolution spatiale et spectrale qu'on cherche à reconstruire lors du processus de fusion où l_h désigne le nombre de bandes spectrales de cette image et p_m désigne son nombre de pixels. L'image multispectrale, ou plus généralement l'image observée à haute résolution spatiale, est représentée par la matrice $\mathbf{Y}_m \in \mathbb{R}^{l_m \times p_m}$ où l_m désigne le nombre de bandes spectrales de cette image et pour laquelle sa dimension spatiale p_m est égale à la dimension spatiale de l'image haute résolution spatiale et spectrale. On notera que lorsque $l_m = 1$, \mathbf{Y}_m est une image en niveaux de gris, par exemple une image panchromatique en observation de la Terre. L'image hyperspectrale, ou plus généralement l'image observée à haute résolution spectrale et faible résolution spatiale, est représentée par la matrice $\mathbf{Y}_h \in \mathbb{R}^{l_h \times p_h}$ pour laquelle sa dimension spectrale l_h est égale à celle de la matrice \mathbf{X} . Le nombre de pixels de l'image hyperspectrale est noté p_h . On note également $\mathbf{Y}_{h,int} \in \mathbb{R}^{l_h \times p_m}$, la version interpolée de \mathbf{Y}_h à la résolution spatiale de l'image multispectrale.

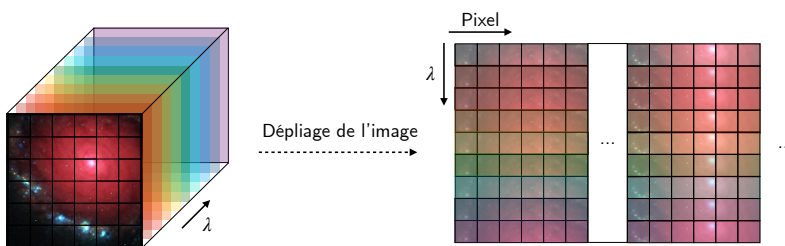


FIGURE 2.3 – Exemple de dépliage d'une image spectrale.

La plupart des méthodes décrites ci-après considèrent que la scène à haute résolution spatiale et spectrale suit un modèle de mélange linéaire spectral et vit donc dans un sous-espace spectral de faible dimension [Yokoya, Yairi et Iwasaki, 2012 ; Wei, Dobigeon et Tournet, 2015b ;

Simoes *et al.*, 2015]. L'idée sous-jacente est que les spectres composant la scène sont des combinaisons linéaires de spectres de référence. En observation de la Terre, les pixels d'une image hyperspectrale représentent une surface contenant différents composants de référence (e.g. de l'eau, de la terre, des arbres, etc) et les spectres mesurés pour ces pixels sont présumés être des combinaisons linéaires des spectres des différents composants individuels. En observation astrophysique, les spectres d'une image hyperspectrale sont considérés comme étant une combinaison linéaire de spectres émis par différentes sources (e.g. le refroidissement d'un ion H^+ ou d'un atome d'oxygène, etc.). Cependant, certains paramètres, comme l'absorption de l'atmosphère et les effets de diffraction en observation de la Terre aérienne et spatiale, l'absorption par la poussière en observation astrophysique spatiale ou encore le décalage spectral des objets en mouvement par effet Doppler, affectent le modèle linéaire d'un facteur non-linéaire. On considérera par la suite que ce facteur non linéaire peut être négligé. La quantité l_{sub} désigne la dimension du sous-espace spectral dans lequel vivent les données.

Les méthodes de fusion proposées dans la littérature jusqu'alors décrivent, pour la plupart, des modèles d'observation associées aux données multispectrales et hyperspectrales [Yokoya, Yairi et Iwasaki, 2012; Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b; Simoes *et al.*, 2015]. Ces modèles décrivent mathématiquement et simplement le processus physique d'acquisition des données. Ils peuvent être écrits comme

$$\mathbf{Y}_m = \mathbf{M}\mathbf{X} + \mathbf{N}_m \quad (2.1)$$

$$\mathbf{Y}_h = \mathbf{X}\mathbf{H} + \mathbf{N}_h \quad (2.2)$$

où $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{(l_m \times l_h)}$ est un opérateur de dégradation spectrale représentant le filtrage spectral de la lumière provenant de la scène observée \mathbf{X} . Le filtrage est modélisé ici comme une multiplication avec les fonctions de transmission des filtres de l'instrument d'observation multispectral. Les lignes de la matrice \mathbf{M} sont donc définies par ces fonctions de transmission. $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{(p_h \times p_m)}$ est un opérateur de dégradation spatiale représentant la distorsion de la lumière incidente due à l'optique du capteur et le sous-échantillonnage du détecteur de l'instrument d'observation hyperspectral. Modéliser cette dégradation spatiale par une multiplication matricielle à droite de \mathbf{X} suppose implicitement que cette dégradation est la même pour toutes les bandes spectrales, c'est-à-dire invariante spectralement. Notons que cette hypothèse forte sera levée dans le cadre de la fusion de données astrophysiques considérées dans cette thèse. Par ailleurs, cette dégradation modélisée par \mathbf{H} est généralement supposée être la succession de deux dégradations : une convolution spatiale en 2 dimensions spatialement et spectralement invariante puis un sous-échantillonnage de facteur entier $d = \frac{p_m}{p_h}$. \mathbf{N}_m et \mathbf{N}_h sont des bruits indépendants associés à chacune des images observées supposés Gaussiens centrés et de matrices de covariance spectrales (i.e. le bruit Gaussien centré est décorréolé spatialement) $\mathbf{\Lambda}_m$ et $\mathbf{\Lambda}_h$, respectivement. On notera également que \mathbf{N}_m et \mathbf{N}_h sont indépendants de la scène d'observation \mathbf{X} .

| Notation | Domaine | Description |
|---|---|---|
| <i>Dimensions des images d'étude</i> | | |
| p_m | \mathbb{N} | Dimension spatiale (i.e. nombre de pixels) de l'image multispectrale et de la scène observée. |
| p_h | \mathbb{N} | Dimension spatiale de l'image hyperspectrale. |
| l_m | \mathbb{N} | Dimension spectrale (i.e. nombre de bandes spectrales) de l'image multispectrale. |
| l_h | \mathbb{N} | Dimension spectrale de l'image hyperspectrale et de la scène observée. |
| l_{sub} | \mathbb{N} | Dimension du sous-espace spectral. |
| <i>Images</i> | | |
| \mathbf{Y}_m | $\mathbb{R}^{l_m \times p_m}$ | Image multispectrale observée. |
| \mathbf{Y}_h | $\mathbb{R}^{l_h \times p_h}$ | Image hyperspectrale observée. |
| $\mathbf{Y}_{h,int}$ | $\mathbb{R}^{l_h \times p_h}$ | Image hyperspectrale observée interpolée à la résolution spatiale de l'image multispectrale. |
| \mathbf{X} | $\mathbb{R}^{l_h \times p_m}$ | Image haute résolution spatiale et spectrale. |
| $\hat{\mathbf{X}}$ | $\mathbb{R}^{l_h \times p_m}$ | Produit de la fusion, estimation de \mathbf{X} . |
| \mathbf{V} | $\mathbb{R}^{l_h \times l_{sub}}$ | Base du sous-espace spectral dans lequel vit le produit fusionné. |
| $\hat{\mathbf{Z}}$ | $\mathbb{R}^{l_{sub} \times p_m}$ | Projection du produit fusionné $\hat{\mathbf{X}}$ sur le sous-espace spectral engendré par \mathbf{V} . |
| <i>Opérateurs de dégradation liés aux modèles instrumentaux</i> | | |
| \mathbf{H} | $\mathbb{R}^{(l_h \times p_h) \times (l_h \times p_m)}$ | Opérateur de dégradation spatiale. |
| \mathbf{M} | $\mathbb{R}^{(l_m \times p_m) \times (l_h \times p_m)}$ | Opérateur de dégradation spectrale. |
| d | \mathbb{N} | Facteur de sous-échantillonnage, $d = p_m/p_h$. |
| \mathbf{N}_m | $\mathbb{R}^{l_m \times p_m}$ | Bruit gaussien centré associé à l'image multispectrale, de matrice de covariance spectrale $\mathbf{\Lambda}_m$. |
| \mathbf{N}_h | $\mathbb{R}^{l_h \times p_h}$ | Bruit gaussien centré associé à l'image hyperspectrale, de matrice de covariance spectrale $\mathbf{\Lambda}_m$. |

Toutes les quantités présentées dans cette section et utilisées dans ce chapitre sont synthétisées dans la table 2.1.

TABLE 2.1 – Synthèse des notations utilisées dans le chapitre 2.

2.3 CLASSES D'ALGORITHMES

La fusion d'image a été intensément étudiée dans la littérature pour l'observation de la Terre [Aiuzzi *et al.*, 2011 ; Loncan *et al.*, 2015 ; Yokoya, Grohnfeldt et Chanussot, 2017]. Cette tâche a été entreprise dans le but de fournir des images multibandes à haute résolution spatiale à partir de mesures fournies par des instruments optiques dédiés à l'observation terrestre. En effet, certaines plateformes optiques spatiales ou aériennes de télédétection intègrent au moins deux capteurs avec des résolutions spatiales et spectrales complémentaires. Les premières méthodes ont traité les problèmes dits de *pansharpening*, qui consistent à fusionner une image multispectrale (ou hyperspectrale) avec une image panchromatique, i.e. une image en nuances de gris avec une seule et large bande spectrale. Ces méthodes heuristiques [Vivone *et al.*, 2015 ; Gillespie, Kahle et Walker, 1987], rapides et faciles à implémenter, consistent en l'injection de détails

dans une version interpolée de l'image hyperspectrale.

Le développement de capteurs hyperspectraux ont fait évoluer les méthodes de fusion d'images proposées dans la littérature, dont l'objectif est désormais de combiner les données multispectrales et hyperspectrales. Une classe de ces méthodes de fusion est basée sur des paradigmes de dé-mélange spectral, i.e. exploitant le fait que le contenu spectral de l'image hyperspectrale appartient à un sous-espace spectral, et de factorisation de matrices [Berné *et al.*, 2010; Yokoya, Yairi et Iwasaki, 2012]. Plus récemment, en tirant parti de l'information à disposition concernant les instruments d'observation, la tâche de fusion de données a été formulée comme un problème inverse dérivé de modèles directs explicites et complétés par des régularisations spatiales et/ou spectrales appropriées [Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b; Simoes *et al.*, 2015]. Inspiré par le succès des méthodes d'apprentissage profond, un nouveau type de méthodes de fusion d'images voit le jour. Ces méthodes tirent parti de la structure de réseaux de neurones pour capturer la statistique de l'image à fusionner [Dian *et al.*, 2021]. Nous développons ci-dessous ces différentes classes de techniques de fusion.

2.3.1 Méthodes heuristiques

Depuis les années 90, de nombreux travaux ont traité le problème dit de *pansharpening*. Ces méthodes, dites heuristiques, peuvent être classées en différentes catégories : les méthodes par substitution de composantes, les méthodes par analyse multi-résolution, et la transformée de Brovey [Thomas *et al.*, 2008; Loncan *et al.*, 2015].

Le principe général des méthodes par substitution de composantes est de séparer les informations spatiale et spectrale de l'image à reconstruire. Pour cela, l'image haute résolution spectrale \mathbf{Y}_h est interpolée puis y sont injectés des détails obtenus grâce à l'image panchromatique \mathbf{Y}_m (où $l_m = 1$) [Thomas *et al.*, 2008]. Étant donnée l une bande spectrale, ces méthodes calculent la reconstruction de la bande spectrale correspondante $\hat{\mathbf{X}}^l \in \mathbb{R}^{p_m}$ de la façon suivante :

$$\hat{\mathbf{X}}^l = \mathbf{Y}_{h,int}^l + \mathbf{g}^l(\mathbf{Y}_m - \bar{\mathbf{Y}}_{h,int})$$

où $\bar{\mathbf{Y}}_{h,int} \in \mathbb{R}^{p_m}$ contient l'information spatiale basse résolution commune aux bandes de l'image \mathbf{Y}_h et $\mathbf{g}^l \in \mathbb{R}$ est appelé gain d'injection. $\mathbf{Y}_{h,int}^l$ est une version interpolée de l'image à haute résolution spectrale et représente l'information spectrale haute résolution et spatiale basse fréquence de l'image à reconstruire tandis que $\mathbf{g}^l(\mathbf{Y}_m - \bar{\mathbf{Y}}_{h,int})$ représente l'information spatiale haute fréquence de l'image à reconstruire. Les méthodes de substitution de composantes définissent l'image $\bar{\mathbf{Y}}_{h,int}$ comme une moyenne pondérée le long des bandes de l'image à haute résolution spectrale interpolée à la résolution de l'image panchromatique telle que $\bar{\mathbf{Y}}_{h,int} = \sum_{l=1}^{l_h} \mathbf{w}^l \mathbf{Y}_{h,int}^l$ [Loncan *et al.*, 2015]. $(\mathbf{Y}_m - \bar{\mathbf{Y}}_{h,int})$ représente donc les détails spatiaux haute fréquence contenus dans l'image à haute résolution spatiale qu'on souhaite ajouter à l'image haute résolution spectrale interpolée $\mathbf{Y}_{h,int}$. Les coefficients \mathbf{g}^l et \mathbf{w}^l peuvent être obtenus en effectuant une analyse en composantes principales (ACP) spatiale sur

l'image \mathbf{Y}_h [Chavez, Sides et Anderson, 1991] ou encore par une décomposition de Gram-Schmidt [Laben Craig et Bernard, 2000].

Les méthodes d'analyse multi-résolution (MRA) appliquent un filtre spatial à l'image panchromatique à haute résolution spatiale pour générer une image de détails spatiaux à injecter aux données à basse résolution spatiale [Yokoya, Grohnfeldt et Chanussot, 2017; Loncan *et al.*, 2015]. Soit l une bande spectrale, les méthodes MRA calculent la bande spectrale correspondante du produit fusionné $\hat{\mathbf{X}}^l \in \mathbb{R}^{p_m}$ de la façon suivante :

$$\hat{\mathbf{X}}^l = \mathbf{Y}_{h,int}^l + \mathbf{G}^l \odot (\mathbf{Y}_m - \bar{\mathbf{Y}}_m)$$

où \odot est le produit de matrices terme à terme, $\bar{\mathbf{Y}}_m \in \mathbb{R}^{p_m}$ est l'image panchromatique filtrée spatialement et $\mathbf{G}^l \in \mathbb{R}^{p_m}$ est la matrice des gains d'injection. Ces coefficients de gain peuvent être obtenus de deux façons différentes. Lorsque $\forall l, \mathbf{G}^l = 1$, la même composante hautes fréquences spatiales est injectée à toutes les bandes spectrales de l'image à haute résolution spectrale interpolée. Une alternative est de calculer $\mathbf{G}^l = \mathbf{Y}_{h,int}^l / \bar{\mathbf{Y}}_m$, où la division est effectuée terme à terme [Vivone *et al.*, 2014]. $\bar{\mathbf{Y}}_m$ peut également être obtenue de plusieurs manières, par convolution avec un filtre moyenneur [Liu, 2000] ou encore par construction d'une pyramide laplacienne de filtres gaussiens déterminée à partir de la réponse de l'opérateur de dégradation spatiale \mathbf{H} [Aiazzi *et al.*, 2006].

La transformée de Brovey est une méthode de fusion visant à préserver la contribution spectrale relative de chaque pixel, mais remplace l'intensité de chaque pixel spatial à l'aide de l'image panchromatique à haute résolution spatiale [Te-Ming *et al.*, 2001]. Originellement destinée à fusionner une image panchromatique et une image colorée rouge vert bleu (en anglais *red green blue*, *RGB*), elle peut être adaptée pour la fusion d'images panchromatiques, multispectrales et/ou hyperspectrales. Une version améliorée de la méthode de Brovey consiste à calculer, pour une bande spectrale l donnée,

$$\hat{\mathbf{X}}^l = \mathbf{Y}_{h,int}^l \odot \left(\frac{1}{l_m} \sum_{l=1}^{l_m} \frac{\mathbf{Y}_m^l}{(\mathbf{M}\mathbf{Y}_{h,int})^l + \epsilon} \right)$$

où \mathbf{M} est l'opérateur de dégradation spectral associé à l'image observée à haute résolution spatiale et ϵ un hyperparamètre prévenant les valeurs nulles au dénominateur de la division, qui est effectuée terme à terme. Préalablement à cette transformée, il peut être réalisé une étape de débruitage de l'image à haute résolution spectrale \mathbf{Y}_h , avant interpolation. Cette étape peut être effectuée en identifiant le sous-espace spectral dans lequel vit cette image, en effectuant par exemple une analyse en composantes principales. L'image \mathbf{Y}_h peut ensuite être projetée dans ce sous espace afin d'éliminer les composantes parasites. La méthode de Brovey sera utilisée comme une méthode de référence dans le chapitre 4 afin de comparer les performances de notre méthode de fusion.

Les méthodes heuristiques présentent l'avantage d'être très faciles à implémenter et très rapides. Elles sont susceptibles de fournir un produit fusionné avec une très bonne fidélité spatiale. Cependant, ces méthodes sont sensibles aux distorsions spectrales qu'elles peuvent introduire dans la solution au problème de fusion.

2.3.2 Factorisation de matrices

Dans cette section seront présentées deux méthodes principales de fusion par factorisation de matrices. La première est conçue pour combiner des données d'observation astrophysique spatiale à haute résolution spectrale et des données d'observation astrophysique terrestre à haute résolution spatiale [Berné *et al.*, 2010]. La seconde est très largement utilisée pour fusionner des données multispectrales et hyperspectrales d'observation de la Terre [Yokoya, Yairi et Iwasaki, 2012]. Cependant, de nombreuses autres méthodes basées sur ce même principe ont été proposées dans la littérature [Zhang *et al.*, 2015 ; Karoui *et al.*, 2017 ; Yokoya, Grohnfeldt et Chanussot, 2017].

Les méthodes par factorisation de matrices sont basées sur la décomposition multiplicative des données en composantes spectrales et spatiales. Cette technique est appelée démélange spectral et consiste à extraire des données des composantes spectrales, souvent physiquement interprétables, et à calculer leurs proportions spatiales appelées abondances. Ainsi, on représente le produit fusionné à haute résolution spatiale et spectrale comme

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{S}_h \mathbf{A}_m$$

où $\mathbf{S}_h \in \mathbb{R}^{l_h \times l_{\text{sub}}}$ est la matrice des composantes spectrales, $\mathbf{A}_m \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} \times p_m}$ est la matrice des abondances spatiales correspondantes.

Le processus de fusion de ce type de méthodes vise plus particulièrement à extraire les matrices \mathbf{S}_h et \mathbf{A}_m des images multispectrale et hyperspectrale \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h en les décomposant de la façon suivante :

$$\mathbf{Y}_m \simeq \mathbf{S}_m \mathbf{A}_m \quad (2.3)$$

$$\mathbf{Y}_h \simeq \mathbf{S}_h \mathbf{A}_h \quad (2.4)$$

où $\mathbf{S}_m \in \mathbb{R}^{l_m \times l_{\text{sub}}}$ est la matrice des composantes spectrales associée à l'image multispectrale et $\mathbf{A}_h \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} \times p_h}$ est la matrice des abondances spatiales associée à l'image hyperspectrale.

Berné *et al.*, 2010 proposent de résoudre ce problème de factorisation de matrices en deux étapes. D'abord, le problème de séparation aveugle de sources (en anglais *blind source separation*, *BSS*) (2.4) est considéré et résolu à l'aide de l'algorithme de factorisation en matrices non négatives (en anglais *non-negative matrix factorization*, *NMF*) développé par Lee et Seung, 1999. Cet algorithme résout le problème de BSS en minimisant la distance euclidienne $\|\mathbf{Y}_h - \mathbf{S}_h \mathbf{A}_h\|_F^2$, où $\|\cdot\|_F$ désigne la norme de Frobenius, sous les conditions de positivité $\mathbf{S}_h > 0$ et $\mathbf{A}_h > 0$. La résolution itérative utilise les mises à jour multiplicatives des matrices des spectres et des abondances

$$\mathbf{S}_h = \frac{\mathbf{S}_h \odot (\mathbf{Y}_h \mathbf{A}_h^T)}{\mathbf{S}_h \mathbf{A}_h \mathbf{A}_h^T} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{A}_h = \frac{\mathbf{A}_h \odot (\mathbf{S}_h^T \mathbf{Y}_h)}{\mathbf{S}_h^T \mathbf{S}_h \mathbf{A}_h} \quad (2.6)$$

où les divisions sont effectuées terme à terme. Ensuite, en utilisant les résultats du problème de BSS et le modèle d'observation (2.1), les auteurs écrivent la matrice \mathbf{S}_m des spectres associés à l'image multispectrale

comme $\mathbf{S}_m = \mathbf{M}\tilde{\mathbf{S}}_h$, où \mathbf{M} est supposé connu. Reconstruire \mathbf{A}_m d'après l'équation (2.3) n'est alors plus un problème de BSS mais peut s'écrire comme

$$\mathbf{A}_m = \arg \min_{\tilde{\mathbf{A}}_m} \|\mathbf{Y}_m - \mathbf{S}_m \tilde{\mathbf{A}}_m\|_F^2 \text{ t.q. } \tilde{\mathbf{A}}_m > 0$$

et peut être résolu facilement par une méthode des moindres carrés non négatifs [Lawson et Hanson, 1995].

La méthode proposée par Yokoya, Yairi et Iwasaki, 2012 est une résolution du problème de fusion par un algorithme de NMF couplé, appelé CNMF, basé sur le démixage spectral non supervisé alterné des deux images observées \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h . À partir des décompositions (2.3) et (2.4) ainsi que les modèles d'observation (2.1) et (2.2), les auteurs ajoutent la contrainte de couplage

$$\mathbf{S}_m = \mathbf{M}\mathbf{S}_h \quad (2.7)$$

$$\mathbf{A}_h = \mathbf{A}_m \mathbf{H} \quad (2.8)$$

où \mathbf{M} (resp. \mathbf{H}) est l'opérateur de dégradation spectrale (resp. spatiale) associé à l'instrument d'observation multispectral (resp. hyperspectral). Les deux problèmes de BSS liés à chacune des images observée sont définis par

$$\mathbf{S}_h, \mathbf{A}_h = \arg \min_{\tilde{\mathbf{S}}_h, \tilde{\mathbf{A}}_h} \|\mathbf{Y}_h - \tilde{\mathbf{S}}_h \tilde{\mathbf{A}}_h\|_F^2 \text{ t.q. } \tilde{\mathbf{S}}_h > 0, \tilde{\mathbf{A}}_h > 0 \quad (2.9)$$

$$\mathbf{S}_m, \mathbf{A}_m = \arg \min_{\tilde{\mathbf{S}}_m, \tilde{\mathbf{A}}_m} \|\mathbf{Y}_m - \tilde{\mathbf{S}}_m \tilde{\mathbf{A}}_m\|_F^2 \text{ t.q. } \tilde{\mathbf{S}}_m > 0, \tilde{\mathbf{A}}_m > 0. \quad (2.10)$$

À partir de quantités \mathbf{S}_h et \mathbf{A}_h initialisées judicieusement, la première étape de l'algorithme de CNMF est la résolution du problème (2.9) en utilisant les règles de mise à jour (2.5) et (2.6). La seconde étape est l'initialisation des quantités \mathbf{S}_m d'après l'égalité (2.7) et \mathbf{A}_h puis la résolution du problème (2.10) en utilisant des règles de mise à jour similaires à (2.5) et (2.6). La troisième étape est la mise à jour de la quantité \mathbf{A}_h d'après l'égalité (2.8). Ces trois étapes sont ensuite itérées jusqu'à l'obtention de matrices des spectres \mathbf{S}_h et des abondances \mathbf{A}_m satisfaisantes.

Les méthodes de fusion par factorisation de matrices (i.e. démixage spectral) ont l'avantage, grâce aux contraintes de positivité, de fournir un produit fusionné dont les composantes spectrales et spatiales sont interprétables physiquement. Cet aspect peut être un atout pour l'interprétation des données successive à la fusion, par exemple pour l'extraction de spectres représentatifs de populations de molécules dans l'univers proche [Foschino, Berné et Joblin, 2019]. Ces algorithmes de fusion, dont la résolution implique l'utilisation d'un algorithme de NMF, sont considérés comme plutôt rapides. Cependant, aucune preuve de convergence vers un minimum global de la fonction objectif n'existe. La solution fournie par un algorithme de NMF est donc la position d'un minimum local de la fonction objectif et est, par conséquent, très sensible au choix de l'initialisation. En outre, l'initialisation des algorithmes de NMF est un problème à part entière de la littérature scientifique [Boutsidis et Gallopoulos, 2008 ;

Boulais, Deville et Berné, 2015]. Les algorithmes de NMF sont également sensibles au niveau de bruit dans les images observées et produisent de moins bonnes performances de reconstruction lorsque le SNR de ces données est faible ou lorsque le bruit présent dans ces données est mixte et/ou non gaussien [Diaz et Steele, 2021].

2.3.3 Résolution de problèmes inverses

Le problème de fusion d'images hyperspectrales et multispectrales peut être formulé comme un problème inverse dans le cadre de l'inférence bayésienne [Hardie, Eismann et Wilson, 2004; Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b; Yokoya, Grohnfeldt et Chanussot, 2017]. Cette section présente la méthodologie de formulation des problèmes inverses de fusion puis détaille différents algorithmes d'optimisation résolvant ce type de problèmes suivant le choix de la régularité.

Méthodologie de formulation des problèmes inverses de fusion

En considérant \mathbf{X} , \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h comme des grandeurs aléatoires, on définit $\hat{\mathbf{X}}$ l'estimateur du maximum *a posteriori* (MAP) de \mathbf{X} , étant données les observations \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h , comme

$$\hat{\mathbf{X}} = \arg \max_{\mathbf{X}} p(\mathbf{X} | \mathbf{Y}_m, \mathbf{Y}_h)$$

où $p(\mathbf{X} | \mathbf{Y}_m, \mathbf{Y}_h)$ représente la densité de probabilité conditionnelle de \mathbf{X} sachant \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h , autrement appelée distribution *a posteriori*. En utilisant la règle de Bayes, on peut écrire

$$\hat{\mathbf{X}} = \arg \max_{\mathbf{X}} \frac{p(\mathbf{Y}_m, \mathbf{Y}_h | \mathbf{X}) p(\mathbf{X})}{p(\mathbf{Y}_m, \mathbf{Y}_h)}. \quad (2.11)$$

D'après les modèles directs d'observation (2.1) et (2.2), les matrices \mathbf{N}_m et \mathbf{N}_h sont indépendantes entre elles et indépendantes de la scène \mathbf{X} . \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h , lorsqu'on connaît \mathbf{X} , sont donc indépendantes. On peut alors reformuler le problème (2.11) par

$$\hat{\mathbf{X}} = \arg \max_{\mathbf{X}} p(\mathbf{Y}_m | \mathbf{X}) p(\mathbf{Y}_h | \mathbf{X}) p(\mathbf{X}) \quad (2.12)$$

où $p(\mathbf{Y}_m | \mathbf{X})$ et $p(\mathbf{Y}_h | \mathbf{X})$ représentent les vraisemblances d'observer \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h , respectivement, sachant \mathbf{X} . $p(\mathbf{X})$ est la densité de probabilité *a priori*, exprimant la connaissance que l'on a de la scène \mathbf{X} avant toute observation. En considérant de manière alternative la log-vraisemblance négative, le problème (2.12) est équivalent à

$$\hat{\mathbf{X}} = \arg \min_{\mathbf{X}} -\log p(\mathbf{Y}_m | \mathbf{X}) - \log p(\mathbf{Y}_h | \mathbf{X}) - \log p(\mathbf{X}).$$

Les matrices $\mathbf{N}_m = \mathbf{Y}_m - \mathbf{M}\mathbf{X}$ et $\mathbf{N}_h = \mathbf{Y}_h - \mathbf{X}\mathbf{H}$ suivent une loi normale centrée de matrices covariance $\mathbf{\Lambda}_m$ et $\mathbf{\Lambda}_h$, respectivement. Les vraisemblances $p(\mathbf{Y}_m | \mathbf{X})$ et $p(\mathbf{Y}_h | \mathbf{X})$ sont donc définies par

$$p(\mathbf{Y}_m | \mathbf{X}) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{Y}_m - \mathbf{M}\mathbf{X})^T \mathbf{\Lambda}_m^{-1} (\mathbf{Y}_m - \mathbf{M}\mathbf{X}) \right\}$$

$$p(\mathbf{Y}_h | \mathbf{X}) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{Y}_h - \mathbf{X}\mathbf{H})^T \mathbf{\Lambda}_h^{-1} (\mathbf{Y}_h - \mathbf{X}\mathbf{H}) \right\},$$

où $(\cdot)^T$ désigne la transposée réelle. On définit finalement $\hat{\mathbf{X}}$ l'estimateur du maximum *a posteriori* de \mathbf{X} comme

$$\hat{\mathbf{X}} = \arg \min_{\mathbf{X}} \frac{1}{2} \|\mathbf{A}_m^{1/2}(\mathbf{Y}_m - \mathbf{M}\mathbf{X})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{A}_h^{1/2}(\mathbf{Y}_h - \mathbf{X}\mathbf{H})\|_F^2 + \mu\varphi(\mathbf{X}) \quad (2.13)$$

où les deux premiers termes sont appelés critères de fidélité ou d'attache aux données. Le problème de fusion basé uniquement sur ces deux critères étant fortement mal posé au sens d'Hadamard, la méthodologie bayésienne introduit une régularisation appropriée $\mu\varphi(\mathbf{X}) = -\log p(\mathbf{X})$, représentant l'information *a priori* de la solution au problème. L'hyperparamètre $\mu \in \mathbb{R}$ ajuste l'importance du terme de régularisation par rapport aux termes d'attache aux données. On notera que lorsque $\varphi(\mathbf{X})$ est un terme quadratique quand $p(\mathbf{X})$ est gaussien, l'estimateur MAP est équivalent à l'estimateur du minimum d'erreur quadratique moyenne.

Algorithmes d'optimisation

Suivant l'expression choisie du terme de régularisation, le problème (2.13) peut être résolu par de nombreuses techniques d'optimisation itératives ou possède une solution analytique.

Le choix d'une régularisation quadratique, e.g. de la forme $\varphi(\mathbf{X}) = \|\Omega\mathbf{X}\|_F^2$ où Ω est un opérateur à définir, rend la fonction objectif du problème (2.13) quadratique. Les méthodes itératives classiques utilisées pour résoudre ce type de problèmes sont des algorithmes à direction de descente destinés à minimiser une fonction objectif réelle différentiable. À chaque itération, une mise à jour de l'itéré est effectuée dans la direction opposée au gradient de la fonction, de manière à la faire décroître. Un choix de régularisation quadratique et la vectorisation du problème (2.13), c'est-à-dire l'introduction de l'équivalent ordonné lexicographiquement $\mathbf{x} = [\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^{l_h}]^T$, permettent de le réécrire sous la forme du système linéaire

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

où la matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{l_h p_m \times l_h p_m}$ est symétrique définie positive et $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{l_h p_m}$. Le calcul de ces deux quantités est détaillé dans l'annexe A.1. La solution de ce problème annule le gradient de la fonction objectif et est donc la solution du système $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$. L'algorithme du gradient conjugué [Shewchuk, 1994], appartenant à la classe des algorithmes à direction de descente, propose de résoudre ce problème en construisant une suite de directions de descente conjuguées linéairement indépendantes. Ces directions forment une base de l'espace de résolution du problème et permettent donc d'éviter d'utiliser des directions de descente colinéaires aux précédentes qui peuvent ralentir la minimisation de la fonction objectif. À partir d'une initialisation $\mathbf{x}_{(0)}$, e.g. une estimation grossière de la solution, les règles de mise à jour de l'algorithme de gradient conjugué sont présentées dans l'algorithme 1. Toutes les divisions sont effectuées terme à terme. L'algorithme du gradient conjugué converge théoriquement vers la solution exacte en un nombre d'itérations maximal égal à la dimension du problème. En pratique, l'instabilité de la méthode par rapport aux pe-

Algorithme 1 : Algorithme du gradient conjugué.

Entrée : \mathbf{A} , \mathbf{b} , $\mathbf{x}_{(0)}$

Initialisation de l'algorithme

- 1: Calcul du résidu $\mathbf{r}_{(0)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_{(0)}$
- 2: Calcul de la première direction de descente $\mathbf{p}_{(0)} = \mathbf{r}_{(0)}$
- 3: $k = 0$

Règles de mise à jour

- 4: **Tant que** un critère d'arrêt n'est pas atteint **faire**
- 5: Calcul du pas de descente $\alpha_{(k)} = \frac{\mathbf{r}_{(k)}^T \mathbf{r}_{(k)}}{\mathbf{p}_{(k)}^T \mathbf{A} \mathbf{p}_{(k)}}$
- 6: $\mathbf{x}_{(k+1)} = \mathbf{x}_{(k)} + \alpha_{(k)} \mathbf{p}_{(k)}$
- 7: $\mathbf{r}_{(k+1)} = \mathbf{r}_{(k)} - \alpha_{(k)} \mathbf{A} \mathbf{p}_{(k)}$
- 8: $\beta_{(k)} = \frac{\mathbf{r}_{(k+1)}^T \mathbf{r}_{(k+1)}}{\mathbf{r}_{(k)}^T \mathbf{r}_{(k)}}$
- 9: Calcul de la direction conjuguée $\mathbf{p}_{(k+1)} = \mathbf{r}_{(k+1)} + \beta_{(k)} \mathbf{p}_{(k)}$
- 10: $k = k+1$
- 11: **Fin Tant que**

Sortie : $\mathbf{x}_{(k+1)}$

tites perturbations ne permet pas d'atteindre cette solution exacte en un nombre fini d'itérations. La convergence de l'algorithme dépend en pratique du conditionnement de la matrice \mathbf{A} et de la distribution de son spectre [Saad, 2003]. Un système linéaire pour lequel la matrice \mathbf{A} est bien conditionnée sera résolu par la méthode du gradient conjugué en un nombre d'itérations fini et relativement peu important. Si le conditionnement de la matrice \mathbf{A} est mauvais, des techniques de préconditionnement peuvent améliorer la convergence de la méthode [Barrett *et al.*, 1994; Gratton, Sartenaer et Tshimanga, 2011]. Cet algorithme sera notamment utilisé dans le chapitre 4 pour résoudre le problème de fusion d'images d'astronomie observationnelle.

Lorsque la régularisation choisie n'est pas quadratique, la résolution du problème de fusion doit être effectuée à l'aide d'algorithmes adaptés. Les algorithmes décrits ci-après sont deux méthodes itératives de résolution du problème de fusion muni d'une régularisation convexe semi-continue inférieurement. Pour la suite, on considère la vectorisation du problème (2.13), c'est-à-dire l'introduction de l'équivalent ordonné lexicographiquement $\mathbf{x} = [\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^{l_h}]^T$. On considère alors le problème de minimisation générique suivant

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}) \quad (2.14)$$

où f est une fonction convexe différentiable dont le gradient est Lipschitz-continu, i.e. $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{l_h p_m}$, $\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2 \leq L_f \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$ avec L_f constante de Lipschitz et $\nabla f(\cdot)$ le gradient de la fonction f . g est une fonction convexe potentiellement non différentiable. On définit l'opérateur proximal de g comme $\text{prox}_g(\mathbf{x}) = \arg \min_{\mathbf{y}} (g(\mathbf{y}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2)$. Par exemple, lorsque $g(\mathbf{x}) = \mu \|\mathbf{x}\|_1$, l'opérateur proximal de cette fonction est un seuillage doux $\text{prox}_g(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \mu)_+ - (-\mathbf{x} - \mu)_+$. Le problème (2.14) admet un unique minimiseur pouvant être approché itérativement en effectuant les mises à jour résumées dans l'algorithme 2. Cet algo-

rithme, appelé en anglais *Fast iterative shrinkage-thresholding algorithm* (FISTA) et proposé par Beck et Teboulle, 2009, est un algorithme appartenant à la classe des algorithmes à direction de descente. Les auteurs montrent un taux de convergence de l'algorithme de $\mathcal{O}(\frac{1}{k^2})$, i.e. $(f(\mathbf{x}_{(k)}) + g(\mathbf{x}_{(k)})) - (f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})) \leq \mathcal{O}(\frac{1}{k^2})$ [Beck et Teboulle, 2009]. Il est une accélération de l'algorithme ISTA [Daubechies, Defrise et De Mol, 2004]. Cette accélération est d'abord introduite par Nesterov, 1983 pour minimiser des fonctions Lipschitz-différentiables et est une méthode de descente de gradient optimale au sens de la complexité. Cette méthode de descente de gradient accélérée est présentée dans l'annexe A.2.

Algorithme 2 : Algorithme FISTA.

Entrée : $f, g, \mathbf{x}_{(0)}$
 # Initialisation de l'algorithme
 1: $\mathbf{y}_{(1)} = \mathbf{x}_{(0)}$
 2: $t_{(1)} = 1$
 3: $L \geq L_f$
 4: $k = 1$
 # Règles de mise à jour
 5: **Tant que** un critère d'arrêt n'est pas atteint **faire**
 6: $\mathbf{x}_{(k)} = \text{prox}_g \left(\mathbf{y}_{(k)} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}_{(k)}) \right)$
 7: $t_{(k+1)} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_{(k)}^2}}{2}$
 8: $\mathbf{y}_{(k+1)} = \mathbf{x}_{(k)} + \frac{t_{(k)} - 1}{t_{(k+1)}} (\mathbf{x}_{(k)} - \mathbf{x}_{(k-1)})$
 9: $k = k + 1$
 10: **Fin Tant que**
Sortie : $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_{(k)}$

La méthode *split augmented Lagrangian shrinkage algorithm* (SALSA) [Afonso, Bioucas-Dias et Figueiredo, 2010], instance de l'algorithme à directions alternées (en anglais *alternating direction method of multipliers*, ADMM) [Eckstein et Bertsekas, 1992], résout le problème non contraint (2.14) par séparation de variables

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{y}) \text{ t.q. } \mathbf{x} = \mathbf{y} \quad (2.15)$$

où f et g sont des fonctions convexes semi continues inférieurement. L'algorithme SALSA est utilisé, préférablement à l'algorithme FISTA, lorsque la minimisation des problèmes $\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$ et $\min_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y})$ est considérée comme plus simple que la minimisation conjointe du problème $\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x})$. Le lagrangien augmenté associé au problème s'écrit

$$\mathcal{L}_a(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{y}) + \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 \quad (2.16)$$

où $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{l_h p_m}$ est un vecteur de multiplicateurs de Lagrange et $\alpha \in \mathbb{R}$ est un paramètre d'augmentation. En introduisant $\mathbf{d} = \alpha^{-1} \boldsymbol{\lambda}$, minimiser le lagrangien augmenté (2.16) revient à minimiser

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{d}) = f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{y}) + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y} - \mathbf{d}\|_2^2 \quad (2.17)$$

L'algorithme SALSA minimise alternativement le lagrangien augmenté (2.17) par rapport à \mathbf{x} puis par rapport à \mathbf{y} , résolvant le problème de fusion en utilisant les règles de mise à jour résumées dans l'algorithme 3. Bien

Algorithme 3 : Algorithme SALSA.

Entrée : $f, g, \mathbf{x}_{(0)}, \mathbf{y}_{(0)}, \mathbf{d}_{(0)}, \alpha$

1: $k = 0$

 # Règles de mise à jour

2: **Tant que** un critère d'arrêt n'est pas atteint **faire**

3: $\mathbf{x}_{(k+1)} = \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}_{(k)} - \mathbf{d}_{(k)}\|_2^2$

4: $\mathbf{y}_{(k+1)} = \arg \min_{\mathbf{y}} g(\mathbf{y}) + \frac{\alpha}{2} \|\mathbf{x}_{(k+1)} - \mathbf{y} - \mathbf{d}_{(k)}\|_2^2$

5: $\mathbf{d}_{(k+1)} = \mathbf{d}_{(k)} - (\mathbf{x}_{(k+1)} - \mathbf{y}_{(k+1)})$

6: $k = k + 1$

7: **Fin Tant que**

Sortie : $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_{(k+1)}$

que la convergence de cet algorithme soit garantie [Afonso, Bioucas-Dias et Figueiredo, 2011], l'obtention d'une solution au problème de grande précision nécessite un grand nombre d'itérations. Il existe cependant, sous certaines conditions, des techniques d'accélération de l'algorithme ADMM [Goldstein *et al.*, 2014 ; Poon et Liang, 2019].

Dans le cadre de la fusion d'images introduite précédemment, on définit les équivalents ordonnés lexicographiquement \mathbf{y}_m , $\underline{\mathbf{M}}$, \mathbf{y}_h et $\underline{\mathbf{H}}$ de \mathbf{Y}_m , \mathbf{M} , \mathbf{Y}_h et \mathbf{H} , respectivement, tels que

$$(\mathbf{y}_m - \underline{\mathbf{M}}\mathbf{x}) = \left[(\mathbf{Y}_m - \mathbf{M}\mathbf{X})^1, \dots, (\mathbf{Y}_m - \mathbf{M}\mathbf{X})^{l_m} \right]^T$$

$$(\mathbf{y}_h - \mathbf{x}\underline{\mathbf{H}}) = \left[(\mathbf{Y}_h - \mathbf{X}\mathbf{H})^1, \dots, (\mathbf{Y}_h - \mathbf{X}\mathbf{H})^{l_h} \right]^T.$$

On note également $\underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2} = \mathbf{\Lambda}_m^{1/2} \otimes \mathbf{I}_{p_m}$ et $\underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2} = \mathbf{\Lambda}_h^{1/2} \otimes \mathbf{I}_{p_h}$. Alors, on écrit $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2}(\mathbf{y}_m - \underline{\mathbf{M}}\mathbf{x})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2}(\mathbf{y}_h - \mathbf{x}\underline{\mathbf{H}})\|_F^2$ et $g(\mathbf{x}) = \mu\varphi(\mathbf{x})$. Suivant le choix de la forme de cette fonction g , on peut résoudre le problème inverse de fusion à l'aide des algorithmes FISTA ou SALSA.

Récemment, Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b ont proposé une solution analytique au problème de fusion (2.13). Résoudre ce problème, où $\varphi(\mathbf{X}) = 0$ ou est quadratique, revient à annuler le gradient de la fonction objectif et, par conséquent, à résoudre le problème matriciel

$$\mathbf{C}_1\mathbf{X} + \mathbf{X}\mathbf{C}_2 = \mathbf{C}_3 \quad (2.18)$$

avec $\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2, \mathbf{C}_3 \in \mathbb{R}^{l_h p_m \times l_h p_m}$. Une équation de ce type est appelée équation de Sylvester et possède, dans certains cas, une solution analytique facilement implémentable. La réécriture astucieuse de l'équation, détaillée dans l'annexe A.3 où sont également données les expressions des quantités $\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2$ et \mathbf{C}_3 , permet de calculer le produit fusionné $\hat{\mathbf{X}}$ par blocs pour un coût computationnel faible sous certaines conditions. Cette réécriture n'est possible que si l'opérateur de dégradation spatiale \mathbf{H} peut être décomposé en un produit de deux opérateurs. Le premier doit être un

opérateur de convolution spatiale spectralement invariant pouvant s'exprimer sous la forme d'une matrice circulante par blocs. Le second opérateur est un opérateur de sous échantillonnage de facteur entier. Le calcul d'une solution analytique au problème de fusion (2.13), dans le cas trivial où $\varphi(\mathbf{X})$ a une forme quadratique, permet notamment de résoudre le problème d'optimisation de la ligne 3 de l'algorithme SALSA 3 analytiquement avec une complexité computationnelle faible, accélérant ainsi substantiellement cet algorithme.

2.3.4 Régularisations associées à la résolution de problèmes inverses

Les méthodes de fusion par résolution du problème inverse de fusion (2.13) considèrent une régularisation spatiale et spectrale séparables [Yokoya, Grohnfeldt et Chanussot, 2017]. De nombreuses études dédiées au problème de démixage spectral d'images hyperspectrales en observation de la Terre [Bioucas-Dias *et al.*, 2012] supposent que le produit de la fusion est supposé vivre dans un sous-espace spectral de dimension l_{sub} très inférieure à la dimension spectrale l_{h} du problème, de telle sorte que

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}$$

où $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{l_{\text{h}} \times l_{\text{sub}}}$ est la matrice des composantes spectrales et $\hat{\mathbf{Z}} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} \times p_{\text{m}}}$ est la projection de $\hat{\mathbf{X}}$ sur le sous-espace spectral engendré par \mathbf{V} , autrement dit la matrice de leur répartition spatiale. La matrice \mathbf{V} est facilement identifiable par ACP ou en utilisant l'algorithme *vertex component analysis* (VCA) [Nascimento et Dias, 2005] sur l'image hyperspectrale observée. Cette hypothèse de rang faible spectral impose une régularisation spectrale implicite. Résoudre le problème inverse de fusion revient donc à calculer

$$\hat{\mathbf{Z}} = \arg \min_{\mathbf{Z}} \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_{\text{m}}^{1/2}(\mathbf{Y}_{\text{m}} - \mathbf{M}\mathbf{V}\mathbf{Z})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_{\text{h}}^{1/2}(\mathbf{Y}_{\text{h}} - \mathbf{V}\mathbf{Z}\mathbf{H})\|_F^2 + \mu \varphi_{\text{spa}}(\mathbf{Z}) \quad (2.19)$$

où $\varphi_{\text{spa}}(\cdot)$ est une régularisation spatiale.

Afin de régulariser spatialement le problème de fusion, une régularisation exploitant une représentation parcimonieuse dans un dictionnaire est introduite par Wei *et al.*, 2015. La projection $\hat{\mathbf{Z}}$ de l'image à reconstruire est représentée par un ensemble de n_{p} patches de taille p_{p} obtenus par combinaison linéaire parcimonieuse d'éléments d'un dictionnaire redondant contenant n_{a} atomes. Le problème à résoudre, régularisé spatialement, est alors

$$\hat{\mathbf{Z}}, \hat{\mathbf{C}} = \arg \min_{\mathbf{Z}, \mathbf{C}} \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_{\text{m}}^{1/2}(\mathbf{Y}_{\text{m}} - \mathbf{M}\mathbf{V}\mathbf{Z})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_{\text{h}}^{1/2}(\mathbf{Y}_{\text{h}} - \mathbf{V}\mathbf{Z}\mathbf{H})\|_F^2 + \mu \sum_{l=1}^{l_{\text{sub}}} \|\mathbf{Z}^l - \mathcal{P}(\mathbf{B}^l \mathbf{C}^l)\|_F^2 \quad \text{t.q.} \quad \left\{ \mathbf{C}_{\Omega_c, l}^l = 0 \right\}_{l=1}^{l_{\text{sub}}} \quad (2.20)$$

avec

- $\mathbf{Z}^l \in \mathbb{R}^{p_{\text{m}}}$ la l -ième bande spectrale de \mathbf{Z} ,
- $\mathcal{P}(\cdot) : \mathbb{R}^{p_{\text{p}} \times n_{\text{p}}} \rightarrow \mathbb{R}^{p_{\text{m}}}$ l'opérateur linéaire moyennant les n_{p} patches recouvrants de chaque bande de \mathbf{Z} ,

- $\mathbf{B}^l \in \mathbb{R}^{p_p \times n_a}$ le dictionnaire redondant associé à la l -ième bande spectrale de \mathbf{Z} ,
- $\mathbf{C}^l \in \mathbb{R}^{n_a \times n_p}$ le code parcimonieux associé à la l -ième bande spectrale de \mathbf{Z} , qui décrit l'activation des atomes du dictionnaire pour chaque patch,
- $\Omega_{c,l}$ le support de \mathbf{C}^l , i.e. l'ensemble des entrées non nulles de la matrice \mathbf{C}^l et $\bar{\Omega}_{c,l}$ son ensemble complémentaire.

Cette formulation diffère des approches parcimonieuses classiques. En effet, le critère de régularisation est quadratique pour permettre une implémentation simple et le support des codes est fixé pendant une phase d'apprentissage. L'apprentissage du dictionnaire est effectué, préalablement à la résolution du problème, grâce à un algorithme d'apprentissage en ligne de dictionnaire (en anglais *online dictionary learning*, *ODL*) sur les bandes d'une estimation grossière $\tilde{\mathbf{Z}}$ [Hardie, Eismann et Wilson, 2004] de la solution $\hat{\mathbf{Z}}$ du problème de fusion. Les supports $\Omega_{c,l}$, l allant de 1 à l_{sub} , sont ensuite estimés à partir de l'estimation $\tilde{\mathbf{Z}}$ grâce à un algorithme glouton *orthogonal matching pursuit* (OMP). Cette étape fixe le nombre d'atomes ($\leq K$) par patch et la localisation dans le dictionnaire des atomes combinés linéairement. Le problème (2.19) peut être résolu efficacement en utilisant l'algorithme 4 de descente alternée. Cet algorithme itératif résout à chaque itération deux problèmes d'optimisation en calculant leur solution analytique, l'un en résolvant une équation de Sylvester et l'autre par moindres carrés.

Algorithme 4 : Résolution du problème de fusion lié à la régularisation parcimonieuse.

Entrée : $\mathbf{Y}_m, \mathbf{Y}_h, \mathbf{M}, \mathbf{H}, \mathbf{Z}_{(0)}$

Pré-traitement des données

- 1: Identifier la base du sous-espace spectral \mathbf{V}
- 2: Estimer $\tilde{\mathbf{Z}}$ [Hardie, Eismann et Wilson, 2004]
- 3: $\mathbf{B} = \text{ODL}(\tilde{\mathbf{Z}})$
- 4: $\Omega_{c,l}, \mathbf{C}_{(0)} = \text{OMP}(\tilde{\mathbf{Z}}, \mathbf{B}, K)$
- 5: $k = 0$

Optimisation alternée

- 6: **Tant que** un critère d'arrêt n'est pas atteint **faire**
 - 7: # *Optimisation du premier problème par résolution d'une équation de Sylvester*
 - 8:
$$\mathbf{Z}_{(k+1)} = \arg \min_{\mathbf{Z}_{(k)}} \frac{1}{2} \|\mathbf{A}_m^{1/2} (\mathbf{Y}_m - \mathbf{M}\mathbf{V}\mathbf{Z}_{(k)})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{A}_h^{1/2} (\mathbf{Y}_h - \mathbf{V}\mathbf{Z}_{(k)}\mathbf{H})\|_F^2 + \mu \sum_{l=1}^{l_{\text{sub}}} \|\mathbf{Z}_{(k)}^l - \mathcal{P}(\mathbf{B}^l \mathbf{C}_{(k)}^l)\|_F^2$$
 - 9: # *Optimisation du second problème par régression des moindres carrés*
 - 10:
$$\mathbf{C}_{(k+1)} = \arg \min_{\mathbf{C}_{(k)}} \mu \sum_{l=1}^{l_{\text{sub}}} \|\mathbf{Z}_{(k+1)}^l - \mathcal{P}(\mathbf{B}^l \mathbf{C}_{(k)}^l)\|_F^2$$
 - 11: $k = k+1$
 - 12: **Fin Tant que**
- Sortie** : $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{V}\mathbf{Z}_{(k+1)}$
-

Simoes *et al.*, 2015 ont introduit une régularisation spatiale basée sur la variation totale vectorielle [Osher et Paragios, 2003] de la projection \mathbf{Z} définie par

$$\varphi_{\text{spa}}(\mathbf{Z}) = \sum_{p=1}^{p_m} \sqrt{\sum_{l=1}^{l_{\text{sub}}} \left[(\mathbf{ZD}_h)_p^l \right]^2 + \left[(\mathbf{ZD}_v)_p^l \right]^2}$$

où les matrices \mathbf{D}_h et \mathbf{D}_v sont respectivement des opérateurs de différences finies discrètes horizontales et verticales du premier ordre. Une telle régularisation favorise la parcimonie du gradient de l'image \mathbf{Z} . En d'autres termes, la régularisation impose à l'image \mathbf{Z} d'être constante sauf pour un petit nombre de pixels correspondant potentiellement à des zones de contours. L'optimisation du problème (2.19) muni d'une régularisation spatiale basée sur la variation totale, appelé dans la littérature Hy-Sure, n'est pas un problème aisé puisque $\varphi_{\text{spa}}(\mathbf{Z})$, bien que convexe, n'est ni quadratique ni continument dérivable. Les auteurs résolvent alors le problème à l'aide de l'algorithme SALSA présenté dans la section 2.3.3.

Les méthodes de fusion par résolution de problèmes inverses régularisés fournissent d'excellents résultats de reconstruction, spatialement et spectralement, mais leur coût computationnel dû à la complexité des algorithmes d'optimisation reste élevé par rapport aux méthodes heuristiques et par factorisation de matrices [Yokoya, Grohnfeldt et Chanussot, 2017 ; Dian *et al.*, 2021]. Le choix du paramètre de régularisation peut aussi se révéler difficile. Une bonne connaissance des modèles d'observation est également nécessaire. Cependant, les auteurs de la méthode Hy-Sure [Simoes *et al.*, 2015] proposent une méthode d'estimation de ces modèles à partir des données observées en résolvant aussi un problème d'optimisation.

2.3.5 Méthodes par apprentissage automatique

Depuis quelques années et le développement très important des techniques d'apprentissage automatique, de plus en plus d'intérêt est accordé à l'application de ces méthodes au traitement d'images et à l'imagerie hyperspectrale. D'abord, des méthodes d'inpainting, de débruitage ou encore de super-résolution d'images sont proposées [Xie, Xu et Chen, 2012 ; Yang *et al.*, 2019 ; Sidorov et Hardeberg, 2019]. Puis, inédites ou adaptées de ces dernières, de nombreuses méthodes de fusion d'images hyperspectrales et multispectrales ou multispectrales et panchromatiques apparaissent [Dian *et al.*, 2021]. Cette section ne prétend pas fournir une bibliographie exhaustive de toutes les méthodes de fusion par apprentissage automatique existantes. Le choix des méthodes présentées et leur classement sont subjectifs. Les méthodes décrites par la suite sont basées sur l'utilisation des réseaux de neurones convolutifs (en anglais *convolutional neural networks*, *CNN*) appartenant à la classe des réseaux d'apprentissage profond (en anglais *deep learning*, *DL*). Ces réseaux s'inspirent des mécanismes biologiques de la vision, les rendant particulièrement adaptés à des applications de traitement d'images comme la classification d'images, la reconnaissance de forme, l'inpainting, etc. Les CNNs sont composés de couches multiples effectuant successivement des convolutions, des activations non linéaires et des sous-échantillonnages. Un exemple d'architecture d'une couche d'un

CNN est présenté dans la figure 2.4. Toutes les méthodes présentées, sauf une, nécessitent une phase d'entraînement du réseau de neurones. Dans le cas d'un apprentissage supervisé, chaque réseau est d'abord optimisé en utilisant un grand volume de données connues composées de données d'entrée du réseau (dans le cas de la fusion, les images observées) et de la vérité terrain (ici, l'image de référence). La sortie du réseau de neurones est alors comparée à la vérité terrain, jusqu'à ce que le réseau soit capable de produire des résultats satisfaisants. Dans le cas d'un apprentissage non supervisé, la sortie du réseau de neurones est comparée à son entrée, c'est le cas des réseaux de neurones génératifs.

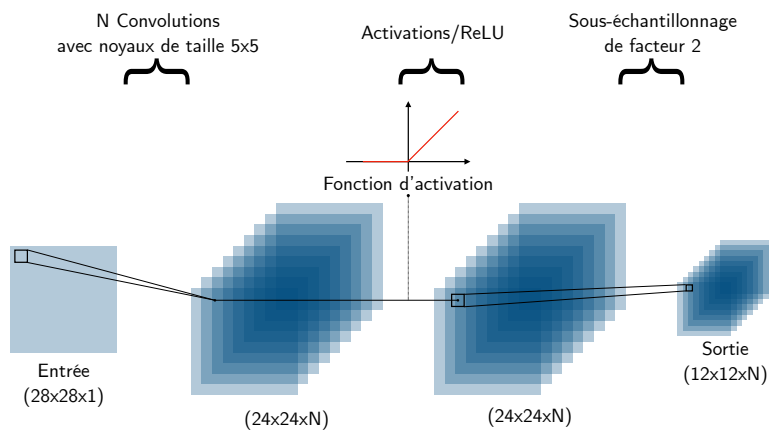


FIGURE 2.4 – Illustration d'une couche d'un réseau de neurones convolutifs (CNN). L'image en entrée est convoluée par N noyaux de convolutions. Le résultat est ensuite seuillé grâce à la fonction d'activation, puis sous-échantillonné d'un facteur 2 pour former la sortie de la couche de ce réseau.

Les premières méthodes de fusion d'images à l'aide de réseaux de neurones convolutifs tentent de reconstruire une image à haute résolution spatiale et spectrale sans prendre en compte les modèles d'acquisition de données dont les méthodes précédentes font usage. Bien que ne prenant pas en compte l'information disponible par la connaissance des modèles instrumentaux, ces méthodes sont plus facilement généralisables à la fusion de données acquises par divers instruments. Yang *et al.*, 2017 proposent un réseau de neurones, appelé PanNet, à l'architecture originale pour résoudre la problème de pansharpening. Ce réseau est composé de deux branches distinctes. La première extrait les caractéristiques spectrales inhérentes à l'image multispectrale via une architecture ResNet [He *et al.*, 2016]. La deuxième extrait les caractéristiques spatiales, dans le domaine de Fourier, de l'image panchromatique, préalablement filtrée à l'aide d'un filtre passe-haut, et de l'image multispectrale interpolée. Ainsi, la structure et la géométrie de l'image panchromatique sont préservées. Les images en sortie des deux branches du réseau de neurones sont sommées avec une version interpolée de l'image multispectrale pour former le produit fusionné. Une architecture à double branche est également proposée par Yang, Zhao et Chan, 2018 afin de reconstruire les spectres d'une image fusionnée un à un à partir d'un jeu d'images hyperspectrale et multispectrale. Un premier CNN (en 1 dimension) extrait des caractéristiques spectrales d'un spectre de l'image hyperspectrale et un second (en 2 dimensions) extrait les caractéristiques spatiales de la zone de l'image multispectrale correspondant au voisinage du spectre choisi en entrée du premier réseau. Un

troisième réseau associe les caractéristiques des deux précédents réseaux à un spectre appartenant à l'image fusionnée. La fusion est ainsi effectuée spectre par spectre. Wang *et al.*, 2019 proposent un apprentissage joint des modèles instrumentaux, lorsque ceux-ci ne sont pas connus, et du processus de fusion. Un CNN est dédié à associer une image hyperspectrale haute résolution spatiale, en entrée, à un jeu de données observées simulé composé d'une image multispectrale et d'une image hyperspectrale, en sortie, et estime donc le processus de dégradation dû à l'acquisition de données. Un deuxième CNN associe les images observées ainsi que le jeu de données observées simulé au produit fusionné haute résolution spatiale et spectrale. Gasteineau *et al.*, 2021 utilisent, quant à eux, une classe de réseaux de neurones génératifs, appelés réseaux antagonistes génératifs (en anglais *GANs*, *Generative Adversarial Networks*) [Goodfellow *et al.*, 2014]. Ces réseaux, non supervisés, sont capables d'imiter n'importe quelle distribution de données et sont composés de deux réseaux antagonistes. Le premier est un générateur, et est entraîné pour générer un échantillon, tandis que le deuxième réseau, appelé réseau discriminant, tente de classer les vrais échantillons des échantillons générés. L'approche proposée utilise deux discriminateurs CNN différents, dont l'un est optimisé pour comparer les textures et la géométrie des images et l'autre pour comparer les couleurs et la résolution spectrale. Le générateur choisi dans cette méthode possède une architecture ResNet [He *et al.*, 2016].

Une autre classe de méthodes de fusion par apprentissage automatique prend en compte un modèle d'observation, supposé connu, pour chaque image observée. Ces méthodes reprennent les principes de la fusion par résolution de problèmes inverses (voir section 2.3.3) mais utilisent un réseau de neurones pour définir le terme de régularisation associé au problème. Une première méthode [Dian *et al.*, 2018] utilise un réseau de neurones convolutifs pour apprendre une image utilisée dans un terme de régularisation quadratique. L'algorithme proposé effectue la fusion en trois étapes. D'abord, le problème (2.21) est résolu, après reformulation en une équation de Sylvester (voir section 2.3.3).

$$\hat{\mathbf{X}}_{\text{int}} = \arg \min_{\mathbf{X}} \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_m^{1/2}(\mathbf{Y}_m - \mathbf{MX})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_h^{1/2}(\mathbf{Y}_h - \mathbf{XH})\|_F^2 + \mu_1 \|\mathbf{X} - \mathbf{Y}_{h,\text{int}}\|_F^2 \quad (2.21)$$

Ensuite, un CNN estime les composantes spatiales de haute fréquence à partir de la solution au problème (2.21), $\hat{\mathbf{X}}_{\text{int}}$. L'image haute fréquence, en sortie de ce réseau, est ajoutée à $\hat{\mathbf{X}}_{\text{int}}$ pour former l'image $\hat{\mathbf{X}}_{\text{cnn}}$ et, finalement, le problème (2.22) est résolu

$$\hat{\mathbf{X}} = \arg \min_{\mathbf{X}} \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_m^{1/2}(\mathbf{Y}_m - \mathbf{MX})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_h^{1/2}(\mathbf{Y}_h - \mathbf{XH})\|_F^2 + \mu_2 \|\mathbf{X} - \hat{\mathbf{X}}_{\text{cnn}}\|_F^2. \quad (2.22)$$

Lempitsky, Vedaldi et Ulyanov, 2018 proposent une approche fondamentalement différente car totalement non supervisée. La régularisation proposée est basée sur un réseau de neurones génératif adapté à la résolution de problèmes inverses en imagerie. Sidorov et Hardeberg, 2019 étudient

ensuite leur utilisation dans le cas du problème de super-résolution hyperspectrale et Yang *et al.*, 2021 proposent finalement une méthode de fusion d'images hyperspectrales et multispectrales utilisant ce type de régularisation, appelée en anglais *deep image prior*. L'idée originale suppose que la structure d'un réseau génératif est suffisante pour capturer l'essentiel des statistiques de bas niveau d'une image, avant tout apprentissage. Cette structure agit comme une régularisation naturelle. La structure du réseau proposé par Sidorov et Hardeberg, 2019 pour résoudre le problème de super-résolution, appelée U-Net [Ronneberger, Fischer et Brox, 2015], est composée d'un CNN en entonnoir, appelé encodeur, dont le rôle est de capturer les caractéristiques principales de l'image en entrée et d'un autre CNN, appelé décodeur, associant des caractéristiques encodées à une image générée en sortie. Un tel réseau, initialisé aléatoirement, peut être utilisé comme une régularisation avec de bons résultats pour résoudre des problèmes inverses standards. Yang *et al.*, 2021 proposent de résoudre le problème (2.23), où $\mathcal{U}(\cdot)$ est un réseau génératif U-Net.

$$\hat{\mathbf{X}} = \arg \min_{\mathbf{X}} \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_m^{1/2}(\mathbf{Y}_m - \mathbf{MX})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{\Lambda}_h^{1/2}(\mathbf{Y}_h - \mathbf{XH})\|_F^2 + \mu \mathcal{U}(\mathbf{X}) \quad (2.23)$$

Les méthodes présentées dans cette section présentent plusieurs avantages. Tout d'abord, leur implémentation est aisée grâce au développement massif de bibliothèques d'apprentissage automatique. Implémentées ainsi, ces méthodes utilisent la puissance de calcul des GPU, les rendant très rapides à utiliser une fois les réseaux entraînés. L'utilisation de CNNs, réputés pour avoir une capacité puissante à apprendre et extraire les caractéristiques d'une image grâce à la non-linéarité de leurs fonctions d'activation, les rend particulièrement bien adaptées à la résolution du problème de fusion d'images. Cependant, ces réseaux de neurones nécessitent un grand volume de données d'entraînement qui est rarement disponible. L'entraînement des réseaux de neurones profonds est également un problème d'optimisation complexe, dont le nombre d'hyperparamètres est généralement très grand (e.g. nombre de couches convolutives, choix des optimiseurs, etc). En particulier, l'entraînement des GANs, pour lesquels deux réseaux sont en compétition, est réputé difficile et très sensible aux choix des hyperparamètres. L'entraînement devra être effectué une nouvelle fois lorsque les données à traiter changent, par exemple lorsque les instruments d'observation changent.

2.4 VALIDATION DES MÉTHODES : LE PROTOCOLE DE WALD

Pour l'évaluation de la qualité du processus de fusion, l'utilisation d'une image de référence, dite de vérité terrain, est indispensable. Dans le cas d'une fusion de données réelles, une telle image est indisponible. La fusion doit alors être évaluée sur des images observées synthétiques ou semi-synthétiques, pour lesquelles une image de vérité terrain est disponible. La méthode usuelle pour la validation des méthodes de fusion a été proposée par Wald, Ranchin et Mangolini, 2005.

Le protocole de Wald, illustré dans la figure 2.5, propose une méthodologie formelle pour générer des images de simulation d'observation à partir d'une image de référence à haute résolution spatiale et spectrale, puis pour évaluer la qualité de la reconstruction du produit fusionné en le comparant avec l'image de référence. Le jeu de données observées synthétiques doivent respecter certaines propriétés. Les images observées multispectrales et hyperspectrales simulées doivent être les plus proches possibles des images qui auraient été acquises avec des instruments réels. L'image de référence doit être la plus proche possible d'une image qui aurait été acquise avec un capteur hyperspectral, mais à haute résolution spatiale. Le protocole suit plus précisément les étapes suivantes :

1. À partir d'une image de référence \mathbf{X} , l'image hyperspectrale observée \mathbf{Y}_h à haute résolution spectrale et à basse résolution spatiale est simulée en appliquant un flou spatial en 2 dimensions puis un sous-échantillonnage de facteur entier d . L'image est finalement bruitée. Cette étape revient à appliquer le modèle direct (2.2) à l'image de référence.
2. L'image multispectrale observée \mathbf{Y}_m à haute résolution spatiale et à basse résolution spectrale est obtenue en appliquant le modèle direct (2.1) à l'image de référence, c'est-à-dire multiplier \mathbf{X} par la réponse spectrale \mathbf{M} de l'instrument d'observation et ajouter du bruit.
3. Les images observées \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h sont fusionnées.
4. Les images de référence et fusionnée sont comparées afin d'obtenir des mesures quantitatives de qualité de la fusion.

L'établissement de protocoles de validation de méthodes est une dimension à part entière et reste toujours un questionnement en suspens de la littérature scientifique [Du *et al.*, 2007 ; Amro *et al.*, 2011]. La génération des données et l'application d'un protocole de fusion reposant sur exactement les mêmes modèles peut aboutir des résultats irréalistes et surestimés [Kaipio et Somersalo, 2007]. Afin d'atténuer ce qui est appelé en anglais *inverse crime*, du bruit doit être ajouté aux données fusionnées. Il est aussi possible de simuler des erreurs dans les modèles d'observation utilisés pour la génération des données d'observation et pour la fusion de ces données [Chávez, Alonzo-Atienza et Álvarez, 2013].

Lors de la fusion de données réelles, l'appréciation de la qualité de la fusion reste surtout visuelle, mais l'évaluation des performances peut aussi se faire de plusieurs manières. Tout d'abord, l'image fusionnée peut être dégradée spatialement et comparée à l'image hyperspectrale observée afin d'évaluer la distorsion spectrale induite par la fusion. Ensuite, l'image fusionnée peut être dégradée spectralement puis comparée à l'image multispectrale observée pour estimer les déformations spatiales causées par le processus de fusion. Enfin, l'évaluation peut être applicative : détection, classification, etc.

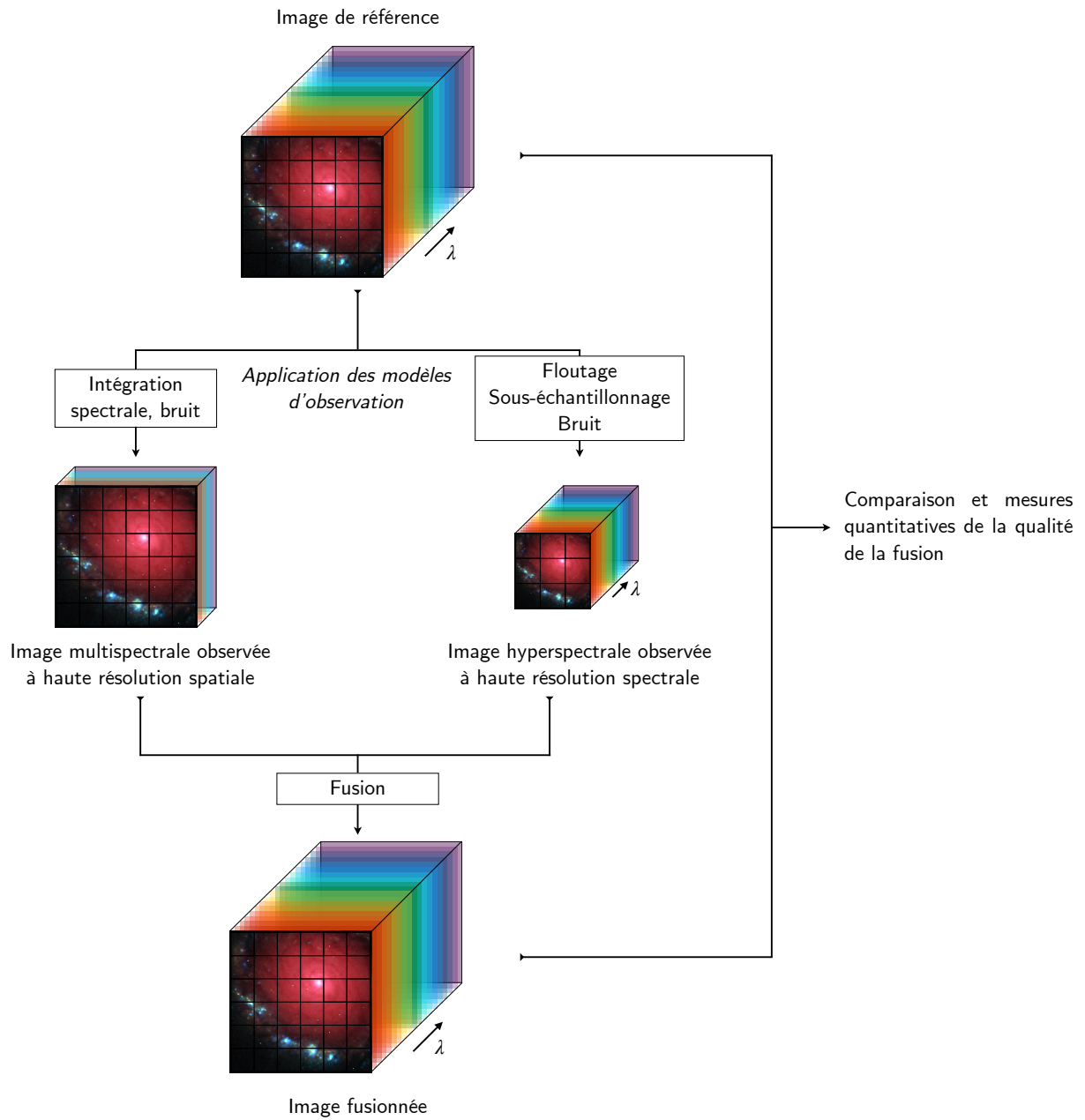


FIGURE 2.5 – Illustration du protocole de Wald pour la validation d'une méthode de fusion.

2.5 LIMITES DES MÉTHODES DANS LE CAS D'OBSERVATIONS ASTRONOMIQUES

Les techniques de fusion d'images d'observation de la Terre présentées dans ce chapitre ne sont pas appropriées pour la fusion de données d'observation astronomique de grande dimension. Le premier enjeu concerne la grande dimension des données, considérablement plus grande que la dimension des données rencontrées en télédétection. En effet, une image fusionnée à haute résolution spatiale et spectrale en observation de la Terre est généralement composée de quelques dizaines de milliers de pixels et au plus quelques centaines de points spectraux contre quelques dizaines de milliers de pixels et quelques milliers de points spectraux pour une image fusionnée en imagerie astrophysique.

De plus, la résolution spatiale des images de télédétection spatiale ou aérienne est principalement limitée par les turbulences atmosphériques [Pearson, 1976]. À l'inverse, la résolution spatiale des observations astronomiques spatiales est limitée par la diffraction. Cette limite dépend de la longueur d'onde observée et peut être estimée par le critère de Rayleigh [Rayleigh, 1880]. Ce critère définit la résolution angulaire $\theta = 1.220 \frac{\lambda}{D}$, où λ est la longueur d'onde de la lumière et D le diamètre de l'ouverture. En pratique, cette propriété physique signifie que les opérateurs associés aux flous spatiaux doivent être considérés comme spectralement variants quand il s'agit de reconstruire des images d'observation astronomique. Les opérateurs intervenant dans les modèles instrumentaux ne sont plus des multiplications matricielles. Le calcul de la fonction objectif du problème inverse de fusion ainsi que de son gradient sont alors très lourds. Cette problématique majeure accroît significativement la complexité des modèles directs d'observation et rend les méthodes de fusion discutées précédemment inadaptées. En effet, comme mentionné plus tôt dans la section 2.2, les modèles instrumentaux couramment utilisés pour les méthodes de fusion pour l'observation de la Terre reposent sur un flou spatial spectralement invariant. Depuis quelques années, le problème de restauration d'images astrophysiques par résolution de problèmes inverses prenant en compte des flous spatiaux spectralement variant est étudié. Soulez, Thiébaud et Denis, 2013 et Abi-rizk, Orioux et Abergel, 2020 effectuent une reconstruction de données hyperspectrales par résolution d'un problème inverse donc les termes d'attache aux données reposent sur une modélisation de flous spectralement variants. Hadj-Youcef *et al.*, 2020 proposent une restauration spatio-spectrale d'images multispectrales tenant également compte de flous spectralement variants.

Enfin, le problème de fusion de données hyperspectrales et multispectrales en observation astrophysique étant relativement récent, le manque cruel de données d'entraînement, i.e. des jeux de données composés de données observées multispectrales et hyperspectrales et de la vérité terrain de la fusion, nous empêche d'utiliser des techniques d'apprentissage automatique supervisé.

Ces travaux de thèse se positionnent dans le cadre de la fusion d'images astronomiques acquises par deux instruments embarqués sur le futur télescope spatial James Webb : l'imageur multispectral NIRC*am* et le spec-

tromètre NIRSpec. Cette thèse s'inscrit dans le programme d'observation prioritaire *Early Release Science* "PDRs4all : Radiative Feedback of Massive Stars" qui sera mené lors de la première vague des missions scientifiques du JWST en septembre 2022 [Berné *et al.*, 2017]. Nous proposons d'abord, dans le chapitre 3, un protocole générique, inspiré de [Wald, Ranchin et Mangolini, 2005], permettant de simuler des observations telles qu'elles seront fournies par deux instruments embarqués sur le JWST : l'imageur multispectral NIRCam et le spectromètre NIRSpec, à partir d'une image de référence à hautes résolutions spatiale et spectrale et de la modélisation des instruments considérés. Dans ces travaux, l'image de référence est synthétiquement créée afin de correspondre aux caractéristiques spatiales et spectrales d'une région de photodissociation. Ensuite, dans le chapitre 4, le processus de fusion est formulé comme la résolution d'un problème inverse régularisé, exploitant les modèles directs précédemment établis. En complément du terme d'attache aux données obtenu, un certain nombre de régularisations sont explorées. Pour surmonter le coût computationnel prohibitif lié aux flous spectralement variants, la complexité des modèles instrumentaux ainsi que la très grande taille des données, une implémentation rapide est proposée. Le problème de fusion est résolu dans le domaine de Fourier et dans un sous-espace en un temps raisonnable.

Simulation de données pour la fusion d'images HS et MS

3

Ce chapitre présente une des contributions de ces travaux de thèse. Il développe un cadre global dans le même esprit que le célèbre protocole proposé par Wald, Ranchin et Mangolini, 2005 (voir chapitre 2) pour évaluer les performances des algorithmes de fusion d'images en astronomie observationnelle. L'image de référence à haute résolution spatiale et spectrale a été synthétiquement créée pour correspondre aux propriétés spatiales et spectrales d'une région de photodissociation, un objet d'étude pour le projet d'observation PDRs4all avec le JWST. Pour simuler les images multi- et hyperspectrales, nous établissons un modèle d'observation précis respectant les spécifications de l'imageur de NIRC*am* et de l'IFU NIRS*pec*, embarqués sur le JWST. Ce modèle direct tient compte des particularités des instruments d'observation astrophysique, à savoir des flous spectralement variants pour chacun des instruments, et de leurs caractéristiques de bruit particulières.

3.1 SYNTHÈSE D'UNE SCÈNE DE PDR DE LA BARRE D'ORION

Cette section présente les aspects généraux du concept de région de photo-dissociation (en anglais *photodissociation region*, PDR) ainsi que la synthèse d'une image hyperspectrale à haute résolution spatiale d'une de ces régions située dans la Barre d'Orion, qui sera observée avec le JWST dans le cadre du projet ERS PDRs4all présenté dans le chapitre 1.

3.1.1 Région de photo-dissociation

Dans le milieu interstellaire, les photons provenant d'étoiles massives affectent la matière, qui peut être dans un état ionisé, atomique ou moléculaire, avec pour chaque phase une température et une densité différente. Les régions de transition entre les nuages moléculaires et les régions ionisées (H_{II}) sont appelées régions de photo-dissociation [Tielens et Hollenbach, 1985]. Ce concept de PDR est applicable à un grand nombre de régions dans l'Univers, comme, par exemple, la surface de disques protoplanétaires [Adams *et al.*, 2004; Gorti et Hollenbach, 2008; Champion *et al.*, 2017] ou bien les nébuleuses planétaires [Bernard-Salas et Tielens, 2005; Cox *et al.*, 2016]. Plus largement, les régions de formation stellaire et les régions de formation planétaire, ou même les galaxies à sursaut de formation d'étoiles, peuvent être étudiées comme des PDRs [Tielens, 2005; Goicoechea *et al.*, 2016; Joblin *et al.*, 2018; Fuente *et al.*, 2005].

Les observations de régions de photo-dissociation proches et vastes sont essentielles pour caractériser, le plus précisément possible, leurs propriétés

Contenu du chapitre

| | |
|---|-----------|
| 3.1 Synthèse d'une scène de PDR de la Barre d'Orion | 61 |
| Région de photo-dissociation | |
| Synthèse | |
| 3.2 Modélisation des instruments NIRC<i>am</i> et NIRS<i>pec</i> | 68 |
| NIRC <i>am</i> | |
| NIRS <i>pec</i> | |
| 3.3 Modélisation des bruits instrumentaux | 72 |
| Bruit de photon | |
| Bruit de lecture | |
| Rayons cosmiques, lumière zodiacale et bruit de fond | |
| 3.4 Simulation des données d'observation NIRC<i>am</i> et NIRS<i>pec</i> | 75 |
| 3.5 Bilan | 78 |

physiques et chimiques, aussi bien que pour tester les modèles standards. Ceci peut être effectué en utilisant des cartes spatio-spectrales de PDRs dans les raies d'émission fines principales de refroidissement des ions et des atomes, en particulier le C^+ et l'oxygène (O), ou des molécules comme le H_2 [Habart *et al.*, 2011; Bron, Le Bourlot et Le Petit, 2014], le CO [Joblin *et al.*, 2018], ou le HCO^+ [Goicoechea *et al.*, 2016]. À partir de ces observations et en tirant profit de modèles existant de ces régions de photo-dissociation (voir une comparaison de modèles de PDR dans Röllig *et al.*, 2007), des cartes de gradient de température, de densité électronique et de pression avec une haute résolution spatiale peuvent être extraites. Des observations de bandes rovibrationnelles et rotavibrationnelles du H_2 peuvent également donner des informations à propos des processus de formation du H_2 . De plus, de nombreuses études dédiées à l'évolution et à la photochimie des hydrocarbures aromatiques polycycliques (en anglais *polycyclic aromatic hydrocarbons*, PAH, famille de grandes molécules carbonées omniprésentes dans l'Univers) sont réalisées dans les PDRs (voir par exemple dans de récents exemples par Berné, Montillaud et Joblin, 2015; Peeters *et al.*, 2017).

Dans les régions de formation stellaire, les processus de chauffage par des photons ultraviolets extrêmes (EUV, *extreme ultraviolet*, $E < 120$ eV) et des ultraviolets lointains (FUV, *far ultraviolet*, $E < 13.6$ eV) donnent aux régions de photo-dissociation une structure chimique spécifique représentée schématiquement en figure 3.1. La couche de H_{II} est la région dominée par l'absorption des EUV et est composée de gaz ionisé. Sa température est d'environ 10^4 K et sa densité quelques centaines d'ions par cm^3 . Les photons ultraviolets lointains pénètrent plus profondément dans le nuage et chauffent la région neutre, qui est composée de gaz atomique neutre. La température ici est comprise entre quelques centaines et quelques milliers de Kelvin et sa densité entre $\sim 10^3$ et 10^5 atomes d'hydrogène par cm^3 . La frontière entre ces deux régions, où les protons et les électrons se recombinent, est appelée le front d'ionisation (notée IF, *ionization front*, dans la figure 3.1). Quand la quantité de photons ultraviolets lointains décroît suffisamment, les atomes d'hydrogène peuvent se combiner pour former des molécules de dihydrogène (H_2). Cette région est nommée nuage moléculaire. Sa température est comprise entre quelques dizaines et quelques centaines de Kelvins et sa densité entre 10^4 et 10^6 molécules par cm^3 . La zone limite où les atomes d'hydrogène se combinent pour former des molécules de dihydrogène, entre la région neutre et le nuage moléculaire, est appelée front de dissociation (notée DF, *dissociation front*, dans la figure 3.1).

3.1.2 Synthèse

À partir de ce modèle canonique, nous synthétisons une scène astrophysique des émissions infrarouges d'une région de photo-dissociation de la Barre d'Orion.

Cette scène consiste en un cube en 3 dimensions à haute résolution spatiale et spectrale, qui comprend 2 dimensions spatiales et 1 dimension spectrale. Pour des raisons pratiques, cette scène ne sera pas désignée par

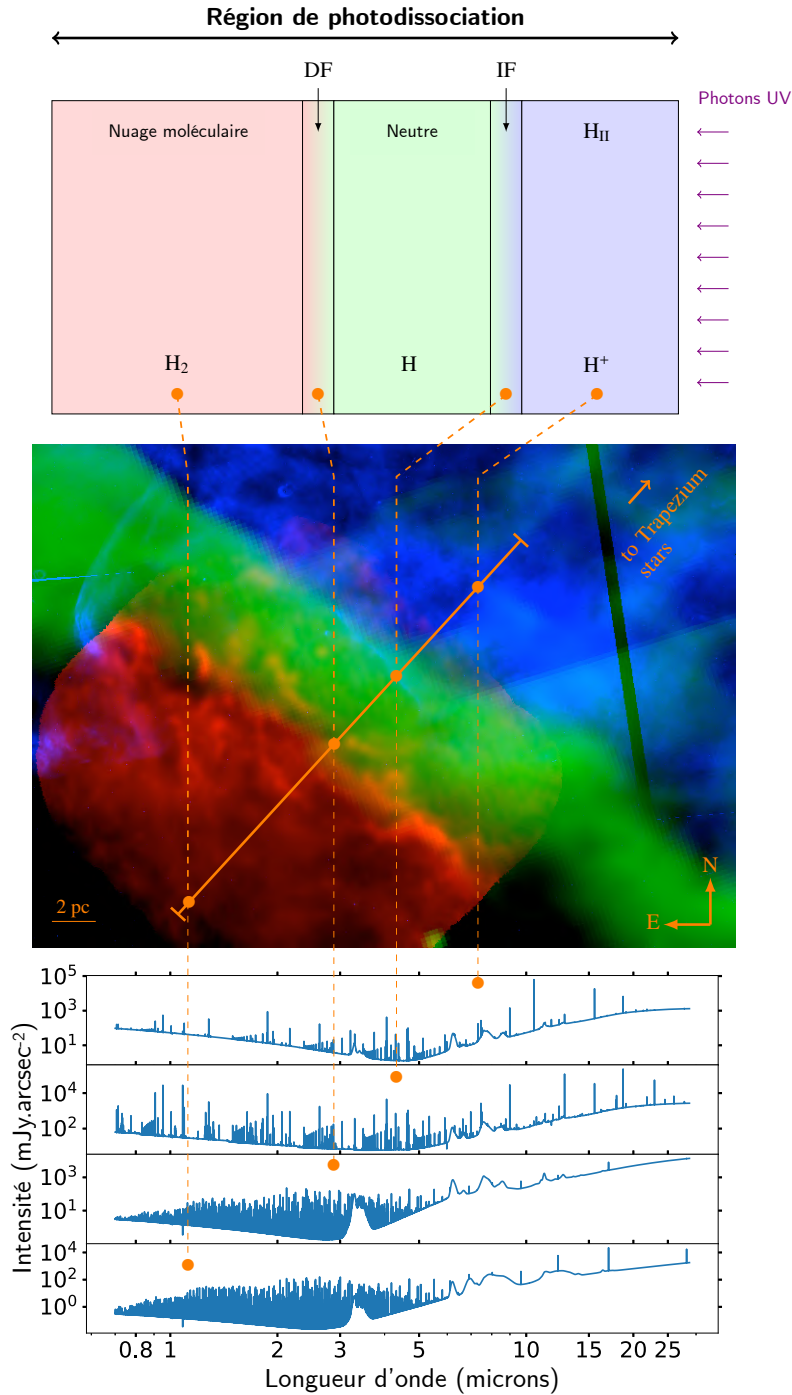


FIGURE 3.1 – Région de photo-dissociation. **Haut** : Morphologie d'une région de photo-dissociation synthétique avec, de droite à gauche, la région ionisée ou région H_{II} (H_{II}), le front d'ionisation (IF), la région neutre, le front de dissociation (DF) and le nuage moléculaire. **Milieu** : Région de photo-dissociation vue par le télescope spatial Hubble (en bleu) [Bally, 2015], le télescope spatial Spitzer [Fazio *et al.*, 2004] et ALMA (en rouge) [Goicoechea *et al.*, 2016]. **Bas** : 4 spectres synthétiques de 0.7 à 28 microns de 4 régions différentes de la région de photo-dissociation avec, de haut en bas la région ionisée, le front d'ionisation, le front de dissociation et le nuage moléculaire.

| | X | H | A |
|--|----------------------|------------------|----------------------|
| Étendue spectrale (μm) | 0.7-28.5 | 0.7-28.5 | – |
| Résolution spectrale ($R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$) | ~ 6000 | ~ 6000 | – |
| Champ de vue | $31'' \times 31''$ | – | $31'' \times 31''$ |
| Taille des pixels (arcsec^2) | 0.031×0.031 | – | 0.031×0.031 |
| Taille de la matrice (pixels) | 23000×10^6 | 23000×4 | 4×10^6 |

un objet 3D, mais plutôt par une matrice 2D dont les colonnes contiennent le spectre associé à une localisation spatiale. Plus précisément, \mathbf{X} est notée comme la matrice correspondant à la scène synthétique pour laquelle chaque colonne est un spectre à une position spatiale donnée. Cette image à haute résolution spatiale et spectrale est considérée comme étant le résultat du produit

$$\mathbf{X} = \mathbf{H}\mathbf{A} \quad (3.1)$$

où \mathbf{H} est une matrice des spectres élémentaires et \mathbf{A} est la matrice des cartes de leurs “poids” spatiaux correspondants. La taille, l’étendue spectrale et le champ de vue spatial de ces matrices sont détaillées dans la table 3.1. L’hypothèse sous-jacente à ce modèle est le mélange linéaire que constituent les données, c’est-à-dire que les spectres composant la scène sont des combinaisons linéaires de spectres provenant de régions typiques. Ce choix a été fait pour plusieurs raisons. Premièrement, il n’existe aucun modèle spatio-spectral de régions de photo-dissociation capable de fournir des spectres synthétiques avec toutes les signatures observables à des longueurs d’ondes allant des infrarouges proches aux moyens (bandes de PAHs, émission de la poussière et dispersion, etc.) et tenant compte de la complexité spatiale des textures généralement observées [Goicoechea *et al.*, 2016]. La seconde raison est que la linéarité du mélange est une hypothèse raisonnable pour des longueurs d’onde infrarouges moyens, où la plupart des émissions est optiquement mince, excepté autour de $9.7\mu\text{m}$ où l’absorption des silicates peut avoir un effet pour des grandes densités de colonne [Weingartner et Draine, 2001].

Dans le domaine des infrarouges proches étudié dans ces travaux, certaines émissions ne sont pas optiquement minces et, par conséquent, le modèle linéaire utilisé ici peut ne pas être totalement correct. Ceci s’applique en particulier à la forêt de raies du H_2 autour de $2\mu\text{m}$ issue des zones atomiques et moléculaires de la PDR (voir en bas de la figure 3.1). L’extinction par les poussières le long de la ligne de visée dans ces intervalles de longueurs d’onde peuvent aussi affecter l’intensité des raies par un facteur non linéaire. Globalement, cela implique que le modèle linéaire seul ne fournira pas un cube de données physiquement valide à chaque position spatiale et à chaque longueur d’onde (fournir de telles données serait une tâche difficile). Cependant, la statistique générale du jeu de données est plausible et c’est, à notre connaissance, le mieux que l’on puisse faire à ce stade et pour nos objectifs de test de fusion (chapitre 4).

Un avantage supplémentaire à définir \mathbf{X} comme un produit matriciel est sa facilité de stockage. En effet, la matrice entière est très grande et simplement impossible à stocker en mémoire. En adoptant à la place une

TABLE 3.1 – Propriétés de la scène synthétique de la Barre d’Orion \mathbf{X} présentée figure 3.10 et les matrices sous-jacentes des spectres élémentaires et des abondances spatiales, notées respectivement \mathbf{H} et \mathbf{A} .

telle décomposition, uniquement les facteurs \mathbf{H} et \mathbf{A} ont besoin d'être stockés, réduisant de ce fait significativement la mémoire occupée. Nous décrivons maintenant le choix des signatures élémentaires dans \mathbf{H} et leur répartition spatiale dans \mathbf{A} .

Spectres élémentaires \mathbf{H} Les spectres élémentaires qui composent la matrice \mathbf{H} ont été obtenus dans le cadre du programme ERS 1288 [Berné *et al.*, 2017]. Une description plus détaillée de leur calcul sera fournie dans un article en cours d'écriture à la date de rédaction de ce manuscrit ayant pour but de décrire les objectifs scientifiques de ce programme ERS 1288 [Berné *et al.*, s.d.]. La matrice \mathbf{H} est composée de $k = 4$ spectres correspondant à quatre zones d'une région de photodissociation comme décrit dans la figure Fig. 3.1 : la région H_{II} , le front d'ionisation, le front de dissociation et le nuage moléculaire. Ces spectres ont été calculés individuellement pour chaque région, utilisant le code PDR de Meudon pour la contribution des raies atomiques et moléculaires [Le Petit *et al.*, 2006], le code CLOUDY pour le gaz ionisé [Ferland *et al.*, 1998], le modèle PAHTAT [Pilleri *et al.*, 2012] et les résultats de la décomposition de Foschino, Berné et Joblin, 2019 pour les émissions des PAHs et le modèle DUSTEM pour la contribution du continuum de la poussière [Compiègne *et al.*, 2011]. Les paramètres physiques utilisés pour ces modèles correspondent à ceux de la Barre d'Orion, qui est très étudiée. La calibration absolue des spectres totaux obtenus par la somme des 4 différentes régions a été validée à l'aide d'observations existantes de la Barre d'Orion (ISO, Spitzer), de manière à confirmer que le spectre total est réaliste en terme d'unités de flux. Cependant, nous insistons sur le fait que les spectres individuels des différentes régions ont été obtenus en utilisant des hypothèses simples, en particulier à propos des propriétés de la poussière (e.g. mêmes propriétés dans toutes les régions), des transferts de radiation et du calcul des raies d'émission, qui ne sont probablement pas réalistes. Le rapport entre les raies du gaz et le continuum de la poussière est certainement surestimé d'un facteur important (≥ 10) dans les régions atomiques et moléculaires à cause d'une sous-estimation de l'émission de la poussière et une sur-estimation des raies du H_2 non corrigées pour l'extinction. Comme mentionné ci-dessus, bien que ces imprécisions pourraient être un problème quant à l'interprétation des données synthétiques d'un point de vue physique, ce n'est pas une limitation pour l'exercice de la fusion de données puisque les propriétés statistiques générales sont très probablement raisonnables.

Cartes d'abondances \mathbf{A} Dans la mesure où les spectres de \mathbf{H} portent l'information de flux, les cartes d'abondance spatiale dans la matrice \mathbf{A} correspondent à des textures normalisées entre 0 et 1. Dans ces travaux, les cartes sont dérivées d'observations existantes provenant du télescope spatial Hubble (en anglais HST, *Hubble Space Telescope*) et du télescope terrestre ALMA (*Atacama Large sub-Millimeter Array*). Les images ont subi une étape de rotation de -48 degrés pour obtenir un plan parallèle rappelant la morphologie des structures décrites dans la figure 3.1. Cette configuration a été choisie parce que le champ de vue des observations prévues actuellement par le programme d'observation ERS 1288 seront

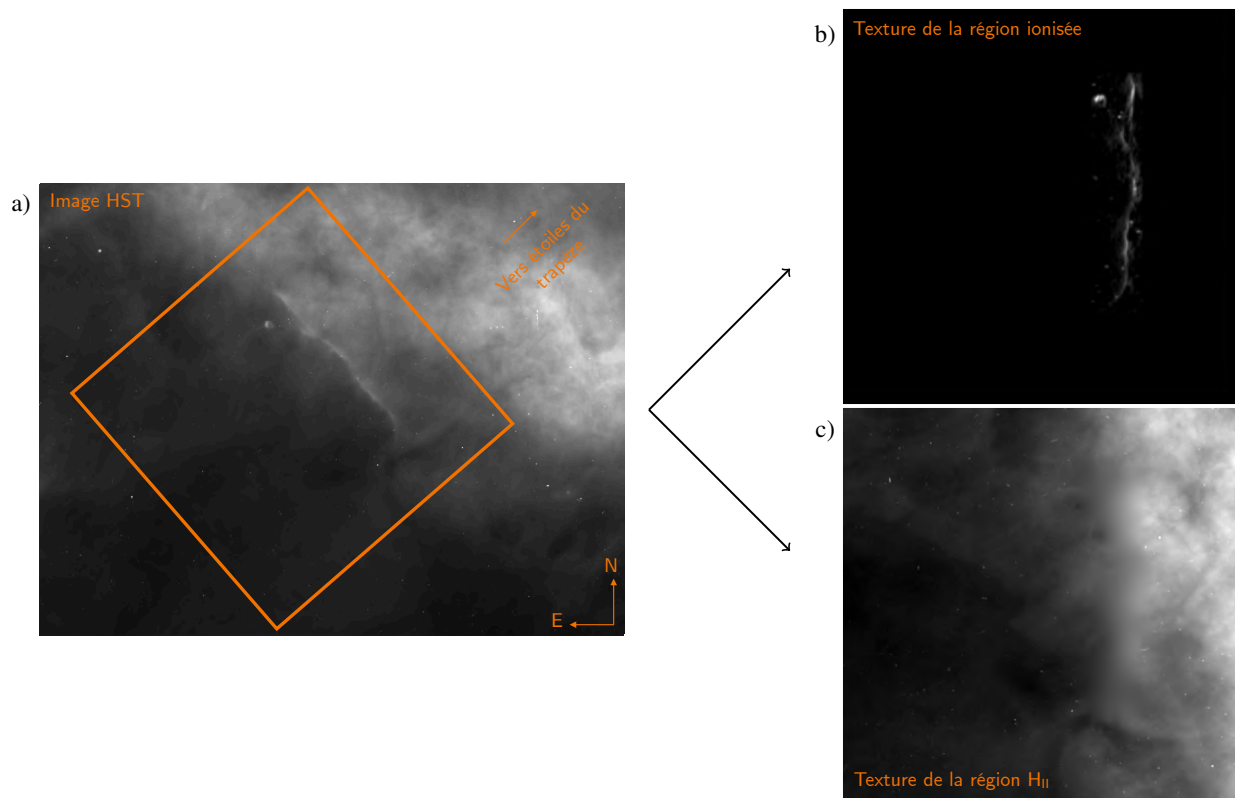
perpendiculaires aux front d'ionisation et de dissociation, correspondant finalement à une coupe horizontale dans les images pivotées (voir chapitre 1). Le champ de vue choisi pour la synthèse des cartes texturées à partir des observations est de taille 31×31 arcsec², centré aux coordonnées RA = 5 :35 :20.0774, DEC = -5 :25 :13.785 dans Orion. Les textures associées avec les quatre composantes spectrales sont décrites par la suite en correspondance avec leur région représentée.

Front d'ionisation & région H_{II} Pour construire une représentation spatiale réaliste de la région H_{II} et du front d'ionisation, nous avons recours à une image de la Barre d'Orion obtenue par un filtre à bande étroite centrée à 656nm (raie d'émission du H α) de l'instrument WFC3 à bord du HST (figure 3.2). Cette image a été prise dans le cadre d'une proposition d'observation menée par Bally, 2015. Cette image fournit une vue réaliste de la morphologie de la région H_{II} et du front d'ionisation combinés [Tielens, 2005].

Après recadrage et rotation, le front d'ionisation et la région H_{II} dans l'image observée sont séparés. Comme la brillance du front d'ionisation est comparable aux zones les plus brillantes de la région H_{II}, un seuillage de l'image brute n'isole pas assez efficacement le front d'ionisation du nuage de plasma. Cependant, à l'inverse de la région H_{II}, le front apparaît comme une ligne prononcée où le gradient de l'image est fort. Par conséquent, les pixels de l'image appartenant au front d'ionisation peuvent être facilement retrouvés à partir du gradient horizontal de l'image, qui peut également être calculé à l'aide d'un filtre de Sobel. Ainsi, ce dernier est seuillé pour créer un masque autour des pixels ayant les plus forts gradients. Les plus petites composantes connexes de ce masque (inférieures à 10000 pixels) sont enlevées pour éliminer les fortes valeurs de gradient liées à des petits objets dans l'image et non au front d'ionisation. Finalement, l'image originale HST est multipliée pixel à pixel par ce masque et légèrement lissée par un noyau gaussien de largeur à mi-hauteur de 4.7 pixels. Cette démarche permet d'extraire la contribution du front d'ionisation uniquement et l'image du front d'ionisation est ainsi obtenue (voir figure 3.2).

Une fois le front d'ionisation supprimé de l'image originale, l'espace vide est agrandi par une dilatation morphologique utilisant un disque de 20 pixels de diamètre et comblé en utilisant une technique d'inpainting standard [Damelin et Hoang, 2018]. Ce processus complète les parties manquantes d'une image en sélectionnant des textures similaires disponibles ailleurs dans l'image. Le résultat est montré dans la figure 3.2. Chacune des images sont ensuite sur-échantillonnées à la résolution de l'imageur de l'instrument NIRCcam du JWST avec une interpolation par splines bi-cubiques avec un facteur de sur-échantillonnage de 1.25.

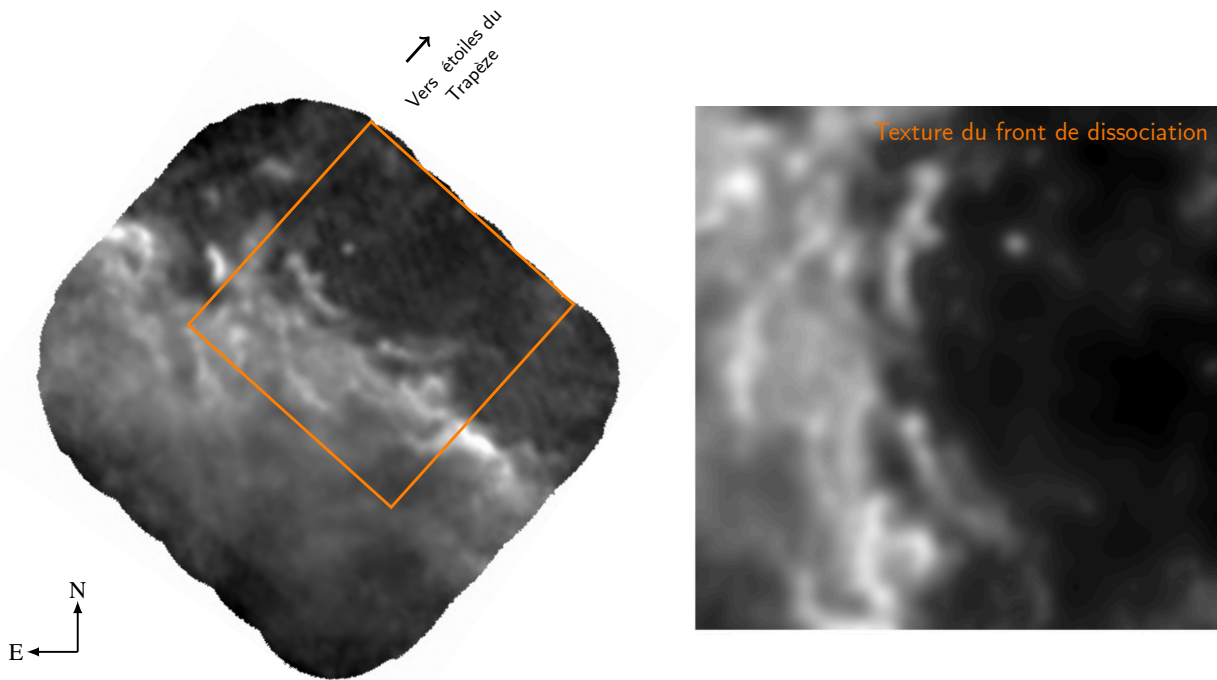
Front de dissociation La carte de texture liée au front de dissociation provient d'une image d'émission de HCO⁺(4-3) observée par Goicoechea et al., 2016 avec ALMA, voir figure 3.3. D'après les auteurs, cette carte identifie bien la transition H/H₂ et est, par conséquent, utilisée ici pour définir le front de dissociation de cette PDR.



Après rotation et recadrage, la région texturée dans la partie droite de la zone choisie est extraite par seuillage. Elle est ensuite légèrement lissée par un noyau gaussien de largeur à mi-hauteur de 2.3 pixels. La partie restante, moins structurée, est beaucoup plus lissée grâce à un noyau gaussien de largeur à mi-hauteur 9.4 pixels pour éliminer les bandes bruitées visibles dues au processus d'acquisition des données de ALMA. L'image lissée est ensuite sur-échantillonnée à la résolution de l'imageur de l'instrument NIRC*am* à l'aide d'une interpolation par des splines bi-cubiques avec un facteur de sur-échantillonnage de 5. L'image normalisée résultante est affichée dans la figure 3.3, à droite.

Nuage moléculaire La carte de textures du nuage moléculaire a également été extraite d'une image ALMA [Goicoechea *et al.*, 2016]. La raie d'émission du CO (3-2) est usuellement utilisée comme un traceur de nuage moléculaire. Comme expliqué précédemment, la zone dans le carré orange de la figure 3.4, à gauche, a été choisie pour correspondre aux cartes de textures déjà créées. Les bandes dues au processus d'acquisition des données ALMA sont clairement apparentes sur tout le champ de vue. Ainsi, après rotation, l'image est fortement lissée à l'aide d'un noyau gaussien de largeur à mi-hauteur de 11 pixels afin d'éliminer ces bandes non désirées, identifiées comme du bruit. L'image lissée est finalement sur-échantillonnée à la résolution de l'imageur de l'instrument NIRC*am* par interpolation avec des splines bi-cubiques (avec un facteur de sur-échantillonnage de 5) et normalisées. La carte de textures résultante est

FIGURE 3.2 – **a)** : image HST de raie d'émission de H_{α} à 656 nm H_{α} de la Barre d'Orion [Bally, 2015] et le champ de vue retenu (carré orange). **b)** : Texture du front d'ionisation extraite. **c)** : Texture de la région H_{II} extraite. Échelle normalisée (noir : 0 ; blanc : 1), centré en RA=5 :35 :20.0774, DEC=-5 :25 :13.785



montrée dans la figure 3.4, à droite.

3.2 MODÉLISATION DES INSTRUMENTS NIRCAM ET NIRS-PEC

Dans cette section, nous décrivons un modèle mathématique simple de deux instruments à bord du JWST, à savoir l'imageur de NIRCcam et l'unité à intégrale de champ (en anglais *integral field unit*, IFU) de NIRS-pec. Une modélisation plus avancée a été précédemment menée par les équipes en charge de l'outil Exposure Time Calculator (ETC) du JWST au sein du *Space Telescope Science Institute* (STScI) [Pontoppidan *et al.*, 2016]. L'ETC est un outil pour astronome qui permet de simuler l'acquisition des données et de calculer des rapports signal à bruit pour tous les modes d'observation et instruments du JWST. Cet outil modélise entièrement le processus d'acquisition (groupes, rampes d'intégration) et le bruit pour des scènes astrophysiques composées de spectres complexes et quelques sources ponctuelles ou étendues (ellipses). Cependant, l'ETC montre deux limites majeures dans le contexte de ces travaux de thèse, c'est-à-dire dans une perspective de fusion de données. Premièrement, il n'existe pas de version stable de l'ETC qui puisse fournir des mesures simulées pour des scènes 3D complexes spatialement et spectralement comme la scène décrite dans la section 3.1. La seconde raison est que les modèles directs impliqués dans la méthode de fusion développée dans ce manuscrit doivent être explicites et donc moins avancés que ceux proposés par l'ETC. Par conséquent, nous proposons des modèles directs explicites et simples exploitant l'information disponible dans l'ETC comme une référence. Ces modèles associés aux deux instruments considérés, complétés par une modélisation du bruit pertinente, sont décrits par la suite.

FIGURE 3.3 – **Gauche** : image ALMA de raie d'émission de $\text{HCO}^+(4-3)$ dans la Barre d'Orion [Goicoechea *et al.*, 2016] et le champ de vue retenu (carré orange). **Droite** : Texture normalisée pour la carte d'abondance du front de dissociation (noir=0, blanc=1).

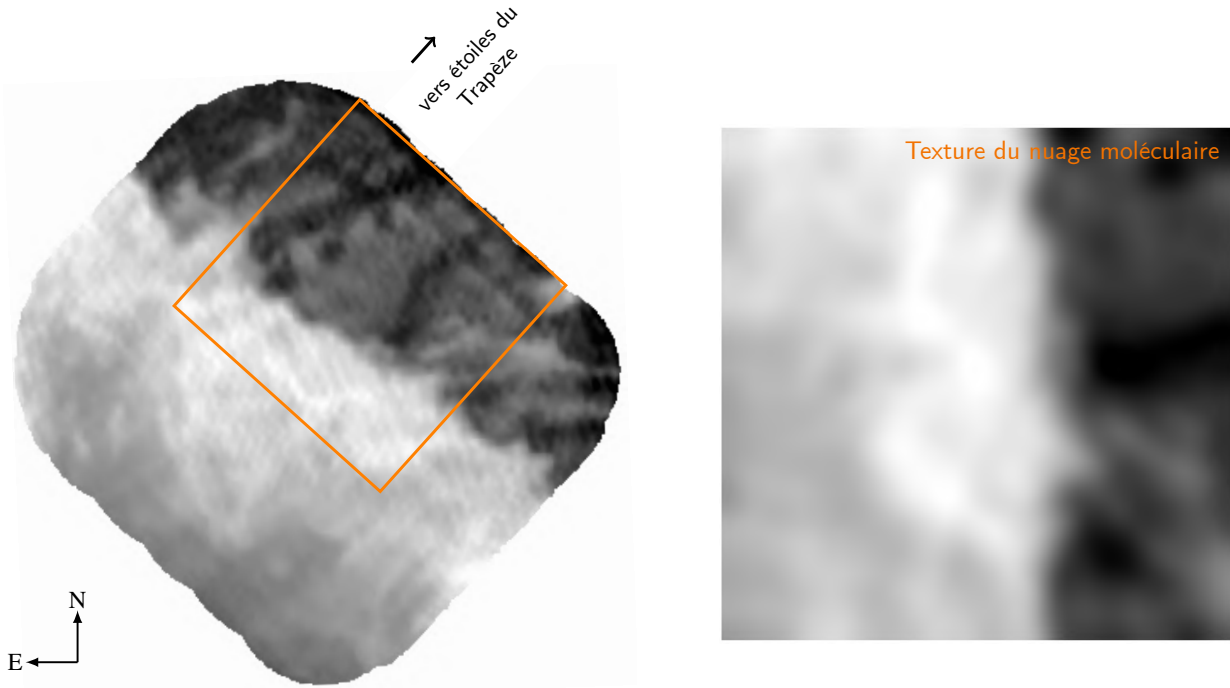


FIGURE 3.4 – **Gauche** : image ALMA de raie d'émission de CO 3-2 dans la Barre d'Orion [Goicoechea *et al.*, 2016] et le champ de vue retenu (carré orange). **Droite** : Carte d'abondance des texture normalisées du nuage moléculaire (noir=0, blanc=1).

3.2.1 NIRC*am*

L'imageur de la caméra des infrarouges proches NIRC*am* à bord du JWST observera l'espace de 0.6 à 5 microns avec trois modes d'acquisition possibles : l'imagerie, la coronagraphie et la spectroscopie 'slitless'. Le mode d'observation étudiée ici est l'imagerie. L'imageur fournira des images multispectrales sur de larges champs de vue ($2.2' \times 5.1'$, séparés en deux modules adjacents, eux-mêmes compartimentés) comme illustré dans la figure 3.5. Cet instrument couvre les longueurs d'ondes de 0.6 à 5 microns simultanément à travers 2 canaux d'acquisition, un canal dédié aux courtes longueurs d'onde (en anglais *short wavelength*, SW) entre 0.6 et 2.3 microns et un canal dédié aux plus longues longueurs d'onde (en anglais *long wavelength*, LW) entre 2.4 et 5 microns, via $l_m = 29$ filtres à bandes très large, large, moyenne, et étroite. Chaque canal, SW ou LW, acquiert des images composées de p_m pixels avec une taille de pixel de $0.031 \times 0.031 \text{ arcsec}^2$ et $0.063 \times 0.063 \text{ arcsec}^2$, respectivement. Leurs caractéristiques principales sont résumées dans la table 3.2.

TABLE 3.2 – Caractéristiques techniques principales de l'imageur de NIRC*am* et de l'IFU de NIRS*pec* considérés dans ces travaux.

| Canal | Imageur NIRC <i>am</i> | | IFU NIRS <i>pec</i> |
|--|--------------------------------|--------------------------------|---------------------|
| | SW | LW | |
| Étendue spectrale (μm) | 0.6-2.35 | 2.35-5 | 0.6-5.3 |
| Résolution spectrale ($R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$) | $\sim 1-100$ | $\sim 1-100$ | ~ 3000 |
| Nombre de points spectraux | 13 | 16 | ~ 12000 |
| Champ de vue | $2.2' \times 5.1'$ (with gaps) | $2.2' \times 5.1'$ (with gaps) | $3'' \times 3''$ |
| Taille des pixels (arcsec^2) | 0.031×0.031 | 0.063×0.063 | 0.1×0.1 |
| Champ de vue (pixels) | $8 \times 2040 \times 2040$ | $2 \times 2040 \times 2040$ | 30×30 |

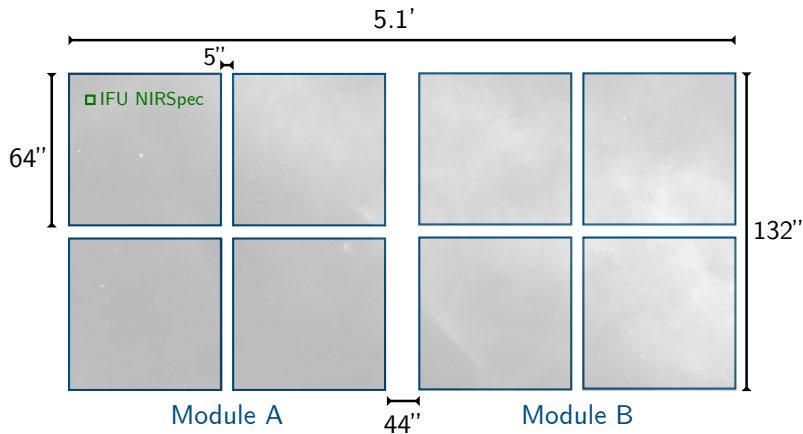
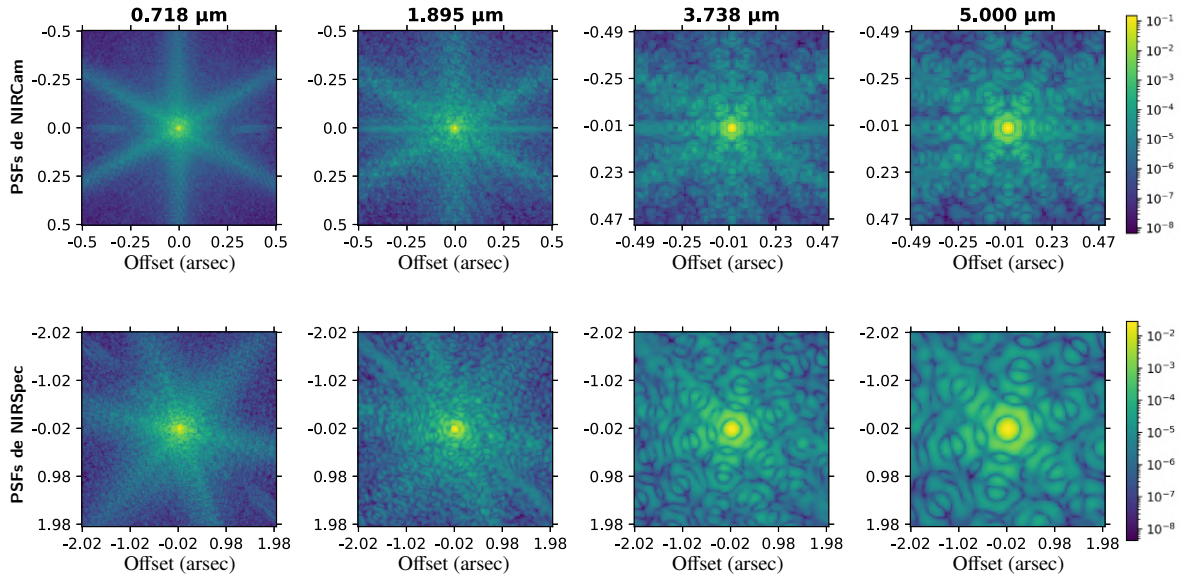


FIGURE 3.5 – Champ de vue NIR-Cam de taille $2.2' \times 5.1'$, séparés en deux modules A et B. Pour comparaison, le champ de vue de l'IFU de NIRSpec ($3'' \times 3''$) est affiché en haut à droite, en vert. Image d'illustration en transparence : Barre d'Orion [Bally, 2015].

Le modèle mathématique proposé de l'imageur de NIRCam détaillé ici reflète le chemin réel de la lumière à travers le télescope et l'instrument et les distorsions spatiales et spectrales correspondantes. Le système optique du télescope et de l'instrument, plus spécifiquement leurs miroirs, perturbe la lumière incidente et son chemin. Les effets sur le détecteur et, par conséquent, sur l'image observée est un étalement spatial de la lumière provenant de la scène observée, aboutissant à un floutage des détails spatiaux. Ce flou dépend de la longueur d'onde λ (en mètres) de la lumière incidente et du diamètre D (en mètres) du miroir primaire du JWST de telle sorte que la résolution θ (en radians), i.e. la capacité à séparer deux points adjacents d'un objet, est limité par la diffraction : $\theta = 1.22 \frac{\lambda}{D}$. Sous les longueurs d'onde limites de Nyquist de 2 microns pour le canal SW et de 4 microns pour le canal LW, les détecteurs de l'imageur de NIRCam sous-échantillonnent ce flou spatial. L'instrument ne fournit donc pas une partie substantielle de l'information spatiale qui existe dans le plan focal de l'imageur de NIRCam. Pour contrer ce phénomène, des stratégies d'observation existent et consistent à effectuer des expositions successives de la scène d'intérêt avec des décalages de pointage sous-pixelliques. Dans ces travaux, nous ne modélisons pas une telle stratégie, conformément aux observations prévues dans PDRs4all [Berné *et al.*, s.d.]. Après l'optique et les miroirs, la lumière traverse les filtres passe-bande définis pour des intervalles de longueurs d'onde spécifiques.

Ces deux dégradations principales, c'est-à-dire le flou spatial et le filtrage spectral, peuvent être exprimées à l'aide d'opérations mathématiques analytiques successivement appliquées à la scène astrophysique \mathbf{X} . Premièrement, l'effet d'étalement de la lumière due au système optique est modélisé par une série de convolutions spatiales en 2 dimensions spectralement variantes, notée $\mathcal{M}(\cdot)$. Les fonctions d'étalement du point (en anglais *point spread function*, PSF) correspondantes, calculées avec l'outil disponible en ligne *webbpsf* [Perrin *et al.*, 2012], sont dépendantes en longueur d'onde et la largeur à mi-hauteur de la tâche d'étalement augmente linéairement avec la longueur d'onde. Cette dépendance est illustrée dans la figure 3.6 (en haut), qui expose les motifs significativement différents de quatre PSFs associées à quatre longueurs d'onde particulières.



L'étape suivante de filtrage spectral, dégradant la résolution spectrale de la scène, peut être modélisée comme une multiplication avec les fonctions de transmission des filtres de l'imageur NIRCcam [Space Telescope Science Institute (STScI), 2017a], dont les gabarits sont représentés, pour chaque canal, dans la figure 3.7. Cette opération peut être formulée avec un produit par la matrice \mathbf{L}_m , dont les lignes sont définies par ces fonctions de transmission. Ainsi, l'image multispectrale non bruitée $\bar{\mathbf{Y}}_m$ composée de $l_m (\ll l_h)$ bandes spectrales de p_m pixels peut s'écrire comme

$$\bar{\mathbf{Y}}_m = \mathbf{L}_m \mathcal{M}(\mathbf{X}) \quad (3.2)$$

Nous soulignons qu'une approche similaire a été adoptée par Hadj-Youcef *et al.*, 2018 pour formuler un modèle direct associé à l'imageur de l'instrument MIRI du JWST.

FIGURE 3.6 – PSF calculées avec *webbpsf* [Perrin *et al.*, 2012] de 0.718 à 5.000 microns de l' imageur de NIRCcam (1ère ligne) et de l'IFU de NIRSPEC (2nde ligne) (échelle de couleur logarithmique).

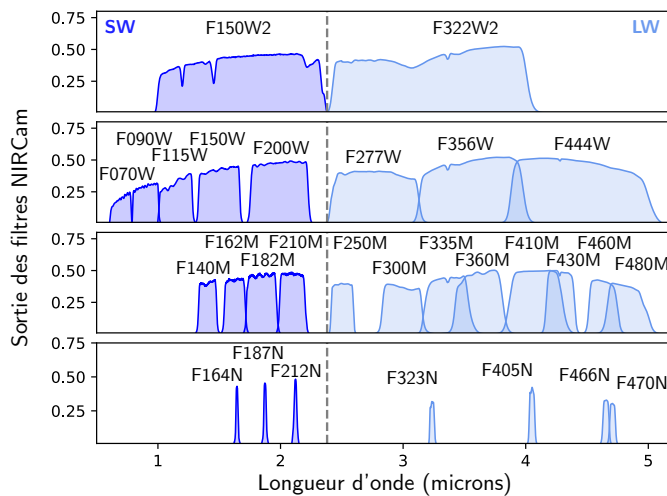


FIGURE 3.7 – Gabarit des 29 filtres de l'imageur de NIRCcam pour chacun des canaux SW (en bleu foncé) et LW (en bleu clair).

3.2.2 NIRSpec

L'IFU du spectrographe des infrarouges proches NIRSpec embarqué sur le JWST effectuera de la spectroscopie de 0.6 à 5.3 microns à haute ($R \sim 3000$), moyenne ($R \sim 1000$) ou basse ($R \sim 100$) résolution spectrale à travers 4 modes d'observation. Le programme d'observation ERS 1288 proposé par Berné *et al.*, 2017 s'appuiera sur l'unité à intégrale de champ avec une configuration haute résolution. Cette unité fournira des images spectroscopiques (autrement appelées hyperspectrales) sur de petits champs de vue ($3 \times 3 \text{ arcsec}^2$). L'acquisition des données sur ces longueurs d'onde est couverte par différentes combinaisons de filtres et disperseurs avec des caractéristiques similaires. Bien qu'inédit, l'échantillonnage spatial de l'IFU est environ 9 fois moins bon que celui de l'imageur de NIRC*am* avec une taille de pixel de $0.1 \times 0.1 \text{ arcsec}^2$. Les caractéristiques principales de l'IFU de NIRSpec sont résumées et comparées à celles de l'imageur de NIRC*am* dans la table 3.2.

Comme pour l'imageur de NIRC*am*, le trajet de la lumière de la scène observée à travers le télescope et l'instrument jusqu'au détecteur peut être formulé à l'aide d'opérations mathématiques simples tout en préservant la justesse physique du modèle. Premièrement, la lumière est étalée par le système optique de manière dépendante de sa longueur d'onde et de la taille du miroir primaire du JWST. Ensuite, le passage de la lumière à travers le système filtre-disperseur l'atténue. Finalement, cette lumière arrive sur le détecteur, qui peut fournir environ 12000 spectres sur une étendue spatiale de 30 pixels par 30 pixels.

L'effet de distorsion du système optique du télescope et de l'instrument sur la lumière est, comme pour l'imageur de NIRC*am*, modélisé par une série de convolutions spatiales en 2 dimensions notée $\mathcal{H}(\cdot)$, avec les PSFs illustrées dans la figure 3.6 (en bas). L'atténuation de la lumière induite par le système filtre-disperseur est une multiplication matricielle par \mathbf{L}_h , dont la diagonale est la combinaison des deux fonctions de transmission [Space Telescope Science Institute (STScI), 2017b]. Au delà de l'atténuation, des espaces physiques entre les détecteurs de l'IFU de NIRSpec créent des 'trous' dans les spectres. Ces trous sont modélisés par une transmission nulle aux longueurs d'ondes correspondantes. La réponse spatiale du détecteur est interprétée comme un opérateur de sous-échantillonnage \mathbf{S} , qui conserve un pixel sur une aire de $0.1 \times 0.1 \text{ arcsec}^2$, après moyennage des pixels sur cette aire. Finalement, l'image hyperspectrale non-bruitée $\bar{\mathbf{Y}}_h$ composée de l_h bandes spectrales et de $p_h \ll p_m$ pixels peut s'écrire comme

$$\bar{\mathbf{Y}}_h = \mathbf{L}_h \mathcal{H}(\mathbf{X}) \mathbf{S}. \quad (3.3)$$

3.3 MODÉLISATION DES BRUITS INSTRUMENTAUX

Cette section modélise les bruits associés à l'imageur de NIRC*am* et l'IFU de NIRSpec, qui altèrent les images non bruitées $\bar{\mathbf{Y}}_m$ et $\bar{\mathbf{Y}}_h$ pour produire les images simulées \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h respectivement. Les modèles de bruit reposent sur les hypothèses les plus fréquemment utilisées sur la nature du bruit en observation astrophysique spatiale et plus spécifiquement

sur les propriétés des détecteurs du JWST. Le modèle proposé ici néglige quelques sources de bruit qui sont plus difficiles à caractériser, par exemple celles reliées aux rayons cosmiques et au bruit de fond. Une modélisation plus réaliste et exhaustive est fournie par le STScI via l'ETC [Pontoppidan *et al.*, 2016].

3.3.1 Bruit de photon

Comme les détecteurs sont des dispositifs de comptage de photons, la nature particulière de l'émission lumineuse entraîne classiquement des observations qui suivent une distribution poissonnienne $\mathcal{P}(\bar{y})$, dont la moyenne est égale au nombre de photons \bar{y} . Dans un régime à fort flux, c'est-à-dire quand le compte de photons \bar{y} est typiquement plus grand que 20, ce processus de Poisson peut être approché par un bruit gaussien additif $\mathcal{N}(\bar{y}, \bar{y})$ dont la moyenne et la variance sont égales au nombre de photons \bar{y} . Dans le contexte particulier de ces travaux, nous supposons que ces observations suivent un régime à fort flux. Cette hypothèse est raisonnable notamment pour des sources très brillantes telles que la Barre d'Orion. Par conséquent, en pratique, le flux incident \bar{y} dans un pixel et une bande spectrale donnée sera corrompu par une variable aléatoire qui suit $\mathcal{N}(\bar{y}, \bar{y})$. Ce modèle est communément utilisé pour définir le bruit dans les images d'observation astrophysique [Starck et Murtagh, 2006].

3.3.2 Bruit de lecture

La source principale de bruit provenant des détecteurs est un bruit de lecture, qui est modélisé par un bruit gaussien additif et centré. La corrélation entre deux mesures à des emplacements spatiaux et spectraux donnés de l'image multibande observée peut être caractérisée précisément après dépliage du cube de données 3D sur le plan du détecteur (2D). En effet, le JWST et la documentation de l'ETC [Pontoppidan *et al.*, 2016] fournissent une série de matrices reflétant les corrélations attendues entre des mesures à des positions spécifiques dans le plan des détecteurs associés à l'imageur de NIRC*am* et de l'IFU de NIRS*pec*. Un exemple de matrice de corrélation utilisée dans ces travaux est montré dans la figure 3.8. Ces matrices de corrélation sont des fonctions des caractéristiques intrinsèques du schéma d'acquisition des données, comme le temps d'intégration, le nombre de trames et de groupes [Rauscher *et al.*, 2007]. Pour une configuration expérimentale d'acquisition donnée, la matrice de covariance du bruit de lecture gaussien additif peut être calculée après une réorganisation directe des corrélations. De manière alternative, ce bruit gaussien peut être ajouté à l'image multibande dépliée avec une matrice de covariance directement définie par les corrélations exprimées dans le plan du détecteur et spécifiées par Pontoppidan *et al.*, 2016. Des informations complémentaires à propos du bruit de lecture de l'imageur de NIRC*am* et de l'IFU de NIRS*pec* sont données dans ce qui suit.

*Bruit de lecture de l'imageur de NIRC*am** Les bandes spectrales de l'image multispectrale sont acquises successivement de telle manière que l'image

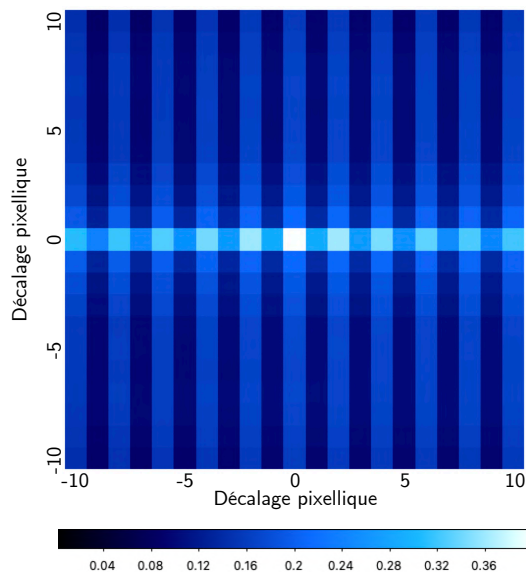


FIGURE 3.8 – Matrice de corrélation des détecteurs de l'imageur de NIRCcam et de l'IFU de NIRSpec utilisée pour générer la matrice de covariance du bruit de lecture de ces deux instruments. Cette matrice dépend du schéma d'acquisition données (nombre de trames et groupes de lecture).

incidente sur le détecteur correspond à une image en deux dimensions spatiales à une certaine position spectrale. De ce fait, le bruit de lecture est uniquement spatialement corrélé et peut être généré pour chaque bande spectrale indépendamment. Finalement, la matrice de covariance qui décrit la corrélation spatiale du bruit gaussien additif est calculée grâce aux motifs de corrélation dans le plan du détecteur discutés ci-dessus.

Bruit de lecture de l'IFU de NIRSpec Contrairement au détecteur de l'imageur de NIRCcam, la plan du détecteur de l'IFU de NIRSpec consiste en une image à 1 dimension spatiale et 1 dimension spectrale. Plus précisément, le système optique de l'IFU de NIRSpec est composé d'un éventail de miroirs qui éminent le champ de vue observé en tranches épaisses de 0.1 arcsec (correspondant à la taille du pixel de l'IFU de NIRSpec) pour les réaligner en une seule dimension le long d'un axe du détecteur [Space Telescope Science Institute (STScI), 2017c]. Pour chaque pixel spatial, son spectre est dispersé le long du second axe du détecteur. Ce principe d'acquisition des données de NIRSpec est illustré dans la figure 3.9. Par conséquent, le bruit de lecture correspondant n'est pas indépendant d'une bande spectrale à l'autre. Ainsi, comme expliqué précédemment, ce bruit peut être généré à l'aide d'une matrice de covariance donnée par les caractéristiques de la configuration d'acquisition des données sur une version dépliée de l'image hyperspectrale observée après projection sur le plan du détecteur.

3.3.3 Rayons cosmiques, lumière zodiacale et bruit de fond

Selon la documentation du JWST [Kelsall *et al.*, 1998; Pontoppidan *et al.*, 2016], les émissions du nuage zodiacal du système solaire et de la voie lactée ainsi que l'émission provenant du télescope lui-même sont considérées comme négligeables pour les sources très brillantes jusqu'à 5 microns. De plus, la chaîne de traitement du JWST est conçue pour

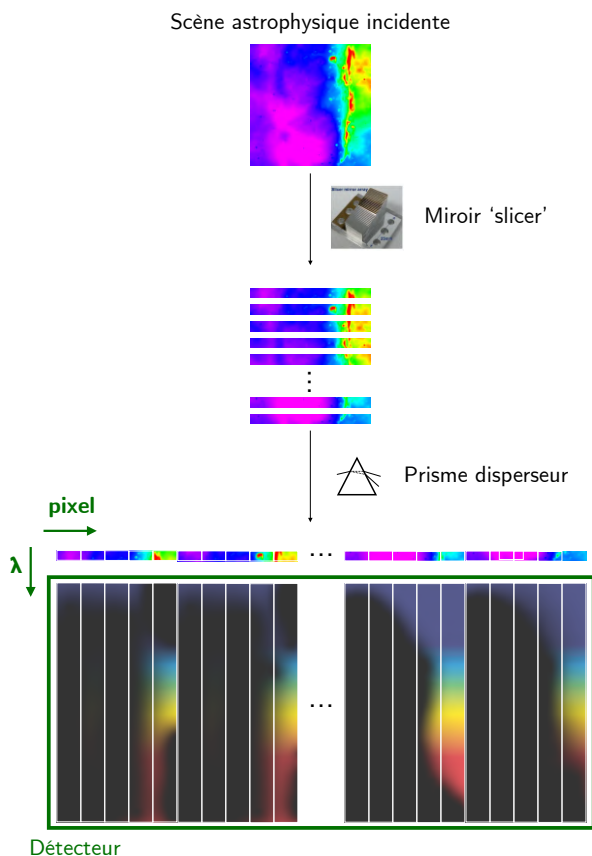


FIGURE 3.9 – Principe d'acquisition de données de l'IFU de NIRSPEC.

éliminer 99% des effets des impacts des rayons cosmiques. Ces sources de bruit sont donc négligées dans ces travaux. Nous soulignons qu'un modèle complet du bruit de fond et des impacts des rayons cosmiques a été développé par le STScI pour l'ETC.

3.4 SIMULATION DES DONNÉES D'OBSERVATION NIRCAM ET NIRSPEC

| Canal | \mathbf{Y}_m | | \mathbf{Y}_h |
|-------------------------------------|--------------------|------------------|------------------|
| | SW | LW | |
| Étendue spectrale (μm) | 0.7 - 2.35 | 2.35 - 5.2 | 0.7 - 5.2 |
| Nombre de points spectraux | 13 | 16 | 11586 |
| Champ de vue (arcsec^2) | 30×30 | 30×30 | 30×30 |
| Champ de vue (pixels^2) | 1000×1000 | 500×500 | 310×310 |

TABLE 3.3 – Propriétés des observations simulées de l'imageur de NIRCAM et de l'IFU de NIRSPEC, respectivement \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h .

Cette section présente les observations simulées capitalisant sur les modèles directs de l'imageur de NIRCAM et de l'IFU de NIRSPEC décrits dans la section 3.2 et leurs modèles de bruit associés proposés dans la section 3.3. Ces observations sont liées à la scène astrophysique synthétique générée dans la cadre de la section 3.1. Pour ajuster les caractéristiques du

bruit, nous nous référons aux temps d'intégration prévus par le programme d'observation ERS 1288 [Berné et al., 2017]. Les paramètres d'observation de ce programme peuvent être téléchargés publiquement avec l'outil Astronomer's Proposal Tool (APT) fourni par le STScI. Les caractéristiques des images multispectrales et hyperspectrales résultantes, respectivement notées \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h , sont résumées dans la table 3.3.

Le champ de vue de l'image simulée \mathbf{Y}_m correspond à environ un seizième du champ de vue total de l'imageur NIRC*am* puisque la scène synthétique est plus petite que le champ de vue réel de l'imageur NIRC*am*. D'autre part, le champ de vue de l'image hyperspectrale \mathbf{Y}_h correspond à une mosaïque de 1×10 champs de vue NIRS*pec*. Ces images multispectrales et hyperspectrales sont présentées dans la figure 3.10. Pour illustrer le contenu de ce jeu de données simulé, nous affichons des compositions colorées rouge-vert-bleu (en anglais *red-green-blue*, RGB) des images ainsi que des spectres extraits à des emplacements spécifiques, pour la scène et chacune des observations simulées (voir figure 3.10 pour le détail des compositions). Les simulations montrent comment les instruments dégradent les résolutions spatiale et spectrale de la scène astrophysique synthétique à haute résolution. Plus précisément, pour les observations multispectrales, la composition RGB apparaît moins contrastée en raison de la perte d'information spectrale due aux filtres à large bande. En effet, sur toute l'étendue spectrale de ces filtres, l'information spectrale de la scène est intégrée et par conséquent, la bande spectrale résultante comporte les contributions spatiales de plusieurs raies d'émission et donc très probablement de plusieurs régions physiques de la PDR (voir figure 3.1). Les données hyperspectrales sont clairement bien moins résolues spatialement, et le spectre contient un fort niveau de bruit. Globalement, pour cette scène réaliste de la Barre d'Orion qui est une source brillante, on peut noter que le rapport signal à bruit reste très bon pour la majorité des zones des images et des spectres.

La figure 3.11 illustre plus spécifiquement la modélisation du bruit dans cette scène synthétique. Les images de la première colonne montrent une bande multispectrale et une bande hyperspectrale non bruitées, provenant respectivement d'un filtre à large bande centré à 1.50 microns (F150W) et du continuum à 1.503 microns. La deuxième colonne présente, pour chacune des bandes précédemment mentionnées, le bruit de photon introduit dans le paragraphe 3.3.1 tandis que la troisième colonne présente le bruit de lecture additif décrit dans le paragraphe 3.3.2. Le bruit de lecture de l'imageur de NIRC*am*, indépendant spectralement, met en avant la corrélation spatiale de ce bruit additif. La simulation du bruit de lecture de l'IFU de NIRS*pec* (troisième colonne, seconde ligne) montre comment la projection en 2 dimensions sur le détecteur de la scène en 3 dimensions entraîne l'apparition d'un motif spatial en tranches sur l'image du bruit additif. La quatrième et dernière colonne présente les bandes multispectrale et hyperspectrale bruitées. Ces images sont en effet la somme des images des trois premières colonnes. Le bruit de lecture des deux instruments est ici bien moins fort que le bruit de photon et, par conséquent, ne se distingue que très peu visuellement sur les images bruitées.

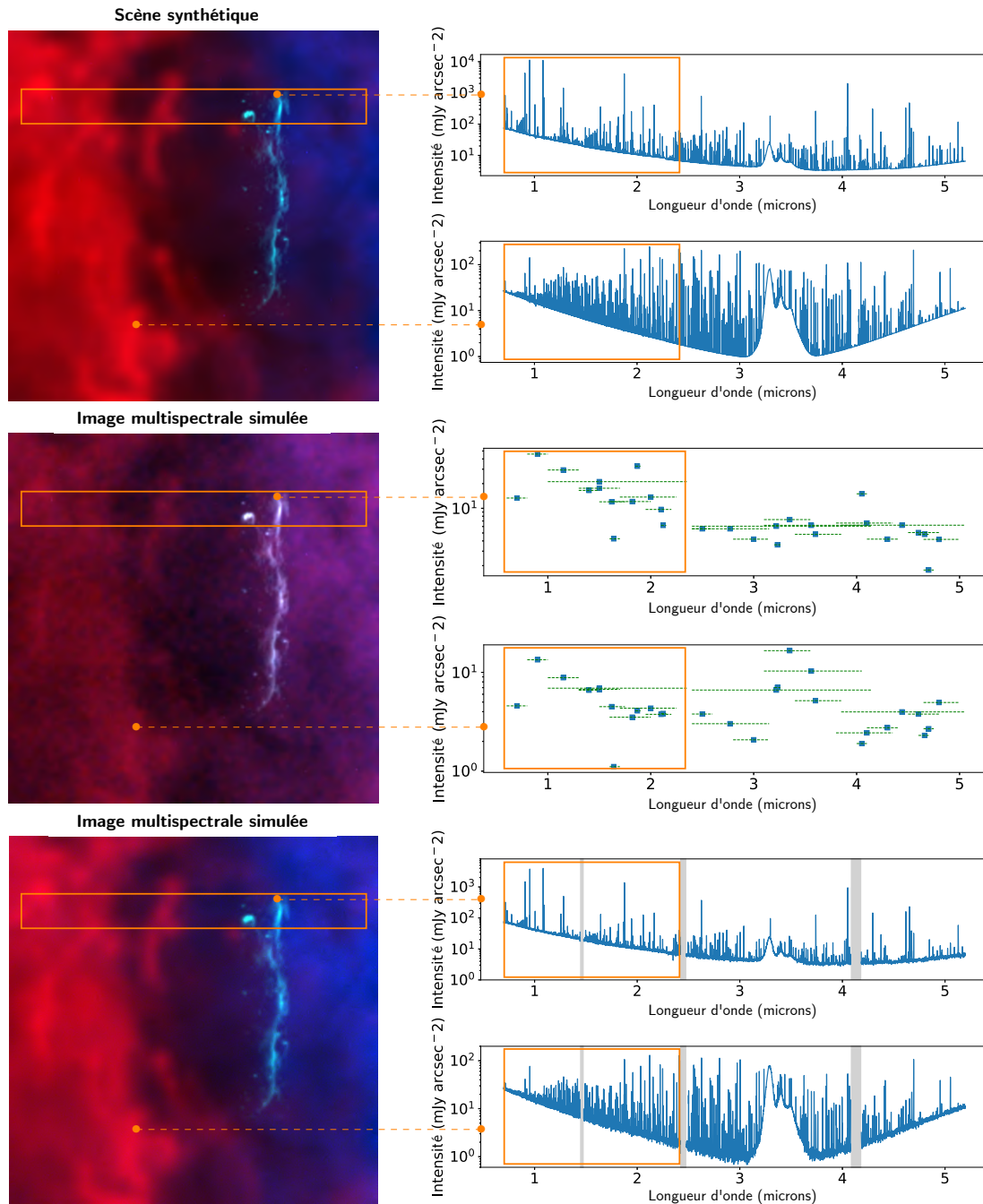


FIGURE 3.10 – **À gauche** (de haut en bas) : Compositions RGB de la scène synthétique de PDR, de l'image multispectrale simulée de l'imageur NIRC*am* et de l'image hyperspectrale simulée de l'IFU de NIRS*pec*. En rouge : raie d'émission du H_2 au pic d'intensité à $2.122 \mu\text{m}$ (filtre à bande étroite F212N pour l'image multispectrale). En vert : raie de recombinaison du H^+ au pic d'intensité à $1.865 \mu\text{m}$ (filtre à bande étroite F186N pour l'image mutlispectrale). En bleu : raie d'émission du Fe^+ au pic d'intensité à $1.644 \mu\text{m}$ (filtre à bande étroite F164N pour l'image multispectrale). Le champ de vue et l'étendue spectrale considérés dans le problème de fusion présenté au chapitre 4 sont représentés par les carrés oranges. **À droite** : Deux spectres de 0.7 à 5 microns associés à deux pixels de chaque image à gauche. De haut-en-bas, les deux premiers sont deux spectres originaux provenant de la scène synthétique avec environ 12000 points spectraux. Les deux suivants sont deux spectres observés de l'image multispectrale découlant du modèle direct de l'imageur de NIRC*am* avec 29 points spectraux. Les deux derniers sont des spectres calibrés observés par l'image hyperspectrale fournie par le modèle direct de l'IFU de NIRS*pec* avec environ 11000 points spectraux. Les espaces vides physiques entre les détecteurs de l'IFU de NIRS*pec* sont spécifiés en gris clair. Les intensités sont tracées en échelle logarithmique. Les 1er, 3ème et 5ème spectres sont dominés par les émissions du front d'ionisation et de la région ionisée tandis que les 2ème, 4ème et 6ème spectres sont dominés par les émissions du front de dissociation et du nuage moléculaire.

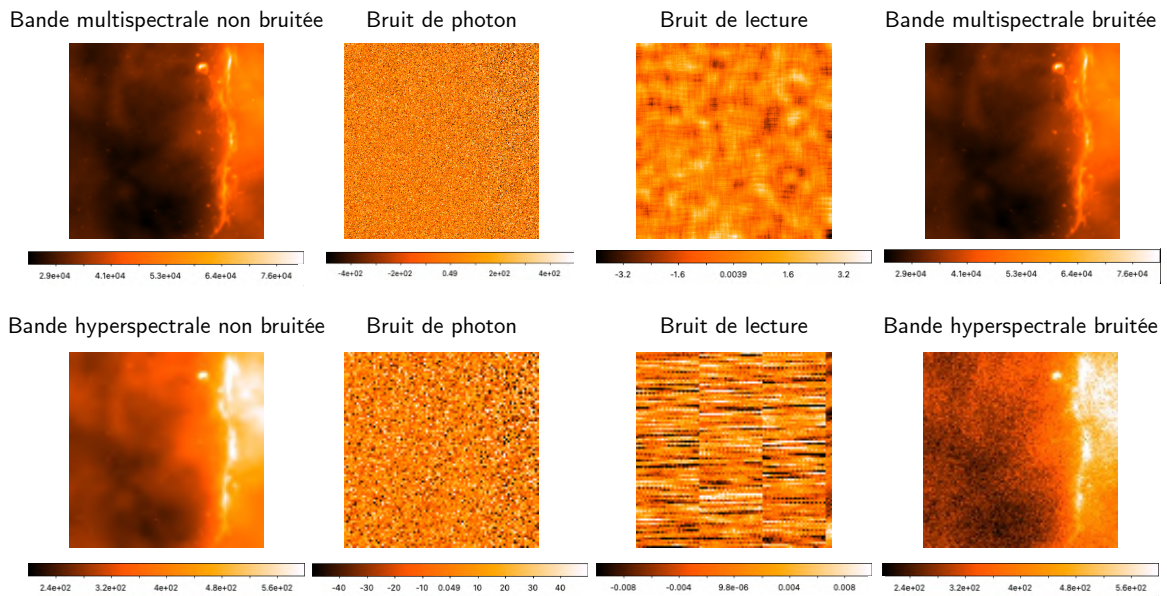


FIGURE 3.11 – **En haut** (de gauche à droite) : Bande multispectrale (NIRCam) non bruitée de la scène synthétique de PDR provenant d'un filtre à large bande centré à 1.50 microns (F150W), simulation correspondante du bruit de photon. Simulation correspondante du bruit de lecture de l'imageur de NIRCam indépendant spectralement, bande multispectrale bruitée de ce même filtre représentant la somme des images des trois colonnes précédentes. **En bas** (de gauche à droite) : Bande hyperspectrale (NIRSpec) non bruitée de la scène synthétique de PDR appartenant au continuum et situé à 1.503 microns. Simulation correspondante du bruit de photon, simulation correspondante du bruit de lecture de l'IFU de NIRSpec indépendant spectralement, bande hyperspectrale bruitée représentant la somme des images des trois colonnes précédentes. Échelles de couleur en électrons.

3.5 BILAN

Dans ce chapitre, nous avons contruit une scène synthétique d'une région de photodissociation située dans la Barre d'Orion à haute résolution spatiale et spectrale. Cette scène a été créée selon les modèles courants avec des spectres simulés et des cartes spatiales dérivées de données réelles. En annexe B, nous détaillons la création d'une deuxième scène synthétique basée sur un modèle linéaire similaire et utilisant les mêmes spectres synthétiques mais des cartes spatiales différentes provenant de données réelles du télescope spatial Hubble et représentant la galaxie NGC 1512. Cette seconde scène n'a aucun réalisme physique car elle associe des caractéristiques spectrales et des caractéristiques spatiales qu'il serait impossible d'observer dans des images réelles. Elle ne doit donc pas être utilisée comme telle mais la plus grande complexité des cartes spatiales nous permet, au chapitre suivant, d'évaluer plus pleinement la méthode de fusion de données développée durant cette thèse.

Les modèles directs de deux instruments embarqués sur le JWST, l'imageur de NIRCam et l'IFU de NIRSpec, ont été développés et ont permis de simuler des observations JWST de la région de photodissociation de la Barre d'Orion. Ces observations simulées, présentées dans la section 3.4, rendent compte de la dégradation spatiale et spectrale de chacun des instruments. Ces modèles instrumentaux reposent sur des spécifications techniques idéales des instruments (gabarit des filtres, PSFs, etc.) obtenues à partir de tests au sol à température cryogéniques [Perrin *et al.*, 2012], dans des conditions terrestres qui se rapprochent au maximum des conditions de vol. Une fois le JWST lancé, toutes les caractéristiques techniques seront requalifiées. L'erreur faite sur la mesure du gabarit des

filtres de chacun des instruments étudiés ici peut être considérée comme de très basse énergie puisque leur estimation ne dépend pas de la scène observée et ne varie pas dans le temps. Au contraire, les mesures en vol des PSFs dépendent d'observations et peuvent être, de plus, corrompues par des instabilités et des erreurs de pointage du télescope. Ces paramètres ont été estimés à 6 milli-arcsecondes et 0.1 arcseconde respectivement. En d'autres termes, selon les estimations, pendant toute la durée d'exposition d'une observation, le pointage du télescope pourra varier d'au plus 6 milli-arcsecondes, soit moins d'un cinquième de la taille d'un pixel de l'imageur de NIRC*am* et, pour l'observation d'une région cible donnée, le pointage du télescope pourra varier jusqu'à plus ou moins 0.1 arcseconde de la cible, soit la valeur de la taille d'un pixel de l'IFU de NIRS*pec*. Ces erreurs de pointage seront re-caractérisées une fois le JWST en vol et corrigées tous les 14 jours [Aronstein *et al.*, 2016].

Un autre phénomène non pris en compte dans cette étude peut intervenir dans la corruption des images multispectrales de l'imageur NIRC*am*. La persistance des images des détecteurs de NIRC*am* représente une anomalie due à l'illumination importante de pixels produisant une image rémanente. Cette persistance, dont l'origine est la libération de photoélectrons piégés après une illumination [Smith *et al.*, 2008], peut durer jusqu'à plusieurs minutes après l'exposition, et ce même pour des pixels qui n'ont pas atteint la saturation. Plusieurs raisons nous ont amenées à ne pas modéliser ce phénomène. Cet effet de mémoire est très difficile à caractériser puisqu'il dépend de l'observation précédente effectuée avec l'instrument et il est peu probable que cette source d'erreur pose problème lors de l'observation continue de sources brillantes telles que la Barre d'Orion comme le prévoit le programme d'observation ERS 1288 [Berné *et al.*, 2017]. En revanche, l'observation de régions de faible intensité lumineuse peut être altérée par la persistance d'une scène brillante observée juste avant. Dans ce cas, un choix judicieux de la stratégie d'observation ainsi que la chaîne de traitement du télescope permettent de réduire la corruption par des images rémanentes [Leisenring *et al.*, 2016].

D'autre part, les caractéristiques du bruit supposées ici reposent sur des modèles théoriques et sur les spécifications implémentés dans l'ETC. Des modèles plus réalistes de bruit sont attendus après le lancement du JWST prévu à l'automne 2021. Perfectionner les caractéristiques du modèle de bruit reste donc une perspective d'amélioration future. Nous souhaitons souligner que, pendant la durée de la thèse, nous avons été en contact avec l'équipe de l'ETC au STS*cl*. Les objectifs ont été les suivants : *i*) bénéficier des améliorations présentes et futures de l'ETC pour mieux caractériser les modèles directs des instruments et *ii*) rendre la méthode proposée de création de scène astrophysique adaptable pour une possible implémentation et utilisation par l'ETC. Cette collaboration avec les équipes du STS*cl* continuera tout au cours de la mission d'observation avec le JWST.

Fusion rapide d'images pour le JWST

4

Ce chapitre présente une des contributions principales de ces travaux de thèse. Le processus de fusion est d'abord décrit comme un problème inverse exploitant les modèles directs instrumentaux développés dans le chapitre 3. Ensuite, diverses régularisations sont explorées : hypothèse de rang faible spectral, régularisation de type Sobolev, régularisation de type Sobolev à poids, représentation par dictionnaire. Pour surmonter la complexité des modèles instrumentaux ainsi que la très grande taille des données, une implémentation rapide est proposée, en résolvant le problème dans le domaine spatial de Fourier et dans un sous-espace spectral. La méthode de fusion d'images proposée ici est alors testée dans la cadre du protocole proposé dans le chapitre 3. Une importance particulière a été accordée à une prise en compte d'incertitudes liées notamment aux modèles instrumentaux, comme par exemple des erreurs de pointage du télescope.

4.1 FORMULATION DU PROBLÈME

Cette section décrit la formulation mathématique du problème de fusion de données hyperspectrales et multispectrales pour le James Webb Space Telescope. Dans le chapitre 3, nous avons développé les modèles directs associés à deux instruments du JWST, l'imageur de NIRC*am* et l'IFU de NIRS*pec*, qui fournissent des images à des résolutions spatiales et spectrales complémentaires. Contrairement aux modèles associés à des réseaux de filtres couleurs de type Bayer principalement présents dans des appareils photos numériques [Szeliski, 2011], les acquisitions effectuées par les deux instruments sont supposées indépendantes.

Le premier instrument est un imageur optique acquérant des images multispectrales à haute résolution spatiale notées $\mathbf{Y}_m \in \mathbb{R}^{l_m \times p_m}$, où l_m et p_m sont respectivement le nombre de bandes spectrales et le nombre de pixels. Le second instrument est un spectromètre qui acquiert un cube de données hyperspectrales $\mathbf{Y}_h \in \mathbb{R}^{l_h \times p_h}$ de résolution spatiale moindre, avec $l_m < l_h$ et $p_h < p_m$. À partir de ces données, l'objectif du processus de fusion est de reconstruire une image hyperspectrale à haute résolution notée $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{l_h \times p_m}$, qui a la même résolution spatiale que l'image multispectrale et la même résolution spectrale que l'image hyperspectrale.

Dans la section 3.2, la réponse des deux capteurs est modélisée comme une série de transformations linéaires qui décrivent les dégradations spatiales et spectrales de la lumière émergeant de la scène d'intérêt. Les images multi- et hypespectrales résultent donc des modèles directs sui-

Contenu du chapitre

| | |
|---|------------|
| 4.1 Formulation du problème | 81 |
| 4.2 Régularisations spatiales | 83 |
| Énergie du gradient | |
| Énergie du gradient pondéré | |
| Régularisation par dictionnaire | |
| 4.3 Implémentation rapide dans le sous-espace | 87 |
| Résolution : cas de la régularisation de type Sobolev | |
| Complexité | |
| Résolution : cas des régularisations informées | |
| 4.4 Protocole expérimental | 94 |
| Métriques | |
| Méthodes comparées | |
| 4.5 Expériences : régularisation de type Sobolev | 97 |
| Résultats | |
| Paramétrage de la régularisation | |
| Étude de la robustesse de la méthode | |
| 4.6 Expériences : régularisations informées | 105 |
| Résultats | |
| Influence de la régularisation sur le choix de l'hyperparamètre μ | |
| 4.7 Bilan | 112 |

vants

$$\mathbf{Y}_m \approx \mathbf{L}_m \mathcal{M}(\mathbf{X}) \quad (4.1)$$

$$\mathbf{Y}_h \approx \mathbf{L}_h \mathcal{H}(\mathbf{X}) \mathbf{S} \quad (4.2)$$

où le symbole \approx est utilisé pour tenir compte du bruit et des erreurs de modélisation, et les autres opérateurs sont brièvement rappelés dans ce qui suit. Premièrement, $\mathbf{L}_m \in \mathbb{R}^{l_m \times l_h}$ et $\mathbf{L}_h \in \mathbb{R}^{l_h \times l_h}$ sont des opérateurs de dégradation spectrale, respectivement associés aux images multispectrale et hyperspectrale. Les lignes de la matrice \mathbf{L}_m dans l'équation (4.1) sont les fonctions de transmission des l_m filtres correspondant [Yokoya, Yairi et Iwasaki, 2012; Simoes *et al.*, 2015; Wei *et al.*, 2015]. \mathbf{L}_h est une matrice diagonale contenant la fonction de transmission spectrale de l'instrument. On peut noter que ces dégradations spectrales sont spatialement invariantes, ce qui permet de les formuler comme des produits matriciels dans les équations (4.1) et (4.2). Deuxièmement, $\mathcal{M} : \mathbb{R}^{l_h \times p_m} \rightarrow \mathbb{R}^{l_h \times p_m}$ dans l'équation (4.1) et $\mathcal{H} : \mathbb{R}^{l_h \times p_m} \rightarrow \mathbb{R}^{l_h \times p_m}$ dans l'équation (4.2) sont des opérateurs de dégradation spatiale. Dans le contexte considéré ici d'imagerie astronomique, nous pouvons raisonnablement faire l'hypothèse que les PSFs sont spatialement invariantes mais dépendent fortement de la longueur d'onde suivant un critère de Rayleigh [Rayleigh, 1880]. Par conséquent, $\mathcal{M}(\cdot)$ et $\mathcal{H}(\cdot)$ sont des opérateurs de convolution spatiale 2D avec des noyaux spectralement variants spécifiques à chaque instrument [Soulez, Thiébaud et Denis, 2013; Hadj-Youcef *et al.*, 2017]. Enfin, la résolution spatiale de l'image hyperspectrale est altérée par un opérateur de sous-échantillonnage $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{p_m \times p_h}$ avec un facteur de sous-échantillonnage entier d tel que $p_h = \frac{p_m}{d^2}$.

Pour retrouver \mathbf{X} à partir des deux observations bruitées, on se place dans le cadre des problèmes inverses (variationnels) en essayant d'ajuster le modèle aux observations tout en ajoutant des termes de régularisation pour introduire une connaissance *a priori* de la solution recherchée. Des approches similaires ont été largement utilisées pour répondre au problème de fusion d'images multibandes dans la littérature en observation de la Terre et sont détaillées dans le chapitre 2. En notant $(\cdot)^H$ la transposée hermitienne et $\|\cdot\|_{\mathbb{F}}^2 = \text{Tr}((\cdot)(\cdot)^H)$ la norme de Frobenius, nous cherchons à résoudre le problème générique

$$\hat{\mathbf{X}} = \underset{\mathbf{X}}{\text{argmin}} \left(\frac{1}{2\sigma_m^2} \|\mathbf{Y}_m - \mathbf{L}_m \mathcal{M}(\mathbf{X})\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{1}{2\sigma_h^2} \|\mathbf{Y}_h - \mathbf{L}_h \mathcal{H}(\mathbf{X}) \mathbf{S}\|_{\mathbb{F}}^2 + \varphi_{\text{spec}}(\mathbf{X}) + \varphi_{\text{spat}}(\mathbf{X}) \right) \quad (4.3)$$

où les deux premiers termes sont des termes d'attache aux données reliés respectivement aux images multi- et hyperspectrales. Minimiser ces termes est équivalent à maximiser la vraisemblance associée à un modèle de bruits blancs gaussiens indépendants de variances σ_m^2 et σ_h^2 dans les données multispectrales et hyperspectrales, respectivement. Remarquons que cette hypothèse n'est pas réaliste pour des images d'observation astrophysique et n'est pas cohérente avec le modèle de bruit développé à la section 3.3 où les images sont plutôt corrompues par un bruit mixte

Poisson-Gaussien. La fonction de coût quadratique a été choisie par souci d'efficacité computationnelle. Les résultats détaillés dans la section 4.5.1 montrent que cette hypothèse simplifiée impacte peu les résultats de la méthode proposée.

En outre, les termes $\varphi_{\text{spec}}(\cdot)$ et $\varphi_{\text{spat}}(\cdot)$ dans l'équation (4.3) représentent respectivement les régularisations spectrale et spatiale. En ce qui concerne $\varphi_{\text{spec}}(\cdot)$, nous pouvons raisonnablement présager que les pixels de la scène \mathbf{X} vivent dans un sous-espace dont la dimension l_{sub} est bien plus petite que sa dimension spectrale l_h . Cette hypothèse a déjà été énoncée pour des données d'observation astrophysique [Berné *et al.*, 2007] (voir les chapitres 1 et 2) et peut être formulée en imposant une structure de rang faible à la scène \mathbf{X} à reconstruire, i.e., $\mathbf{X} = \mathbf{V}\mathbf{Z}$ où les colonnes de $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{l_h \times l_{\text{sub}}}$ (avec $l_{\text{sub}} \leq l_h$) engendrent le sous-espace et $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} \times p_m}$ contient les coefficients de représentation correspondants. La décomposition impose implicitement une régularisation spectrale puisque les spectres de l'image fusionnée sont des combinaisons linéaires des spectres de référence qui définissent \mathbf{V} . Les colonnes de \mathbf{V} , engendrant le sous-espace, peuvent être fixées préalablement grâce à une connaissance *a priori* concernant la composition de la scène d'intérêt, par exemple en regroupant l_{sub} signatures spectrales caractérisant les composants de la scène. En absence d'une telle connaissance, les signatures peuvent être directement estimées à partir de l'image hyperspectrale, e.g. en réalisant une analyse en composantes principales (ACP) ou en recourant à une méthode spécifiquement dédiée aux données hyperspectrales telle que la transformée *maximum noise fraction* (acronyme anglais, *MNF*) [Green *et al.*, 1988] ou une identification de sous-espace hyperspectral par erreur minimale (la méthode HySime) [Bioucas-Dias et Nascimento, 2008]. Cette stratégie a été largement adoptée dans de nombreux travaux de la littérature dédiée à la reconstruction d'images hyperspectrales [Wycoff *et al.*, 2013; Simoes *et al.*, 2015; Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b]. Un autre atout de ce changement de variables réside dans la réduction significative de la complexité du problème d'optimisation puisque *i*) l'estimation des coefficients de décomposition $\hat{\mathbf{Z}}$ est suffisante pour retrouver l'image fusionnée $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}$ et *ii*) cette décomposition permet aux modèles directs d'être réécrits dans un sous-espace engendré par \mathbf{V} , ce qui aboutit à un algorithme adapté (voir Section 4.3.1).

4.2 RÉGULARISATIONS SPATIALES

Cette section présente les différentes régularisations spatiales quadratiques $\varphi_{\text{spat}}(\cdot)$ explorées durant ces travaux de thèse : une régularisation naïve de type Sobolev, une version pondérée et informée de cette dernière et une contrepartie quadratique d'une régularisation par représentation parcimonieuse dans un dictionnaire. Ces régularisations spatiales seront appliquées à la projection \mathbf{Z} de \mathbf{X} dans le sous-espace spectral engendré par \mathbf{V} . On peut noter que, à condition que la matrice \mathbf{V} soit orthonormale (i.e., $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}_{l_{\text{sub}}}$), cette régularisation formulée dans le sous-espace spectral est équivalente à celle qui serait formulée dans le domaine image original. L'utilisation de régularisations quadratiques simplifie la résolution

du problème inverse de fusion, comme souligné dans la section 2.3.3 du chapitre 2 et comme il le sera dans la section 4.3.1.

4.2.1 Énergie du gradient

Le premier terme de régularisation spatiale $\varphi_{\text{spat}}(\cdot)$ repose sur l'hypothèse que l'image recherchée est *a priori* spatialement lisse, en accord avec les scènes typiques rencontrées en observation astrophysique. Nous proposons donc de minimiser l'énergie du gradient discret spatial de l'image, aussi connue sous le nom de régularisation Sobolev [Karl, 2005]. On écrit alors

$$\varphi_{\text{spat}}(\mathbf{Z}) = \mu \|\mathbf{ZD}\|_{\mathbb{F}}^2 \quad (4.4)$$

où la matrice \mathbf{D} est l'opérateur de différences finies du premier ordre en 2 dimensions et le paramètre de régularisation $\mu \geq 0$ contrôle la force de la régularisation. Le problème devient alors

$$\hat{\mathbf{Z}} = \underset{\mathbf{Z}}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{1}{2\sigma_{\text{m}}^2} \|\mathbf{Y}_{\text{m}} - \mathbf{L}_{\text{m}}\mathcal{M}(\mathbf{VZ})\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{1}{2\sigma_{\text{h}}^2} \|\mathbf{Y}_{\text{h}} - \mathbf{L}_{\text{h}}\mathcal{H}(\mathbf{VZ})\mathbf{S}\|_{\mathbb{F}}^2 + \mu \|\mathbf{ZD}\|_{\mathbb{F}}^2 \right). \quad (4.5)$$

4.2.2 Énergie du gradient pondéré

La seconde régularisation explorée découle de la première mais fait l'hypothèse supplémentaire que l'image fusionnée, bien que majoritairement spatialement lisse, peut présenter des zones contrastées. En effet, de nombreuses scènes astrophysiques, telles que celles présentées dans le chapitre 3, possèdent des zones de front ou de détails dans de petites parties de la scène observée.

Nous proposons alors de minimiser l'énergie du gradient discret spatial pondéré de l'image défini par

$$\varphi_{\text{spat}}(\mathbf{Z}) = \mu \|\mathbf{W} \odot (\mathbf{ZD})\|_{\mathbb{F}}^2 \quad (4.6)$$

où la matrice \mathbf{W} est la matrice de pondération du gradient dont la dimension est égale à celle du produit \mathbf{ZD} et où \odot représente le produit matriciel terme à terme. Cette matrice de pondération permet de modérer localement la force de la régularisation. Dans les zones spatialement lisses, les coefficients de la matrice \mathbf{W} sont choisis grands afin de promouvoir un contenu local lisse alors que, au contraire, dans les zones de détails, les coefficients seront de préférence petits pour ne pas favoriser un lissage trop fort.

Dans la suite, nous décrivons notre stratégie pour choisir cette matrice \mathbf{W} . On souhaite utiliser l'information spatiale à haute résolution disponible dans l'image multispectrale observée. On note alors le modèle direct d'observation multispectral simplifié suivant

$$\tilde{\mathbf{Y}}_{\text{m}} = \mathbf{L}_{\text{m}}\mathbf{X} = \mathbf{L}_{\text{m}}\mathbf{VZ}$$

où uniquement l'opérateur de dégradation spectral \mathbf{L}_m est pris en compte. On se place au pixel p et on considère

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{z}} &= (\mathbf{ZD})_p \\ \check{\mathbf{x}} &= (\mathbf{VZD})_p = \mathbf{V}\check{\mathbf{z}} \\ \check{\mathbf{y}}_m &= (\tilde{\mathbf{Y}}_m\mathbf{D})_p = \mathbf{L}_m\check{\mathbf{x}}.\end{aligned}$$

Pour calculer les coefficients de la matrice \mathbf{W} , on utilise une méthodologie bayésienne simplifiée. On attribue l'*a priori* gaussien suivant au pixel p du gradient discret de l'image haute résolution spatiale et spectrale \mathbf{X}

$$\check{\mathbf{x}} \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\check{\mathbf{x}}}^2 \mathbf{I}_{l_h}) \quad (4.7)$$

où \mathbf{I}_{l_h} est la matrice identité de taille l_h . Comme $\check{\mathbf{z}} = \mathbf{V}^T \check{\mathbf{x}}$, l'*a priori* est alors équivalent, dans le sous-espace spectral, à

$$\check{\mathbf{z}} \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{\check{\mathbf{z}}}) \quad (4.8)$$

avec $\Sigma_{\check{\mathbf{z}}} = \mathbf{V}^T \mathbf{V} \sigma_{\check{\mathbf{x}}}^2$. On estime alors les coefficients $\mathbf{w} = (\mathbf{W})_p$ de la matrice de pondération

$$\mathbf{w} = \frac{1}{\text{diag}(\Sigma_{\check{\mathbf{z}}}) + \epsilon}$$

où $\epsilon > 0$ est un hyperparamètre permettant de prévenir les valeurs de \mathbf{w} très grandes lorsque $\text{diag}(\Sigma_{\check{\mathbf{z}}})$ contient des valeurs très proches de 0.

L'estimation de la quantité $\sigma_{\check{\mathbf{x}}}^2$, essentielle au calcul de $\Sigma_{\check{\mathbf{z}}}$, peut s'effectuer grâce au gradient discret de l'image multispectrale observée. En effet, puisque $\check{\mathbf{y}}_m = \mathbf{L}_m \check{\mathbf{x}}$, on peut écrire $\check{\mathbf{y}}_m \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{\check{\mathbf{y}}_m})$ avec $\Sigma_{\check{\mathbf{y}}_m} = \mathbf{L}_m \mathbf{L}_m^T \sigma_{\check{\mathbf{x}}}^2$. Par linéarité de la trace matricielle, on peut alors estimer

$$\sigma_{\check{\mathbf{x}}}^2 = \frac{\text{tr}(\Sigma_{\check{\mathbf{y}}_m})}{\text{tr}(\mathbf{L}_m \mathbf{L}_m^T)}. \quad (4.9)$$

L'estimateur du maximum de vraisemblance de la matrice de covariance $\Sigma_{\check{\mathbf{y}}_m}$ étant la matrice carrée $\check{\mathbf{y}}_m \check{\mathbf{y}}_m^T$, on peut finalement estimer

$$\Sigma_{\check{\mathbf{z}}} = \mathbf{V}^T \mathbf{V} \frac{\|\check{\mathbf{y}}_m\|_2^2}{\text{tr}(\mathbf{L}_m \mathbf{L}_m^T)} \quad (4.10)$$

et calculer les coefficients \mathbf{w} . Ainsi, une faible valeur de $\check{\mathbf{y}}_m$ (i.e., une zone où le gradient discret de l'image multispectrale est faible) implique une grande valeur \mathbf{w} de pondération et inversement. L'avantage d'une telle régularisation informée est l'utilisation de l'information spatiale observée à haute résolution pour pondérer localement la force de la régularisation. Cet ajustement, par rapport à une régularisation de type Sobolev simple, rend la régularisation proposée plus adaptable à différentes scènes astrophysiques.

Cependant, lorsque les coefficients de la matrice \mathbf{W} sont très faibles, dans des zones de frontière, la régularisation du problème inverse, dans ces zones, est également faible, voir inexistante. Le problème inverse de fusion non régularisé étant mal posé, ce phénomène peut avoir pour effet l'apparition d'artefacts dans l'image reconstruite.

4.2.3 Régularisation par dictionnaire

La régularisation spatiale explorée ici est, comme la régularisation précédente, une régularisation informée exploitant l'information spatiale à haute résolution présente dans la donnée d'observation multispectrale. Elle est fortement inspirée de la régularisation utilisée pour la fusion de données pour l'observation de la Terre par Wei *et al.*, 2015 décrite dans le chapitre 2 et est ici adaptée pour résoudre le problème de fusion d'images astronomiques avec flous spectralement variant.

En utilisant un modèle bayésien hiérarchique et en introduisant l'*a priori* gaussien $\mathbf{Z} \sim \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{Z}}, \mathbf{I}_{l_{\text{sub}} p_{\text{m}}})$, on définit

$$\varphi_{\text{spat}}(\mathbf{Z}) = \mu \|\mathbf{Z} - \tilde{\mathbf{Z}}\|_F^2. \quad (4.11)$$

Wei *et al.*, 2015 introduisent alors $\tilde{\mathbf{Z}}$ comme une combinaison linéaire parcimonieuse d'éléments, appelés atomes élémentaires, d'un dictionnaire redondant judicieusement choisi c'est-à-dire

$$\tilde{\mathbf{Z}} = \mathcal{P}(\mathbf{BC})$$

où $\mathcal{P}(\cdot) : \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} p_{\text{p}} \times n_{\text{p}}} \rightarrow \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} p_{\text{m}}}$ est un opérateur linéaire moyennant les n_{p} patchs de taille p_{p} se chevauchant de chaque bande. On note $\mathcal{P}^*(\cdot)$ son adjoint décomposant chaque bande de l'image en n_{p} patchs. $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} p_{\text{p}} \times n_{\text{a}}}$ est un dictionnaire redondant composé de n_{a} atomes et $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n_{\text{a}} \times n_{\text{p}}}$ est la matrice de codes pour toutes les bandes de \mathbf{Z} . On notera que le nombre de patchs n_{p} n'est pas un hyperparamètre et dépend de la dimension spatiale l_{m} de l'image multispectrale, de la taille p_{p} des patchs et de leur recouvrement.

L'approche diffère ensuite dans l'apprentissage du dictionnaire \mathbf{B} et du support des codes \mathbf{C} . Dans ces travaux, ils sont appris conjointement sur l'image d'observation multispectrale lors d'une étape de pré-traitement, tandis que Wei *et al.*, 2015 les estiment sur une approximation de la solution au problème de fusion (voir chapitre 2, section 2.3.4). L'idée est d'exploiter l'information spatiale présente dans l'image observée à haute résolution spatiale plutôt que d'extraire des composantes spatiales d'une solution approximative du problème de fusion qui pourrait ne pas avoir reconstruit l'information spatiale haute fréquence présente dans l'image multispectrale observée. L'image multispectrale \mathbf{Y}_{m} est donc d'abord décomposée en $l_{\text{m}} \times n_{\text{p}}$ patchs de taille p_{p} . Le dictionnaire redondant \mathbf{B} est ensuite appris à partir de cette collection de patchs en utilisant la méthode d'apprentissage de dictionnaire ODL (*acronyme anglais, Online Dictionary Learning*) [Mairal *et al.*, 2009]. Cette méthode résout le problème d'optimisation suivant

$$\mathbf{B}, \mathbf{C}_{\text{m}} \in \arg \min_{\tilde{\mathbf{B}}, \tilde{\mathbf{C}}_{\text{m}}} \frac{1}{2} \left[\|\tilde{\mathcal{P}}^*(\mathbf{Y}_{\text{m}}) - \tilde{\mathbf{B}} \tilde{\mathbf{C}}_{\text{m}}\|_F^2 + \gamma \|\tilde{\mathbf{C}}_{\text{m}}\|_1 \right]$$

où $\mathbf{C}_{\text{m}} = [\mathbf{C}_{\text{m},1}, \dots, \mathbf{C}_{\text{m},l_{\text{m}}}]$, $\mathbf{C}_{\text{m}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{a}} \times l_{\text{m}} n_{\text{p}}}$ est la matrice des codes associée à l'image multispectrale et $\mathbf{C}_{\text{m},l} \in \mathbb{R}^{n_{\text{a}} \times n_{\text{p}}}$ est le code associé à la bande l de l'image multispectrale. $\tilde{\mathcal{P}}^*(\cdot) : \mathbb{R}^{l_{\text{m}} \times p_{\text{m}}} \rightarrow \mathbb{R}^{l_{\text{m}} n_{\text{p}} \times p_{\text{p}}}$ est l'opérateur décomposant l'image \mathbf{Y}_{m} en $l_{\text{m}} \times n_{\text{p}}$ patchs.

La matrice des codes associés à l'image multispectrale \mathbf{C}_m est ensuite réestimée en résolvant le problème suivant

$$\mathbf{C}_m \in \arg \min_{\tilde{\mathbf{C}}_m} \frac{1}{2} \|\tilde{\mathcal{P}}^*(\mathbf{Y}_m) - \mathbf{B}\tilde{\mathbf{C}}_m\|_F^2 \text{ tel que } \|\tilde{\mathbf{C}}_m\|_0 \leq K$$

où $K \ll n_a$ représente le nombre maximal d'atome pour chaque patch. Ce problème est résolu en utilisant l'algorithme OMP (acronyme anglais, *Orthogonal Matching Pursuit*). On définit alors la matrice des codes $\mathbf{C} = \frac{1}{l_m} \sum_{l=1}^{l_m} \mathbf{C}_{m,l}$ et le support $\Omega_{\mathbf{C}}$ de la matrice des codes \mathbf{C} comme $\Omega_{\mathbf{C}} = \{(j, k) \mid \sum_{l=1}^{l_m} \mathbf{C}_{m,l} \neq 0\}$. Le support $\Omega_{\mathbf{C}}$ détermine les entrées non nulles de la matrice \mathbf{C} et fixe donc préalablement les atomes du dictionnaire combinés linéairement pour former chaque patch. De cette manière, le dictionnaire \mathbf{B} contient des atomes appris à partir de l'image multispectrale. Ces atomes ne seront activés pour chaque patch que s'ils expliquent par combinaison linéaire les patches correspondants dans les bandes de l'image multispectrale.

4.3 IMPLÉMENTATION RAPIDE DANS LE SOUS-ESPACE

Bien que quadratique, le problème énoncé dans l'équation (4.5) ne peut pas être résolu facilement par des méthodes conventionnelles telles qu'une descente de gradient rapide [Beck et Teboulle, 2009] ou un gradient conjugué [Shewchuk, 1994] à cause des flous spectralement variants dans $\mathcal{M}(\cdot)$ et $\mathcal{H}(\cdot)$. En effet, recourir à de tels algorithmes nécessite d'évaluer le gradient à chaque itération, impliquant l'application des opérateurs $\mathcal{M}(\cdot)$ et $\mathcal{H}(\cdot)$ et de leur adjoints respectifs, c'est-à-dire appliquer un ensemble de $4l_h$ convolutions spatiales bidimensionnelles distinctes. Le stockage et le traitement de plusieurs milliers de PSFs distinctes réduiraient à néant les bénéfices de la réduction de dimension induite par la décomposition de rang faible associée à la matrice \mathbf{V} . Cette section détaille une contribution importante de ces travaux de thèse, qui consiste en une implémentation rapide dédiée à la tâche de fusion avec des flous spectralement variants. Premièrement, on montre que le problème considéré peut être entièrement écrit dans le domaine fréquentiel pour gérer les opérateurs de convolution $\mathcal{M}(\cdot)$ et $\mathcal{H}(\cdot)$. Adoptée sporadiquement dans certains travaux précédents [Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b; Hadj-Youcef *et al.*, 2018], cette stratégie s'éloigne de la plupart des techniques de fusion déjà proposées dans la littérature. En effet, la plupart des techniques résolvent généralement le problème entièrement dans le domaine image [Akhtar, Shafait et Mian, 2014; Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015a; Lanaras, Baltsavias et Schindler, 2015] ou font des allers-retours multiples et coûteux entre le domaine image et le domaine fréquentiel tout au long des itérations de l'algorithme [Simoes *et al.*, 2015; Wei *et al.*, 2015; Wei *et al.*, 2016]. Deuxièmement, nous combinons ces opérateurs de convolution et vectorisons le problème entier exprimé dans le sous-espace de faible dimension engendré par les colonnes de \mathbf{V} . À notre connaissance, aucune approche similaire n'a encore été proposée. Bien que le gain computationnel attendu par rapport à une implémentation naïve apparaisse limité, nous montrons qu'il offre deux avantages : *i*) il met en lumière des quantités

intéressantes qui ne sont calculées qu'une seule fois lors d'une étape de pré-traitement et *ii*) la matrice associée au système linéaire résultant à résoudre est hautement parcimonieuse avec une structure particulière par blocs, ce qui ouvre la porte à l'utilisation de solveurs efficaces. Ainsi, cette astuce de vectorisation permet de réduire significativement le coût computationnel de l'algorithme de minimisation itératif utilisé. Cette stratégie est d'abord présentée dans le cas de la régularisation de type Sobolev (voir section 4.2.1). Pour illustrer les bénéfices associés à chacune des deux étapes, à savoir la formulation dans le domaine de Fourier et la vectorisation, nous fournissons et discutons ensuite la complexité computationnelle de l'implémentation proposée. Pour terminer, nous détaillons une adaptation de la résolution pour les problèmes de fusion faisant intervenir les régularisations de type Sobolev pondéré et par dictionnaire.

4.3.1 Résolution : cas de la régularisation de type Sobolev

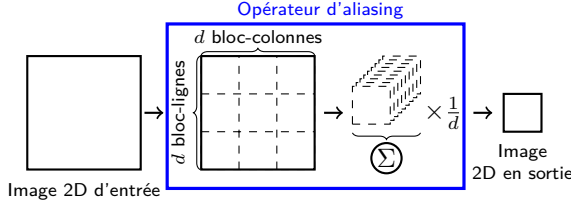
Il est évident que le calcul de convolutions dans le domaine fréquentiel en utilisant des transformées de Fourier rapides (acronyme anglais FFT) et son inverse (iFFT) [Cooley et Tukey, 1965] peut être plus rapide que de convoluer directement dans le domaine spatial. Ici, nous proposons de reformuler le problème dans le domaine de Fourier pour bénéficier de cet avantage computationnel. En effet, chaque opérateur de dégradation spatiale (convolution, sous-échantillonnage et opérateur de différences finies) peut être exprimé ou approché dans le domaine de Fourier par des opérateurs simples, réduisant ainsi le fardeau computationnel. Premièrement, sous des hypothèses de bords périodiques, l'ensemble des convolutions spatiales 2D dans $\mathcal{H}(\cdot)$ et $\mathcal{M}(\cdot)$ peuvent être effectuées par des convolutions cycliques agissant sur \mathbf{VZ} . On note \odot la multiplication terme à terme et \mathbf{F} la matrice de la transformée de Fourier discrète (en anglais *discrete Fourier transform*, DFT) en 2D telle que $\hat{\mathbf{Z}} = \mathbf{ZF}$. Par conséquent, la convolution appliquée à une bande spectrale spécifique l peut être réécrite

$$[\mathcal{M}(\mathbf{VZ})]^l = \left(\hat{\mathbf{M}}^l \odot [\mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}]^l \right) \mathbf{F}^H$$

$$[\mathcal{H}(\mathbf{VZ})]^l = \left(\hat{\mathbf{H}}^l \odot [\mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}]^l \right) \mathbf{F}^H$$

où $\hat{\mathbf{M}}^l$ et $\hat{\mathbf{H}}^l$ sont les DFTs 2D des l_h PSFs correspondant, respectivement, aux instruments d'observation multispectral et hyperspectral [Oppenheim et Schafer, 2009]. L'opérateur de sous-échantillonnage \mathbf{S} de facteur d s'écrit dans le domaine de Fourier comme un opérateur d'aliasing $\hat{\mathbf{S}} = \mathbf{SF}$ de facteur d [Smith, 2011], qui somme d^2 blocs d'une matrice en entrée, comme illustré par la figure 4.1. De manière similaire à l'opérateur de sous-échantillonnage, l'opérateur d'aliasing agit indépendamment sur chaque bande spectrale. Chaque image spatiale 2D avec p_m pixels est partitionnée en d^2 blocs et ces blocs sont sommés pour produire une image spatiale en deux dimensions composée de $p_h = \frac{p_m}{d^2}$ pixels.

Concernant la régularisation spatiale de type Sobolev, l'opérateur de différences finies du premier ordre 2D \mathbf{D} peut être vu comme un opérateur de convolution 2D ayant pour noyaux $\begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Cet

FIGURE 4.1 – Illustration de l'opérateur d'aliasing $\dot{\mathbf{S}}$.

opérateur est appliqué à l'image projetée \mathbf{Z} , dont la dimension spectrale l_{sub} est bien inférieure à celle de l'image \mathbf{VZ} . Ainsi, le gain computationnel atteint en calculant cette régularisation dans le domaine de Fourier reste négligeable. Cependant, pour des raisons pratiques et pour simplifier l'implémentation, nous décidons d'adopter cette stratégie. Plus précisément, sous des conditions aux bords cycliques, ce terme de régularisation peut être exprimé dans le domaine de Fourier comme une multiplication terme à terme [Oppenheim et Schafer, 2009] telle que

$$\mathbf{ZD} = (\dot{\mathbf{Z}} \odot \dot{\mathbf{D}}) \mathbf{F}^H.$$

Finalement, suivant l'identité de Parseval, le problème (4.5) est entièrement réécrit dans le domaine de Fourier

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{Z}} = \underset{\mathbf{Z}}{\text{argmin}} & \left(\frac{1}{2\sigma_m^2} \left\| \dot{\mathbf{Y}}_m - \mathbf{L}_m((\mathbf{VZ}) \odot \dot{\mathbf{M}}) \right\|_{\mathbb{F}}^2 \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\sigma_h^2} \left\| \dot{\mathbf{Y}}_h - \mathbf{L}_h((\mathbf{VZ}) \odot \dot{\mathbf{H}}) \dot{\mathbf{S}} \right\|_{\mathbb{F}}^2 + \mu \left\| \dot{\mathbf{Z}} \odot \dot{\mathbf{D}} \right\|_{\mathbb{F}}^2 \right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

où $\dot{\mathbf{Y}}_m = \mathbf{Y}_m \mathbf{F}$ et $\dot{\mathbf{Y}}_h = \mathbf{Y}_h \mathbf{F}$. Pour finir, l'image fusionnée peut être obtenue en calculant $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{V} \hat{\mathbf{Z}} \mathbf{F}^H$.

La seconde étape consiste à calculer la séquence d'opérateurs dans le sous-espace engendré par les colonnes de \mathbf{V} au lieu de les appliquer à l'image entière \mathbf{VZ} . Pour ce faire, on introduit les vecteurs équivalents ordonnés lexicographiquement $\dot{\mathbf{y}}_m$, $\dot{\mathbf{y}}_h$, $\underline{\mathbf{V}}$ et $\dot{\mathbf{z}}$ de $\dot{\mathbf{Y}}_m$, $\dot{\mathbf{Y}}_h$, \mathbf{V} and $\dot{\mathbf{Z}}$, respectivement, tels que

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{y}}_m &= [\dot{\mathbf{Y}}_m^1, \dots, \dot{\mathbf{Y}}_m^{l_m}]^T & \dot{\mathbf{y}}_h &= [\dot{\mathbf{Y}}_h^1, \dots, \dot{\mathbf{Y}}_h^{l_h}]^T \\ \underline{\mathbf{V}} &= \mathbf{V} \otimes \mathbf{I}_{p_m} & \dot{\mathbf{z}} &= [\dot{\mathbf{Z}}^1, \dots, \dot{\mathbf{Z}}^{l_{\text{sub}}}]^T \end{aligned}$$

où \otimes désigne le produit de Kronecker et \mathbf{I}_p est la matrice identité de taille $p \times p$. Avec ces notations, le problème (4.12) est équivalent à

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{z}} = \underset{\mathbf{z}}{\text{argmin}} & \left(\frac{1}{2\sigma_m^2} \left\| \dot{\mathbf{y}}_m - \underline{\mathbf{L}}_m \underline{\dot{\mathbf{M}}} \underline{\mathbf{V}} \dot{\mathbf{z}} \right\|_2^2 \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\sigma_h^2} \left\| \dot{\mathbf{y}}_h - \underline{\dot{\mathbf{S}}} \underline{\mathbf{L}}_h \underline{\dot{\mathbf{H}}} \underline{\mathbf{V}} \dot{\mathbf{z}} \right\|_2^2 + \mu \left\| \underline{\dot{\mathbf{D}}} \dot{\mathbf{z}} \right\|_2^2 \right) \end{aligned}$$

où $\underline{\mathbf{L}}_m$, $\underline{\mathbf{L}}_h$, $\underline{\dot{\mathbf{M}}}$, $\underline{\dot{\mathbf{H}}}$, $\underline{\dot{\mathbf{S}}}$ et $\underline{\dot{\mathbf{D}}}$ sont les formes vectorisées de \mathbf{L}_m , \mathbf{L}_h , $\dot{\mathbf{M}}$, $\dot{\mathbf{H}}$, $\dot{\mathbf{S}}$ et $\dot{\mathbf{D}}$, respectivement, telles que

$$\underline{\mathbf{L}}_m \underline{\dot{\mathbf{M}}} \underline{\mathbf{V}} \dot{\mathbf{z}} = \begin{pmatrix} [\mathbf{L}_m((\mathbf{VZ}) \odot \dot{\mathbf{M}})]^1 \\ \vdots \\ [\mathbf{L}_m((\mathbf{VZ}) \odot \dot{\mathbf{M}})]^{l_m} \end{pmatrix}$$

et

$$\underline{\dot{\mathbf{S}}}\underline{\mathbf{L}}_h\underline{\dot{\mathbf{H}}}\underline{\mathbf{V}}\underline{\dot{\mathbf{z}}} = \begin{pmatrix} \left[\underline{\mathbf{L}}_h((\underline{\mathbf{V}}\underline{\dot{\mathbf{Z}}}) \odot \underline{\dot{\mathbf{H}}})\underline{\dot{\mathbf{S}}} \right]^1 \\ \vdots \\ \left[\underline{\mathbf{L}}_h((\underline{\mathbf{V}}\underline{\dot{\mathbf{Z}}}) \odot \underline{\dot{\mathbf{H}}})\underline{\dot{\mathbf{S}}} \right]^{l_h} \end{pmatrix}.$$

Les structures et expressions de tous les opérateurs spatiaux et spectraux vectorisés sont détaillées dans l'annexe C. Finalement, la tâche de fusion revient à résoudre le système linéaire

$$\mathbf{A}\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{b} \quad (4.13)$$

où $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}}p_m \times l_{\text{sub}}p_m}$ et $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}}p_m}$ sont définis par

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{1}{2\sigma_m^2} \underline{\mathbf{V}}^H \underline{\dot{\mathbf{M}}}^H \underline{\mathbf{L}}_m^H \underline{\mathbf{L}}_m \underline{\dot{\mathbf{M}}}\underline{\mathbf{V}} \\ &+ \frac{1}{2\sigma_h^2} \underline{\mathbf{V}}^H \underline{\dot{\mathbf{H}}}^H \underline{\mathbf{L}}_h^H \underline{\dot{\mathbf{S}}}^H \underline{\dot{\mathbf{S}}}\underline{\mathbf{L}}_h \underline{\dot{\mathbf{H}}}\underline{\mathbf{V}} + \mu \underline{\dot{\mathbf{D}}}^H \underline{\dot{\mathbf{D}}}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\mathbf{b} = -\frac{1}{\sigma_m^2} \underline{\mathbf{V}}^H \underline{\dot{\mathbf{M}}}^H \underline{\mathbf{L}}_m^H \underline{\dot{\mathbf{y}}}_m - \frac{1}{\sigma_h^2} \underline{\mathbf{V}}^H \underline{\dot{\mathbf{H}}}^H \underline{\mathbf{L}}_h^H \underline{\dot{\mathbf{S}}}^H \underline{\dot{\mathbf{y}}}_h. \quad (4.15)$$

Singulièrement, comme suggéré dans l'équation (4.13) et explicitement exprimé par les équations (4.14) et (4.15), les quantités \mathbf{A} et \mathbf{b} dépendent de tous les opérateurs spatiaux et spectraux. En particulier, ces matrices combinent les PSFs individuelles spectralement variantes définissant $\mathcal{H}(\cdot)$ et $\mathcal{M}(\cdot)$ pour être conjointement exprimées dans le sous-espace de basse dimension à travers l'opérateur de projection $\underline{\mathbf{V}}^H$. De plus, la matrice symétrique \mathbf{A} est parcimonieuse et composée d'au plus $d^2 l_{\text{sub}}^2 p_m$ entrées non nulles, i.e. seulement un coefficient sur $\frac{d^2}{p_m}$ est non nul, ces derniers sont arrangés selon une structure très particulière détaillée dans l'annexe C.2. Par conséquent, son haut niveau de parcimonie, combiné avec sa structure en blocs, permet à la matrice \mathbf{A} d'être calculée une seule fois par une étape de prétraitement et stockée en mémoire à faible coût (voir annexe C.2 pour une description détaillée de son calcul). Enfin, cette matrice peut être facilement appelée le long des itérations d'un algorithme de gradient conjugué (voir chapitre 2) implémenté pour résoudre le problème (4.13). Il est intéressant de constater que cette matrice dépend uniquement des modèles directs définis par les instruments d'observation, de la régularisation spatiale et de la matrice $\underline{\mathbf{V}}$ engendrant le sous-espace spectral. Ainsi, dès lors que ce sous-espace reste inchangé, cette matrice ne nécessite pas d'être recalculée pour fusionner plusieurs ensembles d'images multispectrales et hyperspectrales.

4.3.2 Complexité

Cette section discute de la complexité par itération pour trois différents algorithmes de descente de gradient qui résolvent le problème de fusion. Plus précisément, nous comparons une implémentation naïve minimisant (4.5), l'algorithme fréquentiel minimisant le problème (4.12) formulé dans le domaine de Fourier et l'algorithme proposé résolvant la formulation vectorisée produisant le système linéaire (4.13). Les complexités respectives sont exprimées comme des fonctions des dimensions spatiales et spectrales

| Méthode | Itération | Prétraitement |
|---------------|--|----------------------------|
| Naïve | $l_h p_m \max \{l_{\text{sub}}, l_m, \log p_m\}$ | – |
| Frequentielle | $l_h p_m \max \{l_{\text{sub}}, l_m\}$ | $l_h p_m \log p_m$ |
| Vectorisée | $p_m l_{\text{sub}}^2$ | $l_h p_m l_{\text{sub}}^2$ |

TABLE 4.1 – Complexité asymptotique ($\mathcal{O}(\cdot)$) : une itération de l'algorithme de descente de gradient et prétraitement.

des données à fusionner, appelées p_m , l_h et l_m , et la dimension intrinsèque l_{sub} du sous-espace. Elles sont reportées dans la table 4.1 pour un cas général, i.e., sans faire d'hypothèse de prévalence d'une de ces quantités sur les autres. Cependant, pour des scénarios typiques rencontrés dans le contexte d'applications en imagerie astronomique qui sont considérés dans ces travaux, $l_{\text{sub}} \leq l_m \leq \log p_m$. Dans ce contexte, les conclusions suivantes peuvent être tirées.

En considérant une implémentation naïve, le fardeau computationnel le plus lourd pour résoudre l'équation (4.5) résulte directement de l'évaluation du gradient de la fonction de coût quadratique, ce qui aboutit à $\mathcal{O}(l_h p_m \log p_m)$ opérations. On peut noter que cette implémentation repose sur des convolutions cycliques opérées dans le domaine de Fourier mais requièrent des allers-retours dans le domaine image par FFT et iFFT à chaque itération. Quand le problème est entièrement formulé dans le domaine de Fourier (voir section 4.3.1), le coût de calcul du gradient associé au problème (4.12) est réduit à $\mathcal{O}(l_h p_m l_m)$. En vectorisant le problème, le gradient est directement donné par la matrice \mathbf{A} dans l'équation (4.14). Ainsi, les étapes clés de l'algorithme itératif résolvant (4.13) consistent en des produits matrice-vecteurs, qui nécessitent seulement $\mathcal{O}(p_m l_{\text{sub}}^2)$ opérations grâce au fort niveau de parcimonie de \mathbf{A} . Par conséquent, une itération de cette implémentation vectorisée est significativement moins complexe que les résolutions naïve et dans le domaine de Fourier.

D'autre part, tandis que l'implémentation naïve ne requière pas d'étape de pré-traitement, les deux schémas alternatifs proposés dans la section 4.3.1 reposent sur des quantités calculées préalablement. Plus précisément, pour résoudre le problème (4.12) dans le domaine fréquentiel, le calcul des FFT des images multispectrale et hyperspectrale et des PSFs sont nécessaires, pour une complexité totale de $\mathcal{O}(l_h p_m \log p_m)$. De plus, résoudre le système linéaire (4.13) implique de calculer la matrice \mathbf{A} dans l'équation (4.14) et le vecteur \mathbf{b} dans (4.15). Spécifiquement, l'étape la plus lourde est de calculer les deux premiers termes dans le membre de droite de l'équation (4.14), pour une complexité totale de $\mathcal{O}(l_h p_m l_{\text{sub}}^2)$. En conséquence, l'étape de prétraitement impliquée dans l'implémentation vectorisée est coûteuse en temps de calcul, mais cette étape n'est effectuée qu'une seule fois avant de résoudre le problème itérativement. De plus, comme mentionné précédemment, ce prétraitement est significativement allégé pour la fusion de différents ensemble d'images hyperspectrale et multispectrale puisque seulement le vecteur \mathbf{b} nécessite d'être mis à jour, sous réserve que la régularisation spatiale et que le sous-espace spectral restent inchangés. Enfin, notons qu'on réalise en général moins d'itérations avec l'algorithme de gradient conjugué.

Au delà de la complexité computationnelle, étant donné la très grande dimension des données, les problèmes soulevés par les données et les modèles instrumentaux doivent aussi être discutés. En particulier, charger en mémoire le produit fusionné entier et toutes les PSFs spectralement variantes est impossible en grande dimension en utilisant des ressources computationnelles conventionnelles. Par conséquent, résoudre le problème de fusion avec une stratégie naïve ou dans le domaine fréquentiel (voir section 4.3.1), i.e. calculer $(\mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}) \odot \dot{\mathbf{M}}$ et $(\mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}) \odot \dot{\mathbf{H}}$ à chaque itération de l'algorithme de descente, nécessite le chargement en cours de calcul de chacune des PSF, ce qui augmente substantiellement le temps de calcul. Inversement, l'implémentation vectorisée ne requiert de charger ces PSFs qu'une seule fois durant le prétraitement.

4.3.3 Résolution : cas des régularisations informées

La plus grande partie de la stratégie utilisée dans la section 4.3.1 pour résoudre rapidement le problème inverse de fusion est encore valable pour le cas de l'utilisation des régularisations informées introduites dans les sections 4.2.2 et 4.2.3. En effet, pour ces deux problèmes, chacun des termes d'attache aux données peut être exprimé dans le domaine de Fourier comme détaillé dans la section 4.3.1, réduisant ainsi le coût computationnel des opérateurs de convolution. Cependant, quelques adaptations intrinsèquement liées à la régularisation sont nécessaires et sont détaillées ci-dessous.

Régularisation Sobolev pondéré. Le problème de fusion lié à la régularisation de type Sobolev pondéré formulé dans le domaine image contient un produit terme à terme entre une matrice de poids \mathbf{W} et le produit \mathbf{ZD} , ne pouvant s'exprimer de manière judicieuse, i.e. computationnellement intéressante, dans le domaine de Fourier. Cependant, puisque le terme de régularisation ne fait pas intervenir l'opérateur de déprojection spectrale \mathbf{V} et comme la dimension du sous-espace spectral est supposée très inférieure à la dimension spectrale du problème, le coût des opérations aller-retour entre le domaine image et le domaine de Fourier dans le sous-espace spectral est moindre. On peut alors, en suivant l'identité de Parseval, écrire le problème dans le domaine de Fourier

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{Z}} = \underset{\hat{\mathbf{Z}}}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{1}{2\sigma_m^2} \left\| \dot{\mathbf{Y}}_m - \mathbf{L}_m((\mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}) \odot \dot{\mathbf{M}}) \right\|_{\mathbf{F}}^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{2\sigma_h^2} \left\| \dot{\mathbf{Y}}_h - \mathbf{L}_h((\mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}) \odot \dot{\mathbf{H}})\dot{\mathbf{S}} \right\|_{\mathbf{F}}^2 \right. \\ \left. + \mu \left\| (\mathbf{W} \odot (\hat{\mathbf{Z}} \odot \dot{\mathbf{D}})\mathbf{F}^H)\mathbf{F} \right\|_{\mathbf{F}}^2 \right) \quad (4.16) \end{aligned}$$

La matrice de transformée de Fourier discrète en 2 dimensions \mathbf{F} et sa transposée hermitienne étant des matrices pleines, tenter de vectoriser cet opérateur et par conséquent le terme de régularisation ne permettrait pas d'écrire un système linéaire équivalent composé d'une matrice fortement parcimonieuse. Les avantages de cette étape identifiés dans la section 4.3.1 ne sont donc pas atteignables en appliquant directement la réécriture

proposée. Cependant, le calcul des termes d'attache aux données peut toujours être effectuée astucieusement. En reprenant les notations de la section 4.3.1, on définit alors la matrice $\mathbf{A}_{\text{sp}} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} p_m \times l_{\text{sub}} p_m}$ et le vecteur $\mathbf{b}_{\text{sp}} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}} p_m}$ comme

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_{\text{sp}} &= \frac{1}{2\sigma_m^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{M}}^H \mathbf{L}_m^H \mathbf{L}_m \dot{\mathbf{M}} \mathbf{V} + \frac{1}{\sigma_h^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{H}}^H \mathbf{L}_h^H \dot{\mathbf{S}}^H \dot{\mathbf{S}} \mathbf{L}_h \dot{\mathbf{H}} \mathbf{V}, \\ \mathbf{b}_{\text{sp}} &= -\frac{1}{\sigma_m^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{M}}^H \mathbf{L}_m^H \dot{\mathbf{y}}_m - \frac{1}{\sigma_h^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{H}}^H \mathbf{L}_h^H \dot{\mathbf{S}}^H \dot{\mathbf{y}}_h.\end{aligned}$$

Le problème (4.16) est alors équivalent à

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{Z}} &= \underset{\mathbf{Z}}{\text{argmin}} \left(\left[\dot{\mathbf{Z}}^1, \dots, \dot{\mathbf{Z}}^{l_{\text{sub}}} \right] \mathbf{A}_{\text{sp}} \left[\dot{\mathbf{Z}}^1, \dots, \dot{\mathbf{Z}}^{l_{\text{sub}}} \right]^T \right. \\ &\quad \left. + \left[\dot{\mathbf{Z}}^1, \dots, \dot{\mathbf{Z}}^{l_{\text{sub}}} \right] \mathbf{b} + \mu \left\| (\mathbf{W} \odot (\dot{\mathbf{Z}} \odot \dot{\mathbf{D}}) \mathbf{F}^H) \mathbf{F} \right\|_{\mathbf{F}}^2 \right). \quad (4.17)\end{aligned}$$

Les opérateurs \mathbf{A}_{sp} et \mathbf{b}_{sp} rassemblent les expressions des opérateurs spatiaux et spectraux vectorisés liés aux termes d'attache aux données et peuvent encore une fois être calculés une seule fois lors d'une étape de pré-traitement. De plus, la matrice \mathbf{A}_{sp} conserve naturellement le même degré de parcimonie et la même structure en blocs que la matrice \mathbf{A} dans le système linéaire (4.14).

En considérant les calculs effectués lors du pré-traitement et le faible coût des aller-retour entre le domaine image et le domaine de Fourier dans le sous-espace spectral, le problème de fusion associé à une régularisation de type Sobolev pondéré (4.17) peut être résolu efficacement en utilisant le même type de réécriture que dans la section 4.3.1. Il est intéressant ici de souligner que, dès lors que le problème de fusion d'images avec flous spectralement variants est considéré dans un sous-espace spectral, l'implémentation rapide proposée peut être adaptée et utilisée pour traiter presque n'importe quel terme de régularisation sans augmentation importante du temps de calcul (voir section 4.6).

Régularisation par dictionnaire. Le problème de fusion lié à la régularisation par dictionnaire est un problème d'optimisation par rapport aux deux variables \mathbf{Z} et \mathbf{C} , qui ne peut pas être résolu simplement par un algorithme de descente de gradient. La stratégie proposée par Wei *et al.*, 2015 et adaptée ici est l'utilisation d'un algorithme d'optimisation alternée qui est aussi appelé *block coordinate descent*. Cet algorithme minimise successivement la fonction objectif suivant chacune des variables à optimiser. Le principe général de cet algorithme est détaillé dans l'algorithme 5.

L'optimisation par rapport à \mathbf{Z} conditionnellement à \mathbf{C} peut être effectuée efficacement en utilisant la stratégie proposée dans la section 4.3.1. Le problème peut être entièrement reformulé dans le domaine de Fourier comme

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{Z}} &= \underset{\mathbf{Z}}{\text{argmin}} \left(\frac{1}{2\sigma_m^2} \left\| \dot{\mathbf{Y}}_m - \mathbf{L}_m((\mathbf{V}\dot{\mathbf{Z}}) \odot \dot{\mathbf{M}}) \right\|_{\mathbf{F}}^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\sigma_h^2} \left\| \dot{\mathbf{Y}}_h - \mathbf{L}_h((\mathbf{V}\dot{\mathbf{Z}}) \odot \dot{\mathbf{H}}\dot{\mathbf{S}}) \right\|_{\mathbf{F}}^2 + \mu \left\| \dot{\mathbf{Z}} - \dot{\mathbf{Z}} \right\|_{\mathbf{F}}^2 \right) \quad (4.18)\end{aligned}$$

où $\dot{\mathbf{Z}} = \mathcal{P}(\mathbf{BC})\mathbf{F}$. Il est ici également possible de calculer la séquence d'opérateurs dans le sous-espace engendré par \mathbf{V} . Résoudre le problème (4.18) revient donc à résoudre le système linéaire

$$\mathbf{A}_{\text{rp}}\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{b}_{\text{rp}} \quad (4.19)$$

où $\mathbf{A}_{\text{rp}} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}}p_m \times l_{\text{sub}}p_m}$ et $\mathbf{b}_{\text{rp}} \in \mathbb{R}^{l_{\text{sub}}p_m}$ sont définis par

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\text{rp}} &= \frac{1}{2\sigma_m^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{M}}^H \mathbf{L}_m^H \mathbf{L}_m \dot{\mathbf{M}} \mathbf{V} \\ &+ \frac{1}{2\sigma_h^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{H}}^H \mathbf{L}_h^H \dot{\mathbf{S}}^H \dot{\mathbf{S}} \mathbf{L}_h \dot{\mathbf{H}} \mathbf{V} + \mu \mathbf{I}_{l_{\text{sub}}p_m}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\mathbf{b}_{\text{rp}} = -\frac{1}{\sigma_m^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{M}}^H \mathbf{L}_m^H \dot{\mathbf{y}}_m - \frac{1}{\sigma_h^2} \mathbf{V}^H \dot{\mathbf{H}}^H \mathbf{L}_h^H \dot{\mathbf{S}}^H \dot{\mathbf{y}}_h - 2\mu \dot{\mathbf{z}}. \quad (4.21)$$

avec $\dot{\mathbf{z}} = \left[\dot{\mathbf{z}}^1, \dots, \dot{\mathbf{z}}^{l_{\text{sub}}} \right]$. Le problème (4.19) est alors résolu rapidement à l'aide d'un algorithme de gradient conjugué. On notera que le calcul de la quantité \mathbf{A}_{rp} n'est effectué qu'une seule fois lors d'une étape de pré-traitement et ne nécessite pas d'être réeffectué à chaque itération de l'algorithme d'optimisation alternée. La quantité \mathbf{b}_{rp} dépend du vecteur $\dot{\mathbf{z}}$ et doit donc être mise à jour, à moindre coût, au début de chaque itération de l'algorithme d'optimisation alternée.

L'optimisation par rapport à \mathbf{C} conditionnellement à \mathbf{Z} est un problème de régression des moindres carrés

$$\hat{\mathbf{C}} = \underset{\mathbf{C}}{\text{argmin}} \left(\|\mathbf{Z} - \mathcal{P}(\mathbf{BC})\|_{\text{F}}^2 \right) \text{ tel que } \mathbf{C}_{\Omega_{\mathbf{C}}} = 0. \quad (4.22)$$

La solution de ce problème peut être calculée explicitement et rapidement à chaque itération de l'algorithme d'optimisation alternée [Wei et al., 2015].

L'optimisation du problème de fusion lié à la régularisation par dictionnaire bénéficie considérablement de la stratégie développée dans la section 4.3.1. En effet, l'optimisation alternée nécessitant la résolution multiple du problème (4.19), le calcul de la quantité \mathbf{A}_{rp} effectué lors de l'étape de pré-traitement permet de résoudre ce problème beaucoup plus rapidement que le problème (4.18) sans besoin d'exprimer les opérateurs de dégradation spatiale et spectrale dans le sous-espace spectral. Encore une fois, la résolution du problème de fusion d'images avec flous spectralement variants peut être facilement adaptée et utilisée pour traiter n'importe quel terme de régularisation nécessitant une optimisation alternée. Le gain en temps de calcul est alors d'autant plus important (voir section 4.6).

4.4 PROTOCOLE EXPÉRIMENTAL

La méthode de fusion d'images hyperspectrales et multispectrales décrite précédemment est testée dans le cadre du protocole décrit dans le chapitre 3. Un jeu de données observées, i.e. une image multispectrale et une image hyperspectrale observées, a été simulé à partir d'une scène synthétique de référence d'une région de photodissociation de la Barre d'Orion. Plusieurs visualisations de ce jeu de données de test sont montrées dans le chapitre 3. La scène de référence est composée de 4974

Algorithme 5 : Résolution du problème de fusion lié à la régularisation par dictionnaire.

Entrée : $\mathbf{Y}_m, \mathbf{Y}_h, \hat{\mathbf{M}}, \hat{\mathbf{H}}, \mathbf{L}_m, \mathbf{L}_h, \mathbf{S}, d$

Pré-traitement des données

1: Identifier la base du sous-espace spectral \mathbf{V} .

2: Calculer \mathbf{A}_{rp} d'après (4.20).

3: $\mathbf{B} = \text{ODL}(\mathbf{Y}_m)$.

4: $\mathbf{C} = \text{OMP}(\mathbf{Y}_m, \mathbf{B}, K)$.

Optimisation alternée

5: **Tant que** un critère d'arrêt n'est pas atteint **faire**

6: Calculer \mathbf{b}_{rp} d'après (4.21).

7: Optimiser (4.19) par rapport à \mathbf{Z} .

8: Optimiser (4.22) par rapport à \mathbf{C} .

9: **Fin Tant que**

Sortie : $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{V}\hat{\mathbf{Z}}$

bandes spectrales de 1 à 2.35 microns, chaque image est de taille 90×900 pixels. L'image multispectrale observée \mathbf{Y}_m est composée de 11 bandes spectrales de 90×900 pixels. L'image hyperspectrale observée \mathbf{Y}_h est composée de 4974 bandes spectrales de 30×300 pixels de telle sorte que le facteur de sous-échantillonnage considéré dans ces tests est fixé à $d = 3$. Ces deux images observées ont été générées suivant les modèles instrumentaux décrits dans le chapitre 3, incluant un modèle de bruit mixte Poisson-Gaussien. On remarquera ici que ce modèle de bruit mixte s'éloigne de l'hypothèse simplifiée de bruit Gaussien sous-jacente aux termes d'attache aux données qui définissent le problème (4.3).

4.4.1 Métriques

Les performances des algorithmes de fusion de données comparés sont évaluées selon trois métriques complémentaires mesurant la qualité de la reconstruction. Nous proposons d'évaluer la distorsion spectrale entre les spectres reconstruits et les spectres cibles à travers la métrique appelée *average spectral angle mapper* (aSAM), défini par

$$\text{aSAM}(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{X}) = \frac{1}{p_m} \sum_{p=1}^{p_m} \arccos \left(\frac{\langle \mathbf{X}_p, \hat{\mathbf{X}}_p \rangle}{\|\mathbf{X}_p\|_2 \|\hat{\mathbf{X}}_p\|_2} \right)$$

où $\hat{\mathbf{X}}_p$ est un spectre reconstruit et \mathbf{X}_p est le spectre de référence correspondant.

L'indice de similarité structurelle (acronyme anglais SSIM, *structural similarity*) est ensuite utilisé pour estimer la dégradation de l'information structurelle spatiale. L'indice SSIM est défini par

$$\text{SSIM}(\hat{\mathbf{X}}^l, \mathbf{X}^l) = \frac{(2\mu_{\hat{\mathbf{X}}^l} \mu_{\mathbf{X}^l} + C_1) (2\sigma_{\hat{\mathbf{X}}^l \mathbf{X}^l} + C_2)}{(\mu_{\hat{\mathbf{X}}^l}^2 + \mu_{\mathbf{X}^l}^2 + C_1) (\sigma_{\hat{\mathbf{X}}^l}^2 + \sigma_{\mathbf{X}^l}^2 + C_2)}$$

où $\hat{\mathbf{X}}^l$ est l -ième bande spectrale reconstruite, \mathbf{X}^l est la bande spectrale correspondante de référence et $\mu_{\hat{\mathbf{X}}^l}, \mu_{\mathbf{X}^l}, \sigma_{\hat{\mathbf{X}}^l}^2, \sigma_{\mathbf{X}^l}^2, \sigma_{\hat{\mathbf{X}}^l \mathbf{X}^l}$ sont les statistiques empiriques définies par Wang *et al.*, 2004 et $C_j \propto L^2$ ($j = 1, 2$)

est la dynamique du cube de données \mathbf{X}^l . Ici, on préférera considérer le SSIM complémentaire moyen (en anglais *average complementary SSIM*, acSSIM) à travers toutes les bandes, défini par

$$\text{acSSIM}(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{X}) = 1 - \frac{1}{l_m} \sum_{l=1}^{l_m} \text{SSIM}(\hat{\mathbf{X}}^l, \mathbf{X}^l).$$

Enfin, le *peak signal-to-noise ratio* (PSNR) global mesure la qualité globale de la reconstruction au sens des moindres carrés :

$$\text{PSNR}(\hat{\mathbf{X}}, \mathbf{X}) = 10 \log_{10} \left(\frac{\max(\mathbf{X})}{\|\mathbf{X} - \hat{\mathbf{X}}\|_{\text{F}}^2} \right)$$

où $\hat{\mathbf{X}}$ est l'image reconstruite et \mathbf{X} est l'image de référence. On notera qu'une bonne performance sera atteinte lorsque le aSAM et le acSSIM auront des valeurs basses tandis que le PSNR sera grand. Toutes ces quantités complémentaires seront moyennées sur 20 simulations Monte-Carlo dans les sections 4.5 et 4.6.

4.4.2 Méthodes comparées

Les résultats sont présentés dans les sections suivantes en deux étapes. D'abord, nous comparons la méthode de fusion de données avec flous spectralement variants décrite dans la section 4.1, appelée "fusion rapide", munie de la régularisation de type Sobolev (voir section 4.2.1) avec différentes méthodes de fusion de l'état de l'art. Une étude complète et détaillée des résultats est réalisée ainsi que des tests de robustesse aux erreurs modèle. Ensuite, nous comparons les trois différentes régularisations introduites dans la section 4.2 : la régularisation de type Sobolev, la régularisation de type Sobolev pondéré et la régularisation par dictionnaire.

La première étape des expériences, dans la section 4.5, considère d'abord une méthode de super-résolution naïve reposant sur une hypothèse de rang faible, dont il sera fait mention plus tard comme la méthode "interpolation". Cette approche consiste à interpoler spatialement la projection de l'image hyperspectrale sur le sous-espace engendré par les colonnes de \mathbf{V} à l'aide d'une interpolation par splines bicubiques pour atteindre la résolution spatiale de l'image multispectrale. C'est l'équivalent de l'image notée $\mathbf{Y}_{\text{h,int}}$ dans le chapitre 2.

Nous comparons également également nos algorithmes de fusion avec deux méthodes largement connues pour la fusion de données hyperspectrales et multispectrales ou multispectrales et panchromatiques pour l'observation de la Terre : la méthode dite de Brovey [Pohl, 1996] et la fusion rapide et robuste utilisant une équation de Sylvester (R-FUSE) [Wei *et al.*, 2016]. Ces méthodes sont décrites en détail dans le chapitre 2. La première est une approche par substitution de composantes destinée originellement à la fusion d'images multispectrales et panchromatiques. Cette méthode interpole la projection de l'image hyperspectrale sur le sous-espace spectral à la résolution de l'image multispectrale puis y injecte les détails spatiaux extraits de l'image multispectrale. Seulement l'opérateur de flou spectral \mathbf{L}_m nécessite ici d'être connu. La seconde méthode formule la tâche de fusion comme un problème inverse dérivé de modèles

directs des instruments d'observation complété par un *a priori* Gaussien. Ce problème utilise un opérateur de dégradation spectral \mathbf{L}_m lié à l'instrument d'observation multispectral et une PSF spectralement invariante liée à l'instrument d'observation hyperspectral. Dans les expériences décrites dans la section 4.5, la PSF unique est choisie comme la PSF correspondant à la longueur d'onde d'énergie moyenne. Le problème est écrit comme une équation de Sylvester et résolu analytiquement, réduisant significativement la complexité computationnelle.

Finalement, pour évaluer la pertinence de la fusion, nous comparons également notre algorithme de fusion avec ses deux versions non symétriques qui ne considèrent qu'un seul des deux termes d'attache aux données. La première version, appelé "inversion MS", résout le problème suivant

$$\hat{\mathbf{Z}} = \underset{\mathbf{Z}}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{1}{2\sigma_m^2} \|\mathbf{Y}_m - \mathbf{L}_m \mathcal{M}(\mathbf{V}\mathbf{Z})\|_{\mathbb{F}}^2 + \mu_m \|\mathbf{Z}\mathbf{D}\|_{\mathbb{F}}^2 \right)$$

où seulement le terme d'attache aux données relié à l'image multispectrale est considéré. De la même manière, la seconde version, appelée "inversion HS" et similaire à celle proposée par Hadj-Youcef *et al.*, 2018, résout le problème de super-résolution hyperspectrale suivant, qui n'inclut que le terme d'attache aux données lié à l'image hyperspectrale :

$$\hat{\mathbf{Z}} = \underset{\mathbf{Z}}{\operatorname{argmin}} \left(\frac{1}{2\sigma_h^2} \|\mathbf{Y}_h - \mathbf{L}_h \mathcal{H}(\mathbf{V}\mathbf{Z})\mathbf{S}\|_{\mathbb{F}}^2 + \mu_h \|\mathbf{Z}\mathbf{D}\|_{\mathbb{F}}^2 \right).$$

Toutes les méthodes citées précédemment requièrent une identification du sous-espace pour trouver la base \mathbf{V} . Cette étape est effectuée grâce à une ACP sur l'image hyperspectrale, comme elle contient l'information spectrale importante. Ces méthodes nécessitent également le choix d'un hyperparamètre. Dans ces travaux, l'hyperparamètre est fixé de telle sorte qu'il aboutisse aux plus grandes valeurs de PSNR et aux plus petites valeurs de aSAM et acSSIM.

La seconde étape des expériences, dans la section 4.6, compare la méthode de fusion proposée munie des trois différentes régularisations détaillées dans la section 4.2. Pour éviter la redondance des résultats et pour tirer des conclusions complémentaires, le choix de l'hyperparamètre μ est effectué de telle sorte que l'image reconstruite ait la meilleure valeur de acSSIM, i.e. le meilleur indice de reconstruction spatiale.

La régularisation de type Sobolev pondéré nécessite le choix d'un autre hyperparamètre ϵ (voir section 4.2.2). Pour la suite, on fixe $\epsilon \simeq 10$. La régularisation par dictionnaire requiert le choix préalable du nombre d'atomes du dictionnaire $n_a = 64$, la taille des patches $p_p = 81$ (i.e. des patches de taille 9×9 pixels), leur recouvrement et le nombre maximal $K = 6$ d'atomes pour chaque patchs. Ces paramètres ont été déterminés empiriquement de manière à obtenir les meilleures valeurs de PSNR, aSAM et acSSIM.

4.5 EXPÉRIENCES : RÉGULARISATION DE TYPE SOBOLEV

Cette section détaille d'abord les résultats de la fusion de données avec des flous spectralement variants décrite dans la section 4.1 munie de la

régularisation Sobolev, et la compare avec différentes méthodes de fusion de l'état de l'art. Les performances visuelles et quantitatives de chacune des méthodes sont étudiées et commentées. Nous proposons ensuite une méthode de paramétrage de la régularisation, dans le cas de fusion de données réelles lorsque la vérité terrain n'est pas disponible. Pour finir, nous étudions la robustesse de la méthode face à des erreurs modèles cohérentes avec les performances attendues de l'imageur de NIRCam et de l'IFU de NIRSpec du JWST.

4.5.1 Résultats



Les résultats de fusion obtenus par ces huit méthodes sont donnés dans la figure 4.2 sous la forme d'images RGB utilisant la même composition de couleurs que dans les figures du chapitre 3. Des zooms sur les structures nettes de la scène sont montrés dans la figure 4.3. Qualitativement, la reconstruction semble excellente. Le débruitage semble efficace pour la plupart des méthodes, avec un produit fusionné obtenu avec R-FUSE légèrement plus bruité. La méthode par interpolation et l'inversion HS ne sont pas capable de restaurer l'amplitude du signal tandis que l'inversion MS et la méthode proposée paraissent mieux reconstruire les très hautes intensités, plus spécifiquement sur les contours, comme montré dans la figure 4.3. Le gain en résolution spatiale et spectrale des images reconstruites par l'algorithme proposé comparativement aux images multispectrale et hyperspectrale est clairement visible. Le contraste entre les composantes colorées dans l'image multispectrale observée est restauré, tout comme des détails spatiaux floutés dans l'image hyperspectrale observée. On observe cependant des artefacts autour des structures de l'image, en bleu clair. Une partie des artefacts est due à la déconvolution spatiale et ils sont majoritairement présents dans les images reconstruites par l'inversion MS et la méthode proposée. L'autre partie des artefacts est due à la super-résolution spatiale et sont présents dans les images reconstruites par l'inversion HS et la méthode proposée. Ces artefacts disparaissent lorsque la régularisation est plus forte (voir section 4.6) mais cela implique une

FIGURE 4.2 – De haut en bas : Compositions colorées des images fusionnées reconstruites par la méthode par interpolation, la méthode Brovey, R-FUSE, l'inversion HS, l'inversion MS et la méthode de fusion rapide proposée. La composition des couleurs est la même que dans les figures du chapitre 3.

moins bonne reconstruction des spectres.

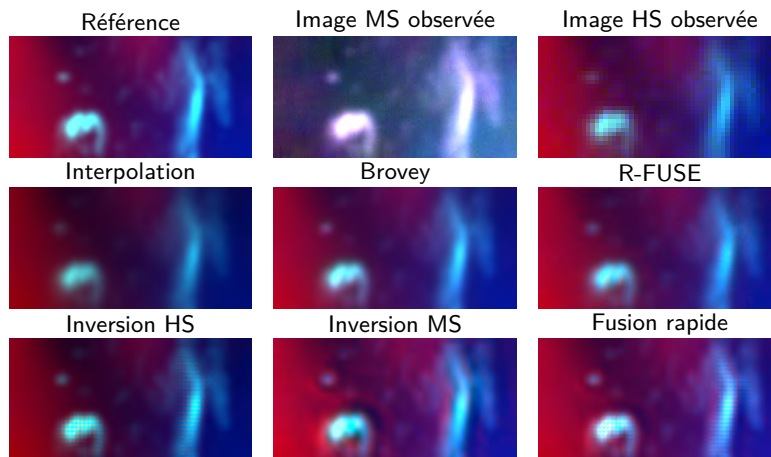


FIGURE 4.3 – Zooms sur les fortes structures extraites du chapitre 3 et de la figure 4.2 (images fusionnées par les méthodes comparées).

Pour mieux évaluer les performances des méthodes, les résultats quantitatifs sont reportés dans la table 4.2. Les deux meilleurs résultats pour chaque mesure sont accentués en gras. Comme attendu, l'inversion HS montre une valeur de aSAM très basse, c'est-à-dire une reconstruction spectrale excellente mais une mauvaise reconstruction spatiale avec la deuxième valeur la moins bonne de acSSIM. D'autre part, l'inversion MS fournit la meilleure reconstruction spatiale mais la plus mauvaise reconstruction spectrale. Notre méthode fournit la deuxième meilleure reconstruction spatiale et spectrale, comme un compromis entre l'inversion HS et l'inversion MS. La meilleure reconstruction globale est atteinte par l'inversion MS, notre méthode et l'inversion HS, améliorant les résultats de la méthode par interpolation jusqu'à 8dB. Les méthodes de l'état de l'art donnent des résultats quantitatifs similaires avec une valeur de PSNR légèrement meilleure pour la méthode Brovey. Abstraction faite du temps de prétraitement, toutes les méthodes comparées dans leur implémentation optimale sont très rapides et accomplissent la fusion en moins de 30 secondes. Pour accentuer l'intérêt de la formulation dans le domaine de Fourier et la vectorisation sous-jacentes à l'algorithme proposé, la table reporte également le temps de calcul que requièrent les versions non optimisées de l'algorithme proposé, appelées implémentation naïve et implémentation fréquentielle (i.e., sans vectorisation). Rappelons que les trois algorithmes résolvent exactement le même problème de minimisation et fournissent donc les mêmes résultats de fusion. Ces temps de calcul montrent les gains respectifs atteints pour la mise en place de chacune des étapes décrites dans la section 4.3. En particulier, on peut observer que la résolution vectorisée proposée (incluant l'étape de prétraitement) réduit le temps de calcul jusqu'à 8 et 16 fois par comparaison avec les implémentations fréquentielle et naïve, respectivement. Il est aussi important de remarquer que l'étape de prétraitement nécessaire pour notre méthode de fusion après vectorisation consiste à pré-calculer les quantités qui ne dépendent pas des images à fusionner. Par conséquent, si les spécifications instrumentales définissant les modèles directs et le sous-espace spectral défini par \mathbf{V} restent inchangés, cette étape de pré-traitement n'a besoin d'être effectuée qu'une seule fois pour fusionner plusieurs jeux de données.

| Méthodes | aSAM (rad) | acSSIM | PSNR (dB) | Temps de calcul (s) | |
|---------------|---------------|---------------|---------------|--------------------------|--------------------------|
| Interpolation | 0.0296 | 0.0428 | 66.88 | / | |
| Brovey | 0.0304 | 0.0040 | 71.04 | 17 | |
| R-FUSE | 0.0360 | 0.0036 | 69.68 | 26 | |
| Inversion HS | 0.0118 | 0.0239 | 72.90 | 1600 + 20 | |
| Inversion MS | 0.0389 | 0.0018 | 75.00 | 600 + 15 | |
| Fusion | Naïve | | | $\approx 36 \times 10^3$ | |
| | Fréquentielle | 0.0247 | 0.0029 | 74.90 | $\approx 18 \times 10^3$ |
| | Vectorisée | | | 2200 + 20 | |

TABLE 4.2 – Performances des méthodes de fusion : aSAM, acSSIM, PSNR, et temps de calcul (prétraitement + fusion).

La figure 4.4 présente les cartes d'erreur SAM. Ces erreurs spectrales ont été calculées entre les spectres de référence et reconstruits sans moyennage sur les pixels. Cette figure souligne que, pour chaque méthode, les spectres situés autour des structures de la scène (caractérisées par une région à fort gradient) sont moins bien reconstruits (pixels jaunes). Cette mauvaise reconstruction est encore plus accentuée pour les méthodes de référence, Brovey, R-FUSE et l'inversion MS tandis que l'inversion HS et la méthode proposée fournissent les SAM maximum les plus bas. Pour la plupart des méthodes, on peut l'expliquer par le choix des régularisations, qui promeuvent un contenu spatial lisse et distribuent donc le flux sur un ensemble de pixels voisins, menant à des plus grandes valeurs de SAM. Au contraire, dans les régions spatialement lisses, toutes les méthodes présentent un erreur spectrale très faible. La figure 4.5 représente les erreurs cSSIM en fonction de la longueur d'onde, i.e., sans moyennage sur les bandes spectrales. La méthode par interpolation et l'inversion HS montrent des erreurs spatiales très grandes alors que l'inversion MS et la méthode proposée fournissent les meilleures valeurs de cSSIM. Entre les deux, les méthodes Brovey et R-FUSE présentent des erreurs spatiales intermédiaires et qui augmentent légèrement avec la longueur d'onde. Ce peut être expliqué par le fait que la méthode R-FUSE exploite une unique PSF, c'est-à-dire qu'elle néglige le flou spatial spectralement variant qui affecte les données. En effet, les bandes de plus grande longueur d'onde sont plus floues que celles de plus petite longueur d'onde et, par conséquent, sont moins bien reconstruites avec un modèle inapproprié. Le spectre de référence affiché en bas du graphique met en lumière que les variations de cSSIM en fonction de la longueur d'onde sont corrélées avec les raies d'émission de haute intensité dans la scène. Ce phénomène est aussi probablement dû au terme de régularisation qui favorise les images lisses, en particulier dans les bandes spectrales de haute intensité.

Les figures 4.6 et 4.7 montrent respectivement les histogrammes cumulés des erreurs SAM et cSSIM. D'après la figure 4.6, R-FUSE apparaît comme la méthode qui fournit une grande erreur systématique et un grand nombre de pixels avec une valeur de SAM plus grande que 10^{-1} rad.

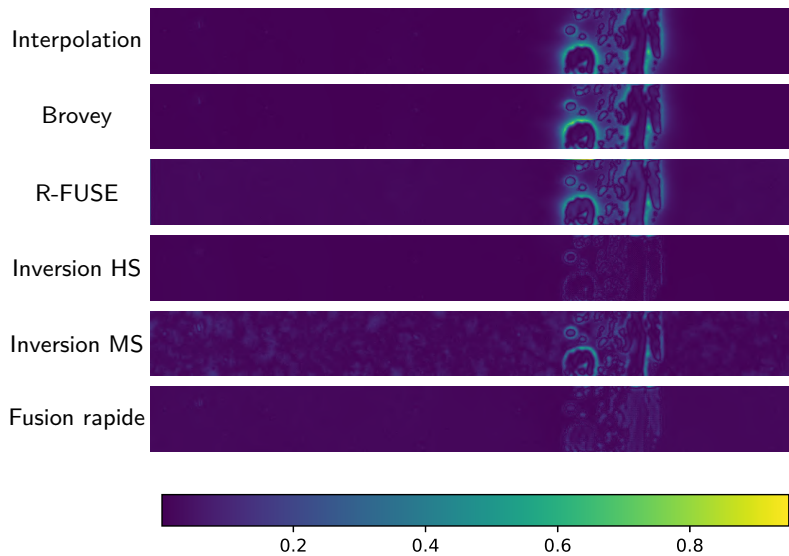


FIGURE 4.4 – Cartes spatiales de la métrique SAM obtenues par, de haut en bas, les méthodes par interpolation, Brovey, R-FUSE, les inversions HS et MS et la méthode de fusion rapide proposée. La reconstruction est meilleure pour des petites valeurs de SAM.

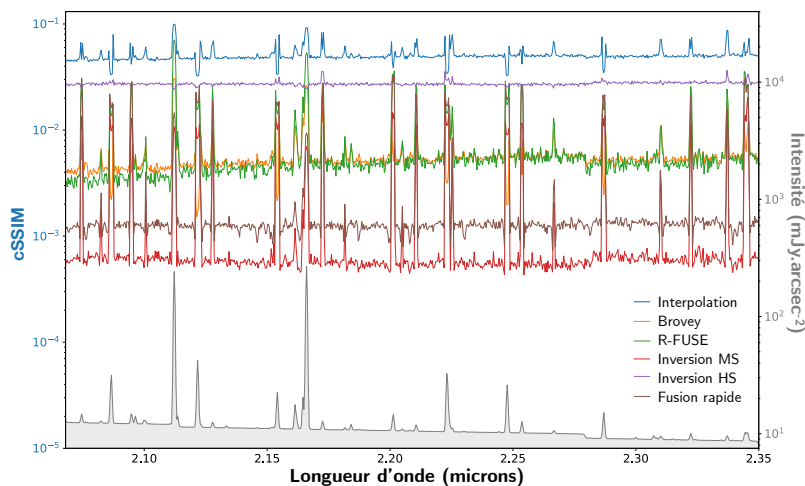


FIGURE 4.5 – Lignes colorées : cSSIM en fonction de la longueur d'onde obtenu par les méthodes comparées. La reconstruction est meilleure pour des petites valeurs de cSSIM. Ligne grise et ombragée : un spectre de la scène de référence situé sur une structure.

Au contraire, l'inversion MS et la méthode proposée montrent également une grande erreur systématique mais un petit nombre de pixels avec une grande valeur de SAM. D'autre part, les méthodes de référence et Brovey présentent une faible erreur systématique mais un grand nombre de pixels avec une grande valeur de SAM. L'inversion HS montre le meilleur histogramme cumulé avec une faible erreur systématique et un petit nombre de pixels avec une grande valeur de SAM. Cependant, dans la figure 4.7, cette méthode, ainsi que la méthode par interpolation, fournissent une très haute valeur de cSSIM (supérieure à 10^{-2}) pour toutes les bandes spectrales, tandis que toutes les autres méthodes montrent une erreur systématique bien plus faible. La méthode Brovey et l'inversion MS semblent avoir un très petit nombre de bandes spectrales avec une grande valeur de cSSIM, mais la méthode Brovey montre une plus grande erreur systématique. R-FUSE et la méthode proposée présentent un histogramme cumulé du cSSIM intermédiaire, avec un plus grand nombre de bandes spectrales avec une grande valeur de cSSIM pour la méthode R-FUSE.

Étant données ces deux figures, notre méthode proposée apparaît encore une fois comme un compromis entre une bonne reconstruction spatiale et spectrale.

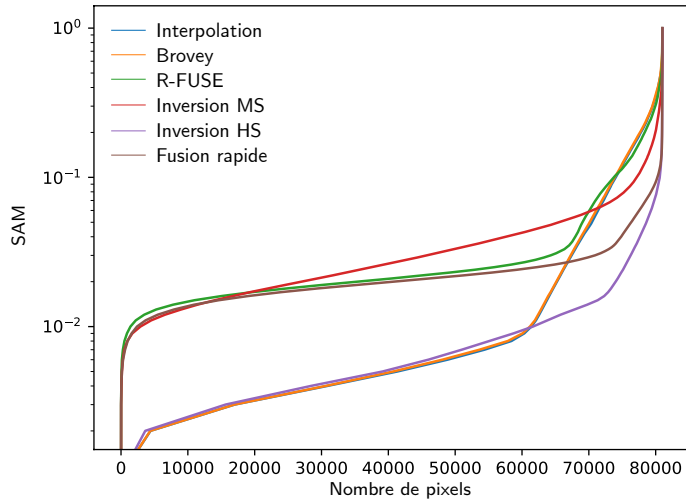


FIGURE 4.6 – Histogrammes cumulés des valeurs de SAM.

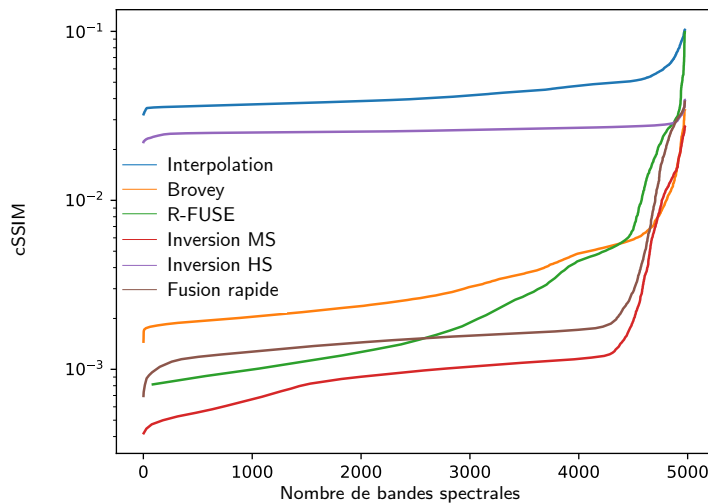


FIGURE 4.7 – Histogrammes cumulés des valeurs de cSSIM.

4.5.2 Paramétrage de la régularisation

Pour choisir une valeur appropriée du paramètre de régularisation μ dans l'équation (4.5), nous évaluons les performances de l'algorithme de fusion proposé en contrôlant les valeurs de aSAM, de acSSIM et de PSNR en fonction de μ . Les résultats sont décrits dans la figure 4.8. Dans les simulations, nous avons sélectionné $\mu = 2.10^{-5}$ comme un compromis entre les valeurs fournissant les meilleurs aSAM, acSSIM et PSNR. Remarquons que, pour un large intervalle de valeurs de μ (vert foncé, entre $1.2.10^{-5}$ et 2.10^{-4}), l'algorithme proposé surpasse toujours les algorithmes de l'état de l'art.

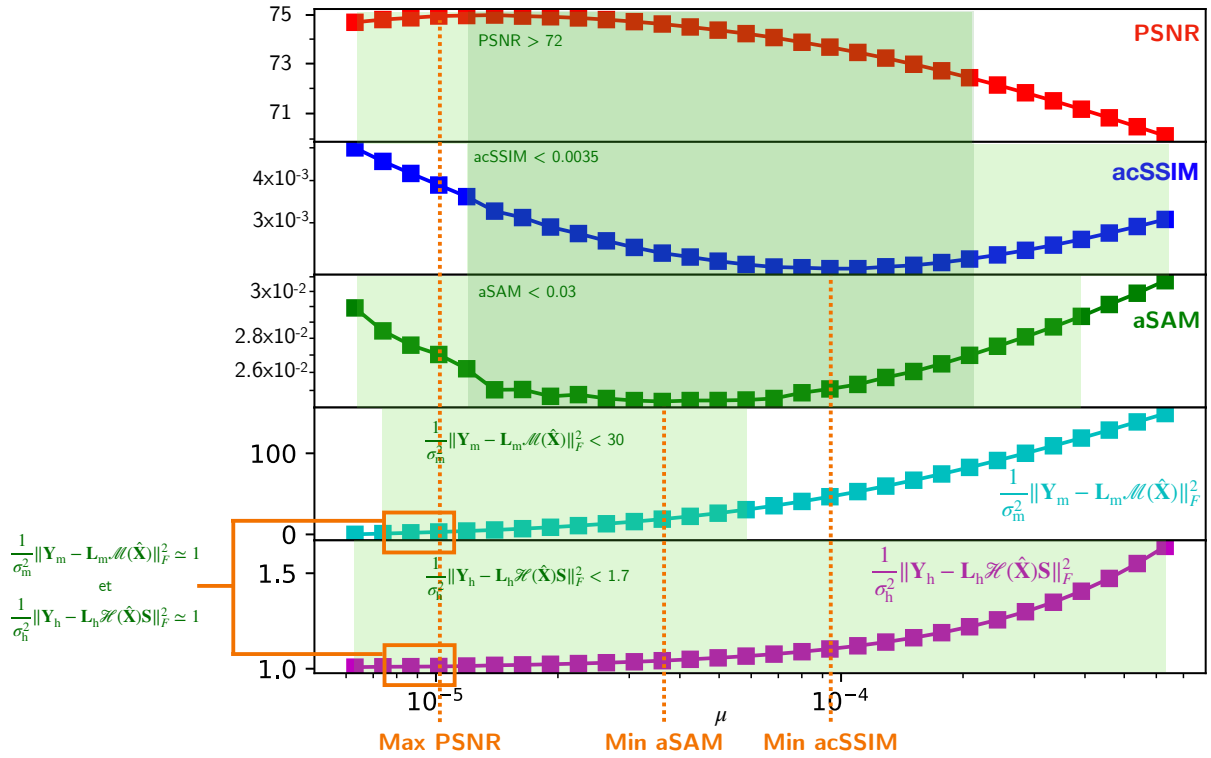


FIGURE 4.8 – Performance (en terme de PSNR, acSSIM et aSAM) de l’algorithme de fusion proposé en fonction du paramètre de régularisation μ . Les zones ombrées en vert indiquent l’intervalle des valeurs pour lesquelles l’algorithme proposé surpasse les méthodes de l’état de l’art. Les maximum et minimum de ces métriques sont indiqués en pointillés oranges. Les deux dernières courbes affichent les valeurs des termes d’attache aux données de l’équation (4.24). Les zones ombrées en vert indiquent l’intervalle des valeurs pour lesquelles les termes d’attache aux données sont inférieurs à 30 et 1.7, respectivement. Les carrés oranges indiquent que ces termes d’attache aux données sont tous les deux environ égaux à 1.

Dans le cas d’une fusion de données réelles, lorsqu’aucune image de référence n’est disponible, ce qui empêche donc le calcul de métriques de performance, nous proposons d’ajuster le paramètre de régularisation μ automatiquement grâce à une approche appelée *Mozorov principle* [Anzengruber et Ramlau, 2009]. Plus précisément, on suppose que la valeur optimale de ce paramètre fournit un produit fusionné $\hat{\mathbf{X}}$ tel que les résidus définis par les modèles directs instrumentaux sont de l’ordre du niveau de bruit dans les images, i.e.

$$\|\mathbf{Y}_m - \mathbf{L}_m \mathcal{M}(\hat{\mathbf{X}})\|_F^2 \approx \sigma_m^2 \quad (4.23)$$

$$\|\mathbf{Y}_h - \mathbf{L}_h \mathcal{H}(\hat{\mathbf{X}})\mathbf{S}\|_F^2 \approx \sigma_h^2. \quad (4.24)$$

Par conséquent, si les résidus sont plus grands (resp. plus petits) que le niveau de bruit, nous réduisons (resp. augmentons) la valeur de μ . Comme illustré dans la figure 4.8, la valeur finale obtenue par cette procédure itérative correspond aux résultats ayant la meilleure reconstruction globale.

4.5.3 Étude de la robustesse de la méthode

Toutes les expériences rapportées ci-dessus ont été menées en supposant une connaissance parfaite des modèles directs (4.1) et (4.2), c’est-à-dire une conception idéale des filtres \mathbf{L}_m et \mathbf{L}_h et une calibration idéale des PSFs définissant $\mathcal{M}(\cdot)$ et $\mathcal{H}(\cdot)$. En effet, les performances des algorithmes de fusion proposés ont été évaluées sur des ensembles d’images hyperspectrales et multispectrales générés suivant le cadre de simulation détaillé

dans le chapitre 3. Par conséquent, le génération des données et la procédure de fusion reposent sur exactement les mêmes modèles directs, une stratégie de test appelée en anglais “*inverse crime*” [Kaipio et Somersalo, 2007]. Pour se différencier de ce protocole expérimental questionnable, de nouveaux jeux d'images multispectrales et hyperspectrales sont générés en perturbant les réponses spatiales et spectrales nominales des modèles directs instrumentaux (4.1) et (4.2), alors que, conjointement, ces réponses nominales sont toujours utilisées dans les modèles directs sous-jacents au processus de fusion. Ces expérimentations additionnelles détaillées par la suite permettent d'évaluer l'impact d'une inadéquation d'un modèle direct sur les performances attendues de la fusion.

Plus précisément, dans ces nouvelles expériences, les filtres spectraux nominaux \mathbf{L}_m et \mathbf{L}_h des modèles directs ont été corrompus par un bruit gaussien additif et centré. La variance de ce bruit a été ajustée de telle sorte que les SNR correspondants soient égaux à 50dB. On suppose que cette corruption est de faible énergie puisque la conception de filtres spectraux embarqués sur des télescopes spatiaux ne dépend pas de la scène observée, est réputée pour être de haute précision et ne varie pas dans le temps. Au contraire, la source principale d'erreurs sur la calibration des PSFs $\mathcal{M}(\cdot)$ and $\mathcal{H}(\cdot)$ est l'instabilité potentielle du télescope, qui est plus susceptible de se produire pour des temps d'exposition longs. Pour reproduire ces erreurs, les PSFs nominales sont floutées avec un noyau gaussien suivant la stratégie utilisée par l'outil *webbpsf* [Perrin et al., 2012]. La variance des noyaux gaussiens a été choisie pour reproduire d'un facteur 1 à 8 les oscillations nominales attendues du télescope, qui sont d'un angle solide de 7.0×10^{-3} arcsec. (2.0×10^{-6} degrés), fournies par *webbpsf*.

Le nouveau jeu de données résultant a été fusionné par la méthode proposée en prenant en compte les filtres spatiaux et spectraux nominaux. La table 4.3 décrit les performances de la méthode de fusion pour des réponses spectrales bruitées et un niveau d'oscillation du télescope croissant. Notons qu'un niveau d'oscillations de $\times 1$ correspond à une réponse spatiale nominale et ce cas reflète donc seulement une erreur de modèle spectrale. La reconstruction spatiale (acSSIM) et spectrale (aSAM) reste stable et est équivalent à la précision des performances reportées dans la table 4.2 sans erreur de modèle. Cependant, une légère baisse de la performance en reconstruction globale est constatée quand les oscillations du télescope augmentent, mais la méthode de fusion proposée surpasse toujours les méthodes de l'état de l'art.

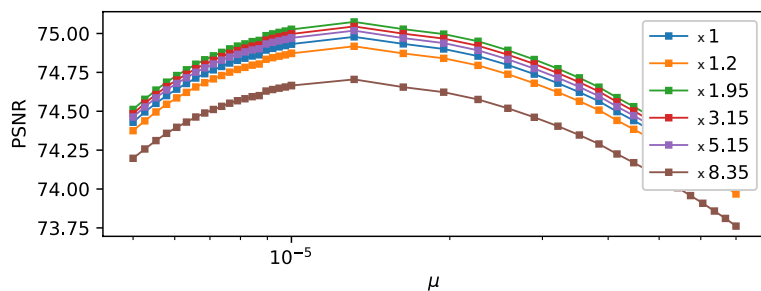


FIGURE 4.9 – Performances (en terme de PSNR) de l'algorithme de fusion proposé en fonction du paramètre de régularisation μ pour des niveaux différents d'oscillations du télescope et des réponses spectrales bruitées.

| Oscillations | aSAM | acSSIM | PSNR |
|--------------|--------|--------|-------|
| × 1.00 | 0.0250 | 0.0029 | 74.90 |
| × 1.20 | 0.0250 | 0.0029 | 74.84 |
| × 1.95 | 0.0250 | 0.0029 | 74.99 |
| × 3.15 | 0.0250 | 0.0029 | 74.97 |
| × 5.15 | 0.0249 | 0.0029 | 74.93 |
| × 8.35 | 0.0250 | 0.0029 | 74.62 |

Comme pour les expériences reportées dans la section 4.5.1, ces performances ont été obtenues pour une valeur optimale du paramètre de régularisation μ , i.e., fournissant les meilleurs PSNR, aSAM et acSSIM. La procédure automatique pour ajuster l'hyperparamètre (voir section 4.5.2) a été également testée et a montré des résultats cohérents. Pour l'illustrer, de la même manière que pour les résultats présentés dans la figure 4.8, la figure 4.9 trace le PSNR en fonction de μ pour différents niveaux d'oscillations du télescope et une dégradation constante des réponses spectrales. Ces courbes montrent que l'erreur de modèle n'entraîne qu'un décalage vertical des performances. Par conséquent, même en présence d'erreurs modèle, la stratégie proposée pour ajuster le paramètre de régularisation est capable de fournir des résultats cohérents, avec un impact limité sur les performances attendues du processus de fusion.

4.6 EXPÉRIENCES : RÉGULARISATIONS INFORMÉES

4.6.1 Résultats



FIGURE 4.10 – De haut en bas : compositions colorées de l'image originale et des images fusionnées reconstruites par la méthode proposée munie de chacune des régularisations détaillées dans la section 4.2 : la régularisation de type Sobolev, la régularisation de type Sobolev pondérée et la régularisation par dictionnaire.

Cette section décrit les résultats de notre méthode de fusion munie des trois régularisations différentes proposées dans la section 4.2 : la régularisation Sobolev, la régularisation Sobolev pondéré et la régularisation par dictionnaire appelées par la suite respectivement "Sobolev", "Sobolev pondéré" et "Dictionnaire". Les résultats de la fusion sont montrés dans la figure 4.10 sous la forme de compositions colorées RGB (voir chapitre 3) accompagnées de la vérité terrain. Des zooms sur les structures de la scène

sont présentés dans la figure 4.11. La reconstruction semble ici aussi qualitativement bonne, pour les trois versions. Le débruitage semble efficace, le contraste entre les composantes colorées est restauré, ainsi que la majorité des détails spatiaux. Comme indiqué dans la section 4.4.2, les résultats sélectionnés et affichés ici sont ceux pour lesquels le meilleur indice de reconstruction spatiale a été atteint. Pour les trois versions, le produit de fusion a donc été obtenu en utilisant un paramètre de régularisation plus grand que pour les résultats montrés dans la section 4.5. Les compositions colorées montrent, comme on peut le prévoir lorsque la régularisation est plus forte, moins d'artefacts liés à la super-résolution ou la déconvolution. Ce phénomène est particulièrement flagrant pour les résultats liés à la régularisation Sobolev présentés dans les figures 4.3 et 4.11. En contrepartie, on observe un léger lissage des structures de l'image. Les trois versions de la fusion donnent des résultats qualitativement très similaires, notamment ceux liés à la régularisation Sobolev et la régularisation Sobolev pondéré, l'image originale étant majoritairement lisse. On observe cependant que l'intensité du front, en bleu clair, est mieux restaurée par la fusion utilisant la régularisation Sobolev pondéré. Les structures de l'image liée à la régularisation par dictionnaire semblent moins nettes et un motif de la taille des patches apparaît légèrement. L'annexe C.3 présente les coupes à travers les structures brillantes (en bleu clair dans la figure 4.11) de la raie du Fe^+ à $1.644 \mu\text{m}$ pour les images de référence, hyperspectrale et reconstruites par la méthode de fusion proposée munie de chacune des régularisations. Des conclusions similaires peuvent en être tirées. De plus, cette annexe illustre le gain important en résolution spatiale des produits fusionnés par rapport à l'image hyperspectrale observée, notamment dans les zones de structures.

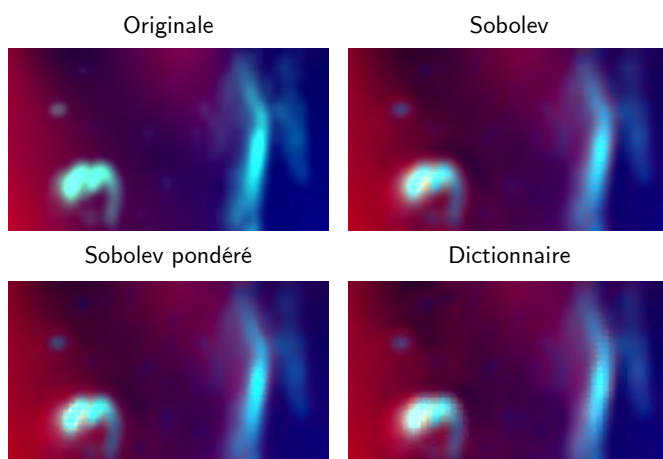


FIGURE 4.11 – Zoom sur les structures extraites de la figure 4.10.

Les résultats quantitatifs permettant de mieux évaluer les versions de la méthode de fusion sont reportés dans la table 4.4. Les meilleurs résultats pour chaque mesure sont accentués en gras. Comme pour les résultats qualitatifs, les performances de ces différentes versions de la fusion sont très proches. L'indice de bonne reconstruction spectrale (aSAM) de la fu-

sion avec les régularisations Sobolev et Sobolev pondéré est environ 10% meilleur que celui de la fusion liée à la régularisation par dictionnaire. L'indice de bonne reconstruction spatiale (acSSIM) de la fusion par régularisation Sobolev pondéré est environ 10% et 15% meilleur que ceux de la fusion par régularisation Sobolev et par dictionnaire, respectivement. La reconstruction globale (PSNR) de la fusion par régularisation Sobolev pondéré améliore de plus de 1dB et de presque 2dB la reconstruction globale de la fusion par régularisation Sobolev et par dictionnaire, respectivement. Comme attendu, la tâche de fusion est effectuée plus rapidement lorsque la régularisation choisie est celle de type Sobolev. Cependant, les

| Régularisation | aSAM | acSSIM | PSNR | Temps de calcul |
|-----------------|--------------|---------------|--------------|------------------|
| Sobolev | 0.025 | 0.0022 | 73.75 | 2200 + 15 |
| Sobolev pondéré | 0.025 | 0.0020 | 74.97 | 2200 + 75 |
| Dictionnaire | 0.028 | 0.0024 | 73.01 | 2700 + 15 |

allers-retours entre le domaine image et le domaine de Fourier dans le sous-espace spectral nécessaires à la résolution du problème de fusion associé à la régularisation de type Sobolev pondéré n'allongent le temps de calcul que de 60 secondes. Concernant la fusion liée à la régularisation par dictionnaire, l'estimation du dictionnaire augmente le temps de pré-traitement mais la stratégie de reformulation dans le domaine de Fourier et la vectorisation du problème permettent à l'optimisation alternée, qui nécessite plusieurs résolutions du problème (4.18), d'être aussi rapide que la résolution du problème de fusion lié à la régularisation de type Sobolev. On peut l'expliquer de plusieurs manières. Tout d'abord, l'optimisation alternée ne nécessite que peu d'itérations externes (i.e. alternance entre les problèmes (4.18) et (4.22)) de telle sorte que le problème (4.18) n'est résolu qu'un petit nombre de fois (< 10). Ensuite, la résolution de ce problème, en utilisant les stratégies proposées, ne requiert qu'une dizaine de secondes puisque les quantités impliquées, coûteuses en calcul, sont calculées lors de l'étape de pré-traitement et non au début de chaque itération externe. Par conséquent, l'utilisation d'une régularisation spatiale exprimée dans le domaine image ou nécessitant une optimisation alternée habituellement très coûteuse n'implique pas d'augmentation significatif du temps de calcul grâce aux stratégies adaptables proposées dans la section 4.3.

La table 4.5 donne les performances des méthodes évaluées uniquement sur la zone de front de l'image donnée dans la figure 4.11. Cette zone très contrastée est particulièrement difficile à reconstruire, comme le montrent les résultats de la section 4.5. L'image reconstruite et l'image de référence ont ainsi été recadrées autour des zones de frontières, en bleu clair, sur une surface de 90×140 pixels afin de calculer les métriques de performance. Les meilleurs résultats pour chaque mesure sont également accentués en gras et sont obtenus pour la fusion par régularisation Sobolev pondéré. Les performances sont ici plus tranchées. Le meilleur indice de bonne reconstruction spectrale (aSAM) est atteint lors de l'utilisation

TABLE 4.4 – Performances de la méthode de fusion proposée associées aux trois régularisations présentées dans la section 4.2 : aSAM (rad), acSSIM, PSNR (dB), et temps de calcul (pré-traitement + fusion, secondes).

de la régularisation Sobolev pondéré, très proche du résultat obtenu par la fusion avec régularisation Sobolev. Cet indice est environ 20% moins bon pour le produit fusionné à l'aide de la dictionnaire. L'indice de bonne reconstruction spatiale (acSSIM) de la zone frontière du produit fusionné lié à la régularisation Sobolev pondéré est ici environ 17% meilleur que ceux de la fusion par régularisation Sobolev et par dictionnaire. La reconstruction globale (PSNR) de la fusion relative à la régularisation Sobolev pondéré sur la zone de front améliore de plus de 1dB et de presque 2dB la reconstruction globale de la fusion par régularisation Sobolev et par dictionnaire, respectivement. Le constat est ici le même que lorsque les performances sont calculées sur l'image entière, dans la table 4.4. L'image à reconstruire étant majoritairement spatialement lisse et ne comporte que peu de redondance spatial, la fusion par régularisation par dictionnaire est moins adaptée que la régularisation Sobolev pondéré.

| Régularisation | aSAM | acSSIM | PSNR |
|-----------------|--------------|---------------|--------------|
| Sobolev | 0.053 | 0.0046 | 65.69 |
| Sobolev pondéré | 0.051 | 0.0038 | 66.92 |
| Dictionnaire | 0.064 | 0.0045 | 65.04 |

TABLE 4.5 – Performances évaluées sur les zones de front de l'image (voir figure 4.11) de la méthode de fusion proposée associées aux trois régularisations présentées dans la section 4.2 : aSAM (rad), acSSIM et PSNR (dB).

La figure 4.12 présente les cartes d'erreur SAM. Ces erreurs spectrales ont été calculées entre les spectres de référence et reconstruits sans moyennage sur les pixels. Pour chaque régularisation associée à la méthode de fusion proposée, les spectres situés autour des structures de la scène (caractérisées par une région à fort gradient) sont mal reconstruits (pixels jaunes). Les trois versions de la méthode fournissent des erreurs SAM similaires. On retrouve cependant des erreurs plus faibles autour de certaines structures lors de l'utilisation de la régularisation de type Sobolev pondéré. Un motif de la taille des patches est observé sur la carte d'erreurs de la fusion par dictionnaire. La figure 4.12 représente les erreurs cSSIM en fonction de la longueur d'onde, i.e., sans moyennage sur les bandes spectrales. Les résultats sont, pour cette métrique également, très similaires. Le spectre de référence affiché en bas du graphique souligne la corrélation entre les variations de cSSIM en fonction de la longueur d'onde et les raies d'émission de haute intensité dans la scène, comme observé dans la figure 4.5. Pour la majorité des longueurs d'onde affichées, le produit fusionné par régularisation de type Sobolev pondéré présente une erreur cSSIM plus basse que le produit fusionné par régularisation de type Sobolev. Ce dernier présente une erreur cSSIM plus basse que le produit fusionné par régularisation par patches. Ces écarts sont moins importants pour des longueurs d'onde correspondant à des raies de haute intensité dans le spectre.

Les figures 4.14 a) et b) montrent respectivement les histogrammes cumulés des erreurs cSSIM et SAM. Encore une fois, ces erreurs sont très similaires pour toutes les régularisations associées au problème de fusion. D'après la figure 4.14 a), la régularisation par patches fournit une erreur systématique plus grande et un plus grand nombre de pixels avec une

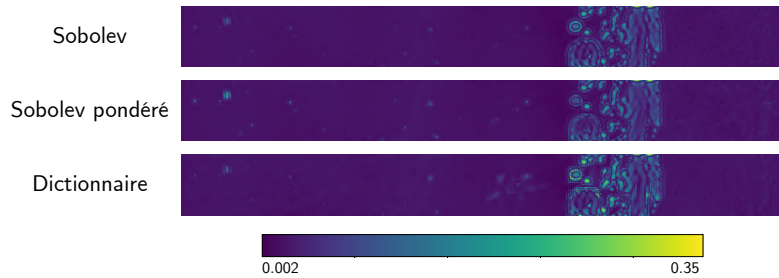


FIGURE 4.12 – Cartes spatiales de la métrique SAM obtenues par la méthode de fusion proposée munie, de haut en bas, de chacune des régularisations détaillées dans la section 4.2 (la régularisation de type Sobolev, la régularisation de type Sobolev pondérée et la régularisation par dictionnaire).

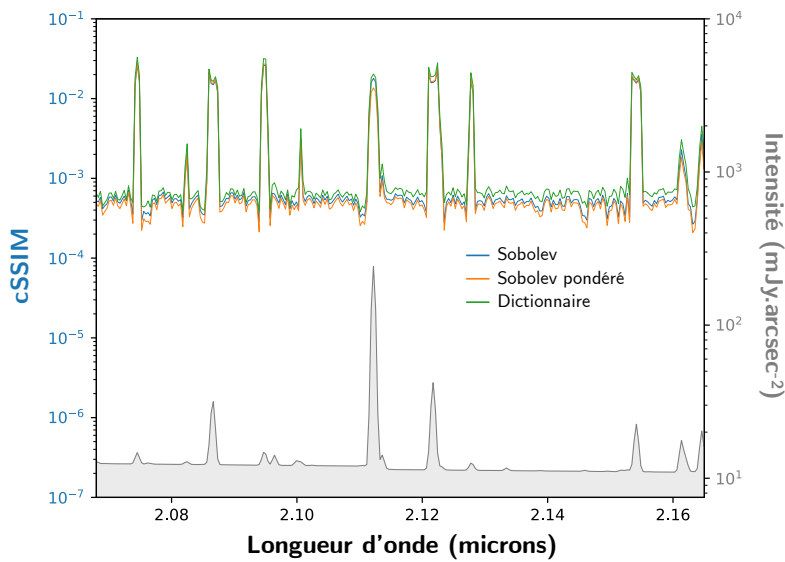


FIGURE 4.13 – Lignes colorées : cSSIM en fonction de la longueur d'onde obtenu par la méthode de fusion munie des régularisations citées précédemment. La reconstruction est meilleure pour des petites valeurs de cSSIM. Ligne grise et ombragée : un spectre de la scène de référence situé sur une structure de l'image.

grande valeur de cSSIM que les deux autres régularisations. La fusion munie de la régularisation de type Sobolev fournit une plus grande erreur systématique que la fusion associée à la régularisation de type Sobolev pondéré mais un nombre de pixels ayant une grande valeur de cSSIM très similaire. La figure 4.14 **b)** montre que la répartition des erreurs SAM est très semblable pour les trois méthodes proposées. Ce résultat est cohérent, puisque les méthodes ne diffèrent que par leur régularisation spatiale. Les modèles instrumentaux, ainsi que la régularisation spectrale implicite imposant un sous-espace spectral de faible dimension, sont exactement les mêmes, ce qui aboutit à des produits fusionnés dont la qualité de la reconstruction spectrale est très proche.

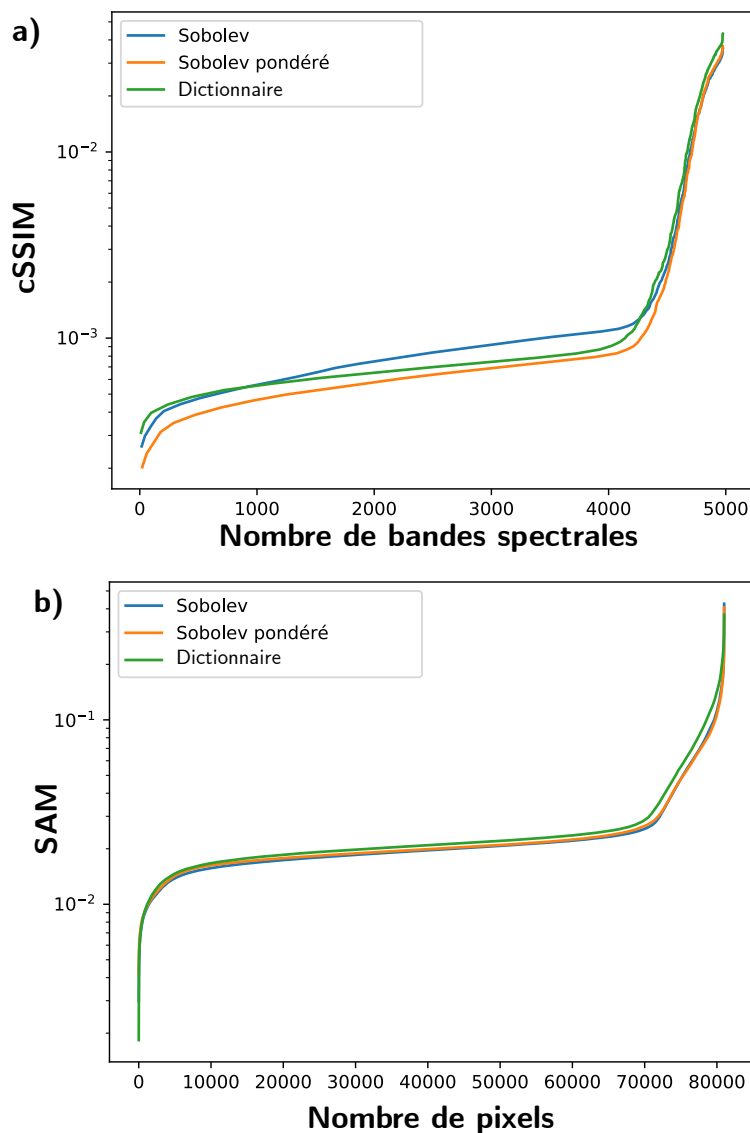


FIGURE 4.14 – **a)** : Histogrammes cumulés des valeurs de cSSIM obtenues par la méthode de fusion munie des régularisations citées précédemment. **b)** : Histogrammes cumulés des valeurs de SAM obtenues par la méthode de fusion munie des régularisations citées précédemment.

4.6.2 Influence de la régularisation sur le choix de l'hyperparamètre μ

Pour chacune des versions de la fusion proposée, nous évaluons les performances de reconstruction globale (PSNR, en rouge), spatiale (acSSIM, en vert) et spectrale (aSAM, en bleu) des algorithmes en fonction du paramètre de régularisation μ , qui contrôle la force de cette dernière. Les résultats sont décrits dans la figure 4.15. Pour chaque sous-figure, les zones ombragées en vert clair indiquent l'intervalle des valeurs pour lesquelles l'algorithme proposé surpasse les méthodes de l'état de l'art, c'est-à-dire lorsque le PSNR dépasse une valeur de 72dB ou lorsque les indices acSSIM ou aSAM sont respectivement inférieurs à 0.0035 et 0.03. Les zones ombragées en vert foncé indiquent que les trois conditions citées précédemment sont réunies. On notera que l'axe des abscisses est différent pour chaque sous-figure. Par conséquent, la différence de largeur entre les zones ombragées vertes entre les sous-figures n'est pas pertinente. Les maximum et minimum de ces métriques sont indiqués en pointillés oranges.

L'algorithme de fusion muni de la régularisation Sobolev fournit des résultats dont les performances maximales et minimales correspondent à des valeurs du paramètre μ différentes. En effet, le paramètre donnant un résultat de PSNR maximal est environ 3.5 et 10 fois inférieur à ceux donnant des résultats d'indices aSAM et acSSIM minimaux, respectivement. Le même phénomène est observé lors de l'utilisation de la régularisation par patches. Le paramètre donnant un résultat de PSNR maximal est environ 3 et plus de 30 fois inférieur à ceux donnant des résultats d'indices aSAM et acSSIM minimaux, respectivement. L'algorithme de fusion muni de la régularisation Sobolev pondéré fournit quant à lui des performances optimales correspondant à des valeurs du paramètre μ rapprochées quelles que soient les métriques. Les résultats de PSNR maximal correspondent à une valeur du paramètre de régularisation seulement 1.2 fois supérieur et 2 fois inférieure aux produits fusionnés liés aux résultats d'indices aSAM et acSSIM minimaux, respectivement. Cette version de l'algorithme proposé permet donc d'obtenir, pour une valeur de paramètre de régularisation bien choisie (i.e. proche des valeurs aboutissant aux meilleures performances), des résultats pour lesquels tous les indices de reconstruction globale, spatiale et spectrale sont excellents et très proches de leur valeur optimale.

L'intervalle des valeurs du paramètre μ acceptables, i.e. les valeurs de μ pour lesquelles toutes les performances de l'algorithme surpassent les méthodes de l'état de l'art, en vert foncé, est large pour les trois versions de l'algorithme associées aux différentes régularisations. Ainsi, lors de l'utilisation de la régularisation de type Sobolev pondéré, des valeurs de μ comprises entre $1.2 \cdot 10^{-5}$ et $2 \cdot 10^{-4}$ permettent de surpasser l'état de l'art. Les régularisations de type Sobolev pondéré et par dictionnaire fournissent des résultats pour lesquels les valeurs de μ acceptables varient entre $9.5 \cdot 10^{-3}$ et $4.5 \cdot 10^{-1}$ et $9 \cdot 10^{-5}$ et $2 \cdot 10^{-3}$, respectivement. Plus particulièrement, on observe, lors de l'utilisation de la régularisation par dictionnaire, un déclin des performances, i.e. une décroissance des valeurs de PSNR et une augmentation des valeurs des indices acSSIM et aSAM, très lente. L'utilisation de la régularisation par dictionnaire per-

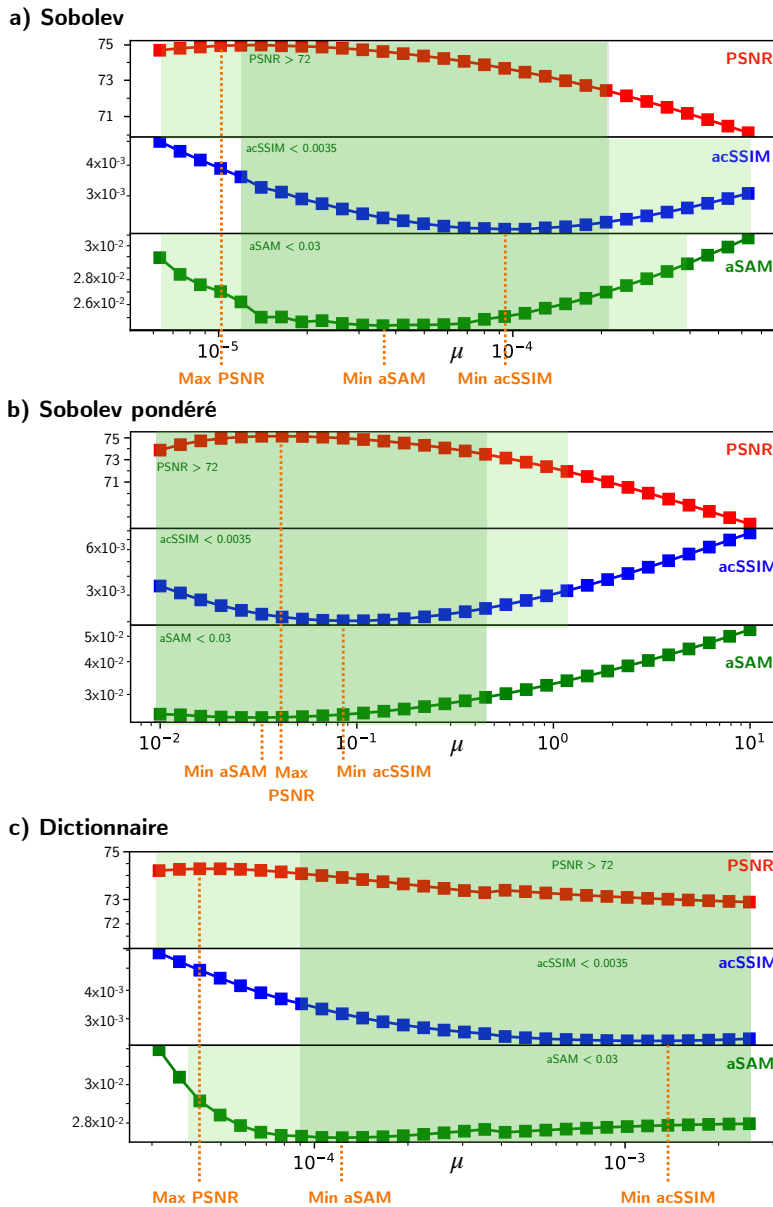


FIGURE 4.15 – Performance (en terme de PSNR, acSSIM et aSAM) de l’algorithme de fusion proposé muni de la régularisation **a) Sobolev**, **b) Sobolev pondéré**, **a) par dictionnaire** en fonction du paramètre de régularisation μ . Pour ces trois sous-figures, les zones ombrées en vert indiquent l’intervalle des valeurs pour lesquelles l’algorithme proposé surpasse les méthodes de l’état de l’art. Les performances maximales et minimales de ces métriques sont indiquées en pointillés oranges.

met donc d’obtenir des résultats même satisfaisants lorsque la force de la régularisation est très importante.

4.7 BILAN

Dans ce chapitre, une méthode novatrice de fusion d’images hyperspectrales et multispectrales tenant compte des flous spectralement variants affectant les images a été présentée. Pour gérer computationnellement cette particularité, un algorithme rapide a été développé pour minimiser la fonction objectif associée au problème de fusion. Opérant dans le domaine de Fourier, cet algorithme exploite les propriétés fréquentielles des opérateurs de convolution cyclique et utilise sur une décomposition de rang faible de l’image fusionnée. Cette régularisation spectrale permet au pro-

blème d'être résolu dans un sous-espace de dimension bien inférieure. Ces deux avantages computationnels couplés à un prétraitement astucieux des données, rendent l'algorithme proposé capable de traiter de grands jeux de données, résolvant le problème de fusion en un temps raisonnable. Cet algorithme s'adapte à l'utilisation de régularisations spatiales complexes et s'exprimant uniquement dans le domaine image sans en impacter l'efficacité.

La pertinence de la méthode proposée a été évaluée dans le contexte spécifique d'imagerie astronomique décrit dans le chapitre 3. Les résultats de la fusion appliquée sur une scène simulée de la barre d'Orion ont été comparés aux produits fusionnés obtenus avec des méthodes de l'état de l'art et deux versions non symétriques de notre approche. On montre que cette méthode apparaît comme un excellent compromis avec les meilleurs résultats de reconstruction spectrale, spatiale et globale. Les différentes régularisations spatiales apportent des résultats similaires, avec toutefois une reconstruction légèrement améliorée par la régularisation de type Sobolev pondérée, pour laquelle l'information spatiale à haute résolution de l'image multispectrale est mise à contribution. L'impact de chacune des régularisations sur le choix du paramètre de régularisation a été discuté. La version de l'algorithme proposé liée à régularisation de type Sobolev pondérée permet d'obtenir, pour une valeur de paramètre de régularisation bien choisie, des résultats pour lesquels tous les indices de reconstruction globale, spatiale et spectrale sont excellents et très proches de leur valeur optimale. L'utilisation de la régularisation par dictionnaire offre des bons résultats pour des valeurs du paramètre de régularisation beaucoup plus grandes que la valeur optimale.

Les annexes C.4 et C.5 présentent des résultats de fusion complémentaires effectués respectivement sur des observations à faible rapport signal à bruit de la scène créée au chapitre 3 représentant une région de photodissociation de la Barre d'Orion, et sur la scène complémentaire décrite dans l'annexe B.1. L'étude de l'annexe C.4 montre que, dans le cas de données observées à faible rapport signal à bruit, lorsque le signal provenant de la scène n'est pas intense, la méthode de fusion proposée munie de la régularisation de type Sobolev surpasse les méthodes de l'état de l'art, reconstruisant correctement les détails spatiaux et spectraux. L'étude complémentaire menée dans l'annexe C.5 met en valeur le fait que, dans le cas d'une scène synthétique spatialement et spectralement complexe, la méthode de fusion proposée munie des régularisations de type Sobolev, Sobolev pondéré ou dictionnaire améliore grandement la qualité de la reconstruction spatiale obtenue par les méthodes de l'état de l'art, tout en conservant une très bonne reconstruction globale.

Des améliorations de cette méthode de fusion sont cependant nécessaires. Les travaux à venir s'intéresseront à d'autres régularisations, qui pourraient être plus adaptées que celles présentées dans ce chapitre à des données du milieu interstellaire. Par exemple, Allys *et al.*, 2019 proposent une description statistique adaptée aux structures du milieu interstellaire basé sur une transformée appelée *reduced wavelet scattering transform*. Dans une perspective plus large, nous aimerions également inclure un modèle de bruit réaliste à notre méthode de fusion.

Conclusion

Dans ces travaux de thèse, nous avons proposé une méthode de fusion rapide d'images multispectrales et hyperspectrales adaptée à l'observation en astronomie infrarouge. De manière générale, l'observation de l'Univers à hautes résolutions spatiale et spectrale est un enjeu essentiel pour comprendre de nombreux mécanismes clés, de la formation des galaxies à l'étude des exoplanètes. Les contraintes instrumentales ne permettant généralement pas une acquisition directe combinant simultanément des hautes résolutions combinées, une alternative est d'acquérir deux images complémentaires de la scène d'intérêt : une image multispectrale à haute résolution spatiale et une image hyperspectrale à haute résolution spatiale. La fusion de données vise à combiner ces observations pour reconstruire une scène à hautes résolutions spatiale et spectrale. Guidés par notre implication dans le programme d'observation prioritaire PDRs4all avec le télescope spatial James Webb détaillé dans le chapitre 1, nous nous sommes particulièrement intéressés à la possibilité de fusionner des images d'une région de photodissociation de la Barre d'Orion, observée dans l'infrarouge à l'aide de deux instruments embarqués sur le JWST : l'imageur de NIRC*am* et le spectromètre de NIRS*pec*.

Cependant, la grande dimension des données en astronomie observationnelle et la variabilité spectrale des flous intervenant dans les modèles d'observation empêchent l'utilisation des méthodes de l'état de l'art décrites dans le chapitre 2. Les travaux de cette thèse visent à surmonter ces limitations en proposant à la fois un cadre global pour la fusion de données en astronomie observationnelle avec le JWST et une méthode de fusion rapide traitant la complexité spécifique des instruments d'observation astronomique et la grande dimension des données.

Dans le chapitre 3, un protocole générique inspiré de Wald, Ranchin et Mangolini, 2005 a été proposé pour la simulation de données pour la fusion d'images. Une image de référence à hautes résolutions spatiale et spectrale a d'abord été créée selon un modèle de mélange linéaire réaliste des caractéristiques spatiales et spectrales d'une région de photodissociation de la Barre d'Orion. Un modèle d'observation des instruments d'étude, i.e. l'imageur de NIRC*am* et le spectromètre de NIRS*pec*, prenant en compte des flous spectralement variants ainsi qu'une modélisation d'un bruit mixte Poisson-Gaussien ont ensuite été établis afin de simuler les images multispectrale et hyperspectrale.

Dans le chapitre 4, en exploitant les modèles directs instrumentaux, nous avons formulé le problème de fusion comme un problème inverse régularisé. La régularisation spectrale proposée dans ces travaux repose sur une représentation faible rang des données spectrales. Plusieurs régularisations spatiales quadratiques sont ensuite explorées : une régularisation naïve de type Sobolev promouvant un contenu spatialement lisse, une ver-

sion informée et pondérée de cette dernière permettant de la modérer dans certaines zones de l'image et une régularisation informée par dictionnaire. Afin de surmonter la complexité des modèles directs et la grande dimension des données, une implémentation rapide a été proposée. Le problème de fusion est résolu dans le domaine de Fourier et dans un sous-espace en un temps raisonnable grâce à un pré-traitement astucieux des données. Enfin, cette méthode a été comparée avec des méthodes de l'état de l'art utilisées majoritairement en observation de la Terre dans le cadre du protocole développé au chapitre précédent. Nous montrons que notre méthode les surpasse et nous prouvons l'intérêt d'une fusion conjointe plutôt qu'une reconstruction asymétrique de la scène. L'intérêt de chacune des régularisations a été discuté et la régularisation informée Sobolev pondérée, pour laquelle l'information spatiale à haute résolution de l'image multispectrale a été mise à contribution, semble apporter de meilleurs résultats. Nous avons également montré que notre méthode présente une bonne robustesse vis à vis d'éventuelles erreurs de modèle et réalise une bonne reconstruction de la scène même dans le cas d'observations à faible rapport signal à bruit.

PERSPECTIVES

Implications pour des projets d'observation en astronomie. La construction de la scène d'observation de la PDR de la Barre d'Orion, présentée dans le chapitre 3, repose sur une factorisation des caractéristiques spatiales et spectrales de la scène d'étude. Les spectres ont été créés synthétiquement [Berné *et al.*, s.d.] tandis que les cartes d'abondances spatiales ont été tirées d'observations réelles de cette zone caractéristique de la Barre d'Orion. Dans le cadre du projet PDRs4all et de la préparation des observations, la scène synthétique est actuellement améliorée par le remplacement de certaines cartes d'abondances tirées d'observations récentes de la Barre d'Orion et de meilleure résolution spatiale. De manière plus globale, la méthodologie générique de construction de la scène synthétique peut être utilisée facilement et rapidement pour créer d'autres scènes d'intérêt.

Dans le cadre du projet PDRs4all, les modèles directs de l'imageur de NIRCam et de l'IFU de NIRSpec, développés également dans le chapitre 3, sont exploités comme simulateurs d'instruments. Ces modèles simplifiés sont assurément moins complets que les simulateurs fournis par les équipes instrumentales mais ils sont aussi moins complexes. C'est le cas plus particulièrement de l'IFU de NIRSpec, dont le simulateur instrumental ne permet pas à ce jour de fournir des cubes de données hyperspectrales en un temps raisonnable contrairement à l'utilisation du modèle direct de cet instrument proposé dans le chapitre 3. Les données hyperspectrales et/ou multispectrales ainsi obtenues plus rapidement sont alors utilisées par la communauté du projet PDRs4all pour tester divers algorithmes d'analyse de données en prévision des observations.

Évaluation des modèles directs. Les modèles directs de l'imageur de NIRCam et de l'IFU de NIRSpec développés au chapitre 3 reposent sur

une modélisation de leurs distorsions spatiales et spectrales respectives reflétant le trajet de la lumière à travers l'optique du télescope et des instruments. Cette modélisation prend en compte des flous spectralement variants, la transmission des filtres des instruments, un sous-échantillonnage (pour l'IFU de NIRSpec uniquement) et des bruits mixtes Poisson-Gaussien. Ces modèles simples restent inexacts et moins avancés que les simulateurs instrumentaux ou que l'ETC. Par exemple, il peut exister une variabilité spatiale des flous, e.g. sur les bords du détecteur, non prise en compte dans les modèles proposés. Par ailleurs, la projection de la lumière provenant de la scène sur le détecteur de l'IFU de NIRSpec est inexacte. En pratique, il existe des décalages spatiaux dans la dispersion des spectres, rendant la modélisation proposée du bruit de lecture imparfaite. La sensibilité des instruments et la saturation des détecteurs ne sont pas non plus modélisées. Dans le cadre de la fusion de données, l'intérêt d'utiliser des modèles directs complexes mais complets est limité. La tâche de fusion étant formulée comme un problème inverse dont la résolution implique à de multiples reprises l'évaluation des modèles instrumentaux, ils doivent être explicites et simples pour une efficacité computationnelle satisfaisante.

Les modèles directs proposés et leur capacité à générer des observations simulées cohérentes gagneraient à être évaluées qualitativement et quantitativement. Le contrôle des performances de ces modèles n'est cependant pas un problème simple. En effet, il n'existe pas à ce jour de simulateur instrumental équivalent, i.e. prenant en compte une scène en 3 dimensions, complexe spatialement et spectralement. L'ETC propose, entre autres, de simuler l'acquisition des données à partir d'une scène construite à l'aide de spectres complexes et d'éléments spatiaux simples (e.g. ellipses, sources ponctuelles) [Pontoppidan *et al.*, 2016]. Une alternative pourrait alors être l'évaluation des modèles instrumentaux à partir de scènes spectralement complexes et spatialement simplifiées.

Choix de la vraisemblance. Le problème de fusion d'images est formulé dans le chapitre 4 comme un problème inverse dans le cadre de l'inférence Bayésienne. La méthodologie de formulation de tels problèmes détaillée dans le chapitre 2 implique l'utilisation de vraisemblances associées à un modèle de bruit blanc gaussien. Cette hypothèse n'est pas réaliste pour des images d'observation astrophysique [Starck et Murtagh, 2006] et n'est pas cohérente avec le modèle de bruit développé dans le chapitre 3 où les images sont plutôt corrompues par un bruit mixte Poisson-Gaussien. La validité du choix de la vraisemblance gaussienne, effectuée dans ces travaux de thèse par efficacité computationnelle, peut alors être questionnée.

Dans le cadre de la restauration d'images corrompues avec un bruit mixte Poisson-Gaussien, Chouzenoux *et al.*, 2015 considèrent une vraisemblance poisson-gaussienne pour formuler la problème inverse associé à la reconstruction, proposent un schéma itératif de résolution et étudient l'intérêt du choix d'une telle vraisemblance comparée à diverses approximations et à une vraisemblance purement gaussienne ou poissonnienne. Les auteurs observent de meilleurs résultats lors de l'utilisation de la vraisemblance poisson-gaussienne en contrepartie d'un coût computationnel

élevé. Une vraisemblance purement gaussienne donne de résultats tout de même satisfaisants pour un faible coût de calcul.

La formulation du problème de fusion à l'aide d'une vraisemblance adaptée à la nature du bruit mixte Poisson-Gaussien des images en astronomie observationnelle implique des ajustements majeurs. En effet, la fonction objectif à minimiser associée, qui n'est plus quadratique, comporte des sommes infinies et requiert l'utilisation d'algorithmes d'optimisation dédiés très coûteux en temps de calcul. L'implémentation rapide proposée dans le chapitre 4 ne peut alors plus être utilisée.

Validité de la régularisation spectrale. La régularisation spectrale complétant le problème de fusion introduite dans le chapitre 4 est basée sur une représentation faible rang. L'hypothèse sous-jacente est que les spectres composant la scène appartiennent à un sous-espace spectral de faible dimension et sont des combinaisons linéaires de spectres de référence. Ce modèle de mélange linéaire, pour la fusion d'images de la PDR de la Barre d'Orion, est utilisé dans un cadre idéal où la scène de référence synthétisée au chapitre 3 est elle-même de faible rang. Dans ce cas particulier, l'hypothèse de régularisation est alors valide. Ce n'est cependant pas forcément le cas dans la réalité. Plusieurs facteurs peuvent affecter la linéarité du mélange. L'absorption de la lumière par des nuages de poussière peuvent avoir un effet d'extinction et affecter l'intensité des raies d'émissions observées de manière non linéaire. L'éloignement des objets dû à l'expansion de l'univers ou encore la vitesse de mouvement de certains objets célestes peuvent décaler les spectres d'émission vers des longueurs d'onde plus courtes ou plus longues, introduisant une variabilité spectrale dans le modèle de mélange linéaire. Lorsque c'est le cas, le nombre de spectres de référence nécessaires à l'identification d'un sous-espace spectral, sous une hypothèse de mélange linéaire, augmente considérablement.

Thouvenin, Dobigeon et Tourneret, 2016 proposent, dans le cadre du démixage spectral de données hyperspectrales pour l'observation de la Terre, de prendre en compte une variabilité spectrale additive au modèle de mélange linéaire. Les spectres de références d'un sous-espace spectral sont modélisés comme la somme d'une signature spectrale constante et d'une perturbation variant spatialement. Les auteurs montrent l'intérêt d'une estimation de variabilités spectrale dans le démixage de données hyperspectrales. Ce modèle de perturbation est adapté avec succès pour des application en imagerie médicale [Cavalcanti *et al.*, 2018] ou encore pour l'observation de rémanents de supernovae [El Hamzaoui, 2020].

Dans le cadre de ces travaux de thèse, une perspective intéressante pour la fusion de données d'observation d'autres sources que la Barre d'Orion serait la prise en compte et l'estimation préalable de variabilités spectrales, modélisant notamment l'absorption par la poussière et le possible décalage des spectres de certains objets par effet Doppler.

À propos de régularisations spatiales. Dans le chapitre 4, trois régularisations spatiales quadratiques sont formulées sous la forme d'un *a priori* gaussien dans le cadre d'une modélisation bayésienne. Ce type de régularisation a été choisi par souci d'efficacité computationnelle et

de facilité d'implémentation des algorithmes d'optimisation associés, lesquels fournissent des garanties de convergence vers un minimum global de la fonction de coût associée au problème inverse de fusion. Chacune des régularisations explorées montre certaines faiblesses dans le cadre des observations simulées de la PDR de la Barre d'Orion. La régularisation Sobolev, naïve, n'est pas adaptée à la reconstruction des structures de l'image, fortement lissées. La régularisation Sobolev pondérée compense le désavantage principal de la première mais peut aboutir à l'apparition d'artéfacts dans les zones où la régularisation est faible. La régularisation par dictionnaire peut s'avérer de moins bonne efficacité lorsque l'image à reconstruire est spatialement lisse et peu redondante. La méthode de fusion d'images, pour l'observation de régions du milieu interstellaire dans le cadre du projet PDRs4all, proposée dans ces travaux de thèse bénéficierait donc d'une régularisation spatiale adaptée.

Allys *et al.*, 2019 proposent une description statistique de faible dimension des structures complexes du milieu interstellaire. Cette description se base sur une transformée en ondelettes appelée en anglais *wavelet scattering transform* (WST), une approche multi-échelle inspirée de l'architecture des réseaux de neurones décrivant la texture d'images en 2 dimensions. La version réduite (RWST) proposée est une version de dimension inférieure, basée sur une interprétation physique des coefficients. Les auteurs montrent qu'elle est particulièrement adaptée aux structures du milieu interstellaire et permet, entre autres, de différencier et comparer quantitativement des processus non gaussiens issus de simulations de turbulences magnéto-hydrodynamiques du milieu interstellaire. Cette transformée pourrait alors être utilisée dans la formulation d'une régularisation spatiale informée quadratique. Une expression possible de cette régularisation pourrait être de la forme

$$\varphi_{\text{spat}}(\mathbf{Z}) = \|\mathcal{R}(\mathbf{Z}) - \bar{\mathbf{R}}\|_F^2$$

où $\mathcal{R}(\mathbf{Z})$ représenterait un ensemble de coefficients issus de la RWST appliquée à la projection \mathbf{Z} et $\bar{\mathbf{R}}$ serait un ensemble de coefficients appris à partir de la RWST appliquée à l'image observée multispectrale à haute résolution spatiale.

Dans une autre voie, le chapitre 2 présente une régularisation spatiale basée sur un réseau génératif pour la restauration d'images [Lempitsky, Vedaldi et Ulyanov, 2018]. L'idée sous-jacente est que la structure d'un tel réseau est suffisante pour capturer l'essentiel des statistiques d'une image sans nécessité d'entraînement du réseau. Une telle régularisation, si elle s'avère efficace pour la fusion de données en astronomie observationnelle, pourrait constituer une régularisation générique adaptable à des données composées de différentes structures et textures, e.g. données d'observation de galaxies ou du milieu interstellaire.

Fusion de données réelles. Les expériences de fusion de données hyperspectrales et multispectrales pour l'observation en astronomie décrites dans le chapitre 4, ont été effectuées sur des données simulées pour lesquelles une vérité terrain est disponible. Cette étape d'évaluation sur des données synthétiques est essentielle pour quantifier les performances de

la méthode de fusion développée. Une perspective importante de ces travaux de thèse est la démonstration de la fusion de données réelles d'observation astronomique et de ses bénéfices pour extraire des informations essentielles avec une meilleure résolution spatiale et/ou spectrale à propos de mécanismes physiques et chimiques clés se déroulant dans l'Univers.

Pour cela, nous encadrons, en collaboration avec Thierry Contini¹, un stage de recherche actuellement en cours portant sur l'application de la méthode de fusion décrite dans ce manuscrit à des données d'observation de galaxies acquises par l'instrument WFC3 du télescope spatiale Hubble et par l'instrument MUSE du VLT. Préalablement au processus de fusion, le traitement de données réelles inclut des problématiques de recalage et de calibration spécifiques à chaque jeu de données.

1. Thierry Contini, Directeur de recherche CNRS à l'IRAP de Toulouse, effectue principalement des recherches sur l'évolution des galaxies.

Annexes du chapitre 2



Contenu du chapitre

A.1 VECTORISATION DU PROBLÈME INVERSE DE FUSION RÉGULARISÉ QUADRATIQUEMENT

La vectorisation du problème (2.13) du chapitre 2 est possible grâce à l'introduction de l'équivalent ordonné lexicographiquement $\mathbf{x} = [\mathbf{X}^1, \dots, \mathbf{X}^{l_h}]^T$. On définit alors \mathbf{y}_m et \mathbf{y}_h , les équivalents ordonnés lexicographiquement de \mathbf{Y}_m et \mathbf{Y}_h par $\mathbf{y}_m = [\mathbf{Y}_m^1, \dots, \mathbf{Y}_m^{l_m}]^T$ et $\mathbf{y}_h = [\mathbf{Y}_h^1, \dots, \mathbf{Y}_h^{l_h}]^T$, respectivement. De manière similaire, au sein de cette formulation vectorisée, les opérateurs de dégradation spectrale et spatiale, \mathbf{M} et \mathbf{H} , ainsi que les matrices de covariance $\mathbf{\Lambda}_m^{1/2}$ et $\mathbf{\Lambda}_h^{1/2}$, doivent être réécrits comme

$$\begin{aligned}\underline{\mathbf{M}} &= \mathbf{M} \otimes \mathbf{I}_{p_m} \\ \underline{\mathbf{H}} &= \mathbf{H} \otimes \mathbf{I}_{p_h} \\ \underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2} &= \mathbf{\Lambda}_m^{1/2} \otimes \mathbf{I}_{p_m} \\ \underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2} &= \mathbf{\Lambda}_h^{1/2} \otimes \mathbf{I}_{p_h}\end{aligned}$$

où \mathbf{I}_p est la matrice identité de taille $p \times p$. On note également $\underline{\mathbf{\Omega}}$ l'équivalent vectorisé de $\mathbf{\Omega}$. Le problème (2.13) est alors équivalent à

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2} \|\underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2} (\mathbf{y}_m - \underline{\mathbf{M}}\mathbf{x})\|_F^2 + \frac{1}{2} \|\underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2} (\mathbf{y}_h - \underline{\mathbf{H}}\mathbf{x})\|_F^2 + \mu \|\underline{\mathbf{\Omega}}\mathbf{x}\|_F^2$$

Le problème vectorisé peut alors être réécrit comme le système linéaire

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{b}^T \mathbf{x}$$

où la matrice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{l_h p_m \times l_h p_m}$,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{M}^T \underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2 T} \underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2} \mathbf{M} + \frac{1}{2} \mathbf{H}^T \underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2 T} \underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2} \mathbf{H} + \mu \mathbf{\Omega}^T \mathbf{\Omega}$$

est symétrique définie positive et $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{l_h p_m}$,

$$\mathbf{b} = \mathbf{M}^T \underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2 T} \underline{\mathbf{\Lambda}}_m^{1/2} \mathbf{y}_m + \mathbf{H}^T \underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2 T} \underline{\mathbf{\Lambda}}_h^{1/2} \mathbf{y}_h.$$

A.2 DESCENTE DE GRADIENT ACCÉLÉRÉE

L'algorithme de descente de gradient accélérée [Nesterov, 1983] est un cas particulier de l'algorithme FISTA présenté dans le chapitre 2 pour des fonctions différentiables à gradient Lipschitz. On considère ici le problème de minimisation générique suivant

$$\hat{\mathbf{x}} = \arg \min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$$

| | | |
|------------|---|------------|
| A.1 | Vectorisation du problème inverse de fusion régularisé quadratiquement | 121 |
| A.2 | Descente de gradient accélérée | 121 |
| A.3 | Détails de l'algorithme de fusion par résolution d'une équation de Sylvester | 122 |

où f est une fonction convexe différentiable dont le gradient est Lipschitz-continu, i.e. $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{y})\|_2 \leq L_f \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$ avec L_f constante de Lipschitz et $\nabla f(\cdot)$ le gradient de la fonction f , et qui admet un minimiseur global. Ce minimiseur global est atteint itérativement en effectuant les mises à jour resumées dans l'algorithme 6.

Algorithme 6 : Algorithme de descente de gradient accélérée.

Entrée : $f, \mathbf{x}_{(0)}$
Initialisation de l'algorithme
 1: $\mathbf{y}_{(1)} = \mathbf{x}_{(0)}$
 2: $t_{(1)} = 1$
 3: $L \geq L_f$
 4: $k = 1$
Règles de mise à jour
 5: **Tant que** un critère d'arrêt n'est pas atteint **faire**
 6: $\mathbf{x}_{(k)} = \mathbf{y}_{(k)} - \frac{1}{L} \nabla f(\mathbf{y}_{(k)})$
 7: $t_{(k+1)} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4t_{(k)}^2}}{2}$
 8: $\mathbf{y}_{(k+1)} = \mathbf{x}_{(k)} + \frac{t_{(k)} - 1}{t_{(k+1)}} (\mathbf{x}_{(k)} - \mathbf{x}_{(k-1)})$
 9: $k = k + 1$
 10: **Fin Tant que**
Sortie : $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}_{(k)}$

Cet algorithme, proposé par Nesterov, 1983, est un algorithme appartenant à la classe des algorithmes à direction de descente conçu pour améliorer le taux de convergence de $\mathcal{O}(\frac{1}{k})$ d'une méthode de descente de gradient classique. Les auteurs montrent un taux de convergence de $\mathcal{O}(\frac{1}{k^2})$, i.e. $(f(\mathbf{x}_{(k)}) + g(\mathbf{x}_{(k)})) - (f(\hat{\mathbf{x}}) + g(\hat{\mathbf{x}})) \leq \mathcal{O}(\frac{1}{k^2})$.

A.3 DÉTAILS DE L'ALGORITHME DE FUSION PAR RÉOLUTION D'UNE ÉQUATION DE SYLVESTER

Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b ont proposé une solution analytique au problème de fusion (2.13) du chapitre 2. On se place ici dans le cas d'une régularisation quadratique, e.g. $\varphi(\mathbf{X}) = \|\Sigma \mathbf{X}\|_F^2$. Résoudre ce problème revient à annuler le gradient de la fonction objectif et, par conséquent, à résoudre le problème matriciel

$$\mathbf{C}_1 \mathbf{X} + \mathbf{X} \mathbf{C}_2 = \mathbf{C}_3 \quad (\text{A.1})$$

avec $\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2, \mathbf{C}_3 \in \mathbb{R}^{l_h p_m \times l_h p_m}$.

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_1 &= \Lambda_h (\mathbf{M}^T \Lambda_m^{-1} \mathbf{M} + \mu \Omega^T \Omega) \\ \mathbf{C}_2 &= \mathbf{H}^T \mathbf{H} \\ \mathbf{C}_3 &= \mathbf{Y}_h \mathbf{H}^T + \Lambda_h \mathbf{M}^T \Lambda_m^{-1} \mathbf{Y}_m. \end{aligned}$$

On suppose ici que l'opérateur \mathbf{H} peut s'écrire sous la forme $\mathbf{H} = \mathbf{F} \mathbf{D} \mathbf{F}^T \mathbf{S}$ où \mathbf{F} est la matrice de la transformée de Fourier discrète en 2 dimensions telle que $\mathbf{F} \mathbf{F}^T = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{I}_{p_m}$ (\mathbf{I}_{p_m} est la matrice identité de taille $p_m \times p_m$), $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{p_m \times p_m}$ est une matrice diagonale et $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{p_m \times p_h}$ est un

opérateur de sous-échantillonnage de facteur entier d . Cette décomposition est possible lorsque l'opérateur \mathbf{H} représente une convolution spatiale en 2 dimensions spatialement et spectralement invariante pouvant s'exprimer sous la forme d'une multiplication par une matrice circulante par blocs et un sous-échantillonnage.

Le système matriciel (A.1) est connu sous le nom d'équation de Sylvester et est habituellement résolu par un algorithme de Bartels-Stewart [Bartels et Stewart, 1972] décomposant le système en matrices triangulaires pour le résoudre en effectuant des substitutions avant et arrière. La triangularisation du système étant une étape très coûteuse (de complexité $\mathcal{O}(n^3)$), les auteurs proposent une résolution rapide de complexité moindre adaptée au problème de fusion (2.13). Tout d'abord, la matrice \mathbf{C}_1 est diagonalisée par décomposition en valeurs propres telle que $\mathbf{C}_1 = \mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}_c\mathbf{Q}^{-1}$ où $\mathbf{\Lambda}_c$ est une matrice diagonale dont les entrées sont les valeurs propres de \mathbf{C}_1 . On introduit également la matrice $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{dp_h \times dp_h}$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{p_h} & 0 & \dots & 0 \\ -\mathbf{I}_{p_h} & \mathbf{I}_{p_h} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\mathbf{I}_{p_h} & 0 & \dots & \mathbf{I}_{p_h} \end{bmatrix}$$

dont l'inverse est facilement calculable.

Par multiplication à gauche par \mathbf{Q}^{-1} et à droite par \mathbf{FDP}^{-1} , le système (A.1) est équivalent à

$$\mathbf{\Lambda}_c\bar{\mathbf{X}} + \bar{\mathbf{X}}\bar{\mathbf{C}}_2 = \bar{\mathbf{C}}_3, \quad (\text{A.2})$$

avec

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{X}} &= \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{XFDP}^{-1} \\ \bar{\mathbf{C}}_2 &= \mathbf{PF}^T\mathbf{SS}^T\mathbf{FD}^T\mathbf{DP}^{-1} \\ \bar{\mathbf{C}}_3 &= \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{C}_3\mathbf{FDP}^{-1}. \end{aligned}$$

Le système (A.2) est également une équation de Sylvester. Les auteurs montrent que la matrice $\bar{\mathbf{C}}_2$ a une structure particulière en blocs qui permet à $\bar{\mathbf{X}}$ d'être calculé bloc par bloc pour un coût computationnel faible, $\mathbf{\Lambda}_c$ étant une matrice diagonale. Le produit fusionné est enfin calculé via $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{Q}\bar{\mathbf{X}}\mathbf{PD}^{-1}\mathbf{F}^T$. Le lecteur est invité à consulter l'étude originale [Wei, Dobigeon et Tourneret, 2015b] pour plus de détails sur la décomposition des opérateurs et le calcul des blocs de $\bar{\mathbf{X}}$. Les étapes de la résolution du problème de fusion écrit sous la forme d'une équation de Sylvester sont résumées dans l'algorithme 7.

Algorithme 7 : Résolution de l'équation de Sylvester liée au problème de fusion.

Entrée : $\mathbf{Y}_m, \mathbf{Y}_h, \mathbf{M}, \mathbf{H}$

Décomposition de l'opérateur \mathbf{H}

1: $\mathbf{H} = \mathbf{FDF}^T \mathbf{S}$

Décomposition en valeurs propres de l'opérateur \mathbf{C}_1

2: $\mathbf{C}_1 = \mathbf{\Lambda}_h (\mathbf{M}^T \mathbf{\Lambda}_m^{-1} \mathbf{M} + \mu \mathbf{\Omega} \mathbf{\Omega})$

3: $\mathbf{C}_1 = \mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}_c \mathbf{Q}^{-1}$

Calcul de la quantité $\bar{\mathbf{C}}_3$

4: $\bar{\mathbf{C}}_3 = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{C}_3 \mathbf{FDP}^{-1}$

5: Calcul de $\bar{\mathbf{X}}$ bloc par bloc en utilisant la structure en blocs de $\bar{\mathbf{C}}_2$.

Sortie : $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{Q} \bar{\mathbf{X}} \mathbf{P} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{F}^T$

Annexes du chapitre 3



Contenu du chapitre

B.1 SCÈNE SYNTHÉTIQUE COMPLÉMENTAIRE

Le chapitre 3 détaille la construction d'une scène synthétique réaliste d'une région de photo-dissociation située dans la Barre d'Orion à haute résolution spatiale et spectrale. Dans cette section, nous décrivons une seconde scène synthétique non réaliste basée sur un modèle linéaire similaire utilisant les mêmes spectres synthétiques mais des cartes spatiales provenant de données réelles normalisées du télescope spatial Hubble et représentant la galaxie NGC 1512.

À nouveau, \mathbf{X}_g est notée comme la matrice correspondant à la scène synthétique pour laquelle chaque colonne est un spectre à une position spatiale donnée. Cette image à haute résolution spatiale et spectrale est considérée comme étant le résultat du produit

$$\mathbf{X}_g = \mathbf{H}\mathbf{A}_g \quad (\text{B.1})$$

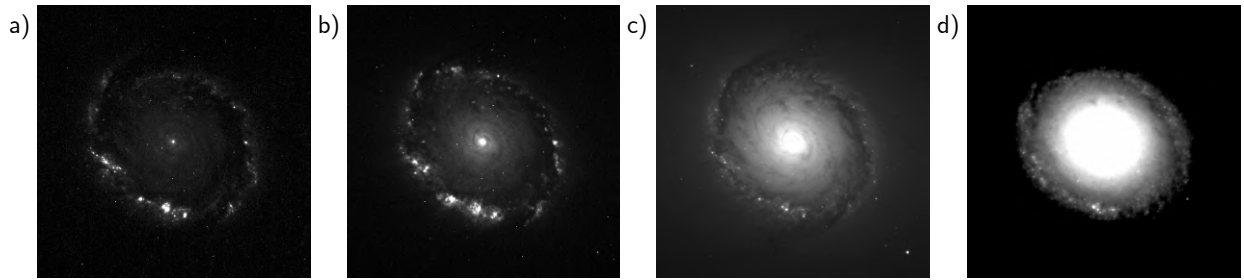
où \mathbf{H} est une matrice des spectres élémentaires présentée précédemment dans le chapitre 3, section 3.1. \mathbf{A}_g est la matrice des quatre cartes de leurs "poids" spatiaux correspondants. Ces cartes d'abondances proviennent d'observations du télescope spatial Hubble de la galaxie NGC 1512 située à 30 millions d'années-lumière. Ces images, présentées dans la figure B.1, contiennent 580×580 pixels et sont centrées aux coordonnées RA=4 :3 :54.29, DEC=-43 :20 :56.0. Les images **a)**, **b)** et **c)** dans la figure B.1 sont des compositions des filtres F336W, F658N, F547M et F814W de l'instrument *Wide field and planetary camera 2* (WFPC2) du HST et représentent respectivement une vue à 332,7 nm (ultraviolets proches), 659 nm (lumière visible) et 826,9 nm (infrarouges proches) de la galaxie [Maoz *et al.*, 2001]. L'image **d)** est une composition des filtres F160W et F187W de l'instrument *Near-infrared camera and multi-object spectrometer* (NICMOS) du HST et représente une vue à 1,6 microns de la galaxie. Les différentes cartes les images peuvent être téléchargées en ligne¹ ont seulement été normalisées entre 0 et 1. Ces différentes images ont été sélectionnées parmi les 7 images du jeu de données de Maoz *et al.*, 2001 pour représenter la diversité spatiale du centre de la galaxie (images **c)** et **d)** de la figure B.1) aux amas d'étoiles dans la couronne de cette galaxie spirale (images **a)** et **b)** de la figure B.1).

Ces cartes d'abondances ont été choisies pour apporter une complexité spatiale plus importante que dans celles introduites dans le chapitre 3, section 3.1 afin d'éprouver la méthode de fusion sur des données contenant des hautes fréquences spatiales (i.e. dans le chapitre 4). Comme il n'y a aucune raison physique d'associer les spectres décrits dans la section 3.1 et les cartes présentées dans la figure B.1 et afin de préserver les hautes fréquences spatiales qu'elles contiennent, ces dernières ne sont donc pas

B.1 Scène synthétique complémentaire

125

1. <https://hubblesite.org/contents/media/images/2001/16/1060-Image.html>



interpolées à la résolution de l'imageur de NIRC*am*. Ce mélange linéaire des spectres synthétiques et des cartes d'abondances alternatif n'a donc aucun réalisme physique et ne doit pas être utilisée comme tel. Cette scène a été créée uniquement dans un but de test algorithmique complémentaire de la méthode de fusion développée dans ces travaux de thèse.

La scène synthétisée ici a été utilisée pour créer des observations simulées considérées pour le problème de fusion exploitant les modèles directs de l'imageur de NIRC*am*, canal SW et de l'IFU de NIRS*pec* décrits dans la section 3.2 et le modèle de bruit proposé dans la section 3.3. Les caractéristiques des images multispectrale (MS) et hyperspectrale (HS) ainsi générées sont résumées dans la table B.1. Ces images sont présentées dans la figure B.2. Afin de réduire la dimension du problème de fusion, nous choisissons de recadrer les images utilisées pour la création de la scène synthétique non réaliste à une taille de 300×300 pixels autour des zones d'intérêt (voir figure B.2). Comme dans la section 3.4, nous montrons des compositions colorées RGB des images de la scène originale, multispectrale et hyperspectrales simulées ainsi que des spectres extraits à des positions spatiales données. La simulation de l'image multispectrale correspond à l'observation de la scène synthétique par le canal SW de l'imageur de NIRC*am* sur environ trois vingtièmes du champ de vue de l'instrument. La simulation de l'image hyperspectrale est l'observation de la scène par l'IFU de NIRS*pec* aux longueurs d'ondes correspondantes pour une mosaïque d'environ 3×3 observations.

De la même manière que dans la section 3.4, ces simulations témoignent de la dégradation la résolution spatiale et spectrale de la scène synthétique à haute résolution. L'observation simulée multispectrale apparaît encore une fois moins contrastées en raison de la perte d'information spectrale due aux filtres à large bande. Les données hyperspectrales simulées sont clairement bien moins spatialement résolues notamment dans les régions d'amas d'étoiles (en bleu clair). Le rapport signal à bruit reste ici aussi très bon pour la majorité des zones des images et des spectres.

| Image MS | Image HS | |
|-------------------------------------|------------------|----------------|
| Canal | SW | |
| Nombre de points spectraux | 11 | 4974 |
| Champ de vue (pixels ²) | 300×300 | 93×93 |

FIGURE B.1 – **Images a), b) et c)** : compositions des filtres F336W, F658N, F547M et F814W de l'instrument WFPC2 du HST représentant respectivement une vue à 332,7 nm (ultraviolets proches), 659 nm (lumière visible) et 826,9 nm (infrarouges proches) de la galaxie NGC 1512 [Maoz *et al.*, 2001]. **Image d)** : composition des filtres F160W et F187W de l'instrument NICMOS du HST et représentant une vue à 1,6 microns de la galaxie NGC 1512 [Maoz *et al.*, 2001]. Échelle normalisée (noir : 0 ; blanc : 1), centré en RA=4 :3 :54.29, DEC=-43 :20 :56.0.

TABLE B.1 – Propriétés des observations simulées de l'imageur de NIRC*am* (image multispectrale) et de l'IFU de NIRS*pec* (image hyperspectrale) de la scène synthétique non réaliste.

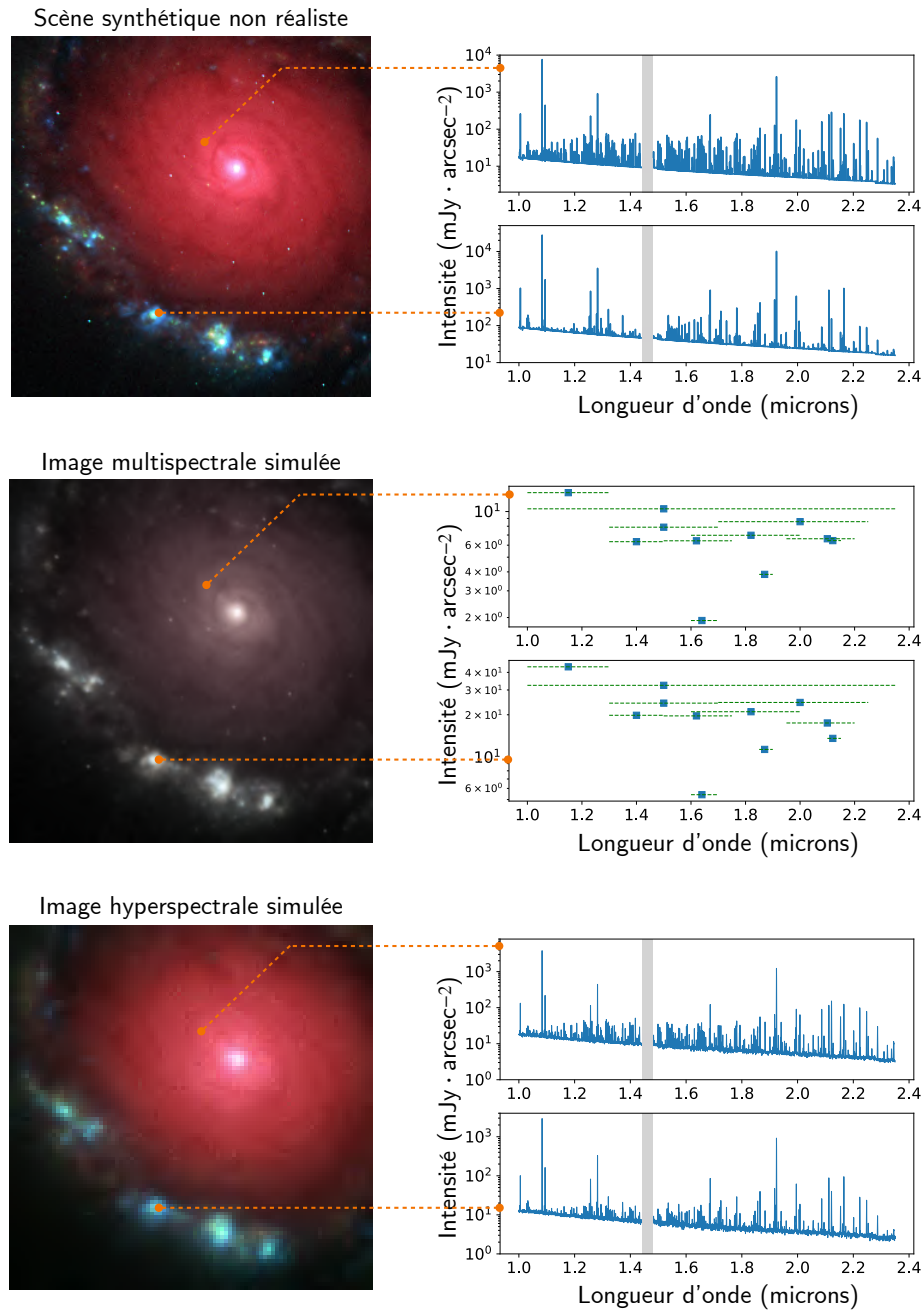


FIGURE B.2 – **À gauche** (de haut en bas) : Compositions RGB de la scène synthétique non réaliste, de l'image multispectrale simulée de l'imageur de NIRC*am*, canal SW et de l'image hyperspectrale simulée de l'IFU de NIRS*pec*. En rouge : raie d'émission à $2.122 \mu\text{m}$ (filtre à bande étroite F212N pour l'image multispectrale). En vert : raie à $1.865 \mu\text{m}$ (filtre à bande étroite F186N pour l'image mutlispectrale). En bleu : raie d'émission à $1.644 \mu\text{m}$ (filtre à bande étroite F164N pour l'image multispectrale). **À droite** : Deux spectres de 1 à 2.35 microns associés à deux pixels de chaque image à gauche. De haut en bas, les deux premiers sont deux spectres originaux provenant de la scène synthétique avec environ 5000 points spectraux. Les deux suivants sont deux spectres observés de l'image multispectrale découlant du modèle direct de l'imageur de NIRC*am* avec 11 points spectraux. Les deux derniers sont des spectres calibrés observés par l'image hyperspectrale fournie par le modèle direct de l'IFU de NIRS*pec* avec environ 5000 points spectraux. Les espaces vides physiques entre les détecteurs de l'IFU de NIRS*pec* sont spécifiés en gris clair. Les intensités sont tracées en échelle logarithmique.

Annexes du chapitre 4



Contenu du chapitre

C.1 VECTORISATION DES OPÉRATEURS

Pour traiter les équivalents vectorisés de la DFT des coefficients de représentation $\dot{\mathbf{z}}$, la matrice de base du sous-espace \mathbf{V} doit être réécrite $\underline{\mathbf{V}} = \mathbf{V} \otimes \mathbf{I}_{p_m \times p_m}$ telle que

$$\underline{\mathbf{V}}\dot{\mathbf{z}} = \begin{pmatrix} [\mathbf{V}\dot{\mathbf{z}}]^1 \\ \vdots \\ [\mathbf{V}\dot{\mathbf{z}}]^{l_h} \end{pmatrix}.$$

De manière similaire, au sein de cette formulation vectorisée, les opérateurs de dégradation spectrale \mathbf{L}_m et \mathbf{L}_h doivent être réécrits comme

$$\begin{aligned} \underline{\mathbf{L}}_m &= \mathbf{L}_m \otimes \mathbf{I}_{p_m} \\ \underline{\mathbf{L}}_h &= \mathbf{L}_h \otimes \mathbf{I}_{p_h}. \end{aligned}$$

Les opérateurs de convolution correspondants $\dot{\mathbf{M}}$ et $\dot{\mathbf{H}}$ sont deux matrices diagonales par blocs

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{M}} &= \text{diag} \left\{ \dot{\mathbf{M}}^1, \dots, \dot{\mathbf{M}}^{l_h} \right\} \\ \dot{\mathbf{H}} &= \text{diag} \left\{ \dot{\mathbf{H}}^1, \dots, \dot{\mathbf{H}}^{l_h} \right\} \end{aligned}$$

définies par les DFTs des PSFs multispectrales et hyperspectrales le long des bandes spectrales. Finalement, les opérateurs spatiaux $\dot{\mathbf{S}}$ et $\dot{\mathbf{D}}$ s'écrivent comme

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}} &= \mathbf{I}_{l_h} \otimes \dot{\mathbf{S}}^H \\ \dot{\mathbf{D}} &= \mathbf{I}_{l_{\text{sub}}} \otimes \dot{\mathbf{D}}^H. \end{aligned}$$

C.2 STRUCTURE ET CALCUL EFFICACE DE LA MATRICE DU SYSTÈME LINÉAIRE

Dans la formulation vectorisée (4.13), la matrice \mathbf{A} définissant le système linéaire à résoudre montre une structure particulière. Plus précisément, comme énoncé par l'équation (4.14), \mathbf{A} peut être écrite comme une somme pondérée de trois matrices notées ici \mathbf{A}_m , \mathbf{A}_h et \mathbf{A}_r dont le calcul est discuté dans ce qui suit. Premièrement, la matrice $\mathbf{A}_m \triangleq \underline{\mathbf{V}}^H \dot{\mathbf{M}}^H \underline{\mathbf{L}}_m^H \mathbf{L}_m \dot{\mathbf{M}} \mathbf{V}$ associée au modèle direct multispectral peut être décomposée en $l_{\text{sub}} \times l_{\text{sub}}$ blocs élémentaires tels que

$$\mathbf{A}_m = \begin{bmatrix} [\mathbf{A}_m]_1^1 & \dots & [\mathbf{A}_m]_{l_{\text{sub}}}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ [\mathbf{A}_m]_1^{l_{\text{sub}}} & \dots & [\mathbf{A}_m]_{l_{\text{sub}}}^{l_{\text{sub}}} \end{bmatrix}$$

| | | |
|------------|---|------------|
| C.1 | Vectorisation des opérateurs | 129 |
| C.2 | Structure et calcul efficace de la matrice du système linéaire | 129 |
| C.3 | Coupe à travers les structures brillantes | 131 |
| C.4 | Performances dans le cas d'un SNR réduit | 132 |
| | Protocole expérimental | |
| | Résultats | |
| C.5 | Expériences sur la scène complémentaire | 135 |
| | Protocole expérimental et méthodes comparées | |
| | Résultats | |

où chaque bloc $[\mathbf{A}_m]_i^j \in \mathbb{R}^{p_m \times p_m}$ est une matrice diagonale définie par

$$[\mathbf{A}_m]_i^j = \text{diag} \left\{ \sum_{l=1}^{l_m} \alpha_i^l \odot \bar{\alpha}_j^l \right\}$$

avec $\alpha_j^l = \sum_{b=1}^{l_h} [\mathbf{L}_m]_b^l \dot{\mathbf{M}}^b \mathbf{V}_j^b$. Ce calcul est détaillé dans l'algorithme 8. Puisque la matrice \mathbf{A}_m est symétrique, seulement sa partie triangulaire supérieure (ou inférieure) nécessite d'être calculée.

Algorithme 8 : Calcul de \mathbf{A}_m

Entrée : $\mathbf{L}_m, \mathbf{V}, \dot{\mathbf{M}}$

Calculer tous les $\alpha_j^l (\forall j, l)$

1: **Pour** $l = 1$ à l_m **faire**

2: **Pour** $j = 1$ à l_{sub} **faire**

3: $\alpha_j^l = \sum_{b=1}^{l_h} [\mathbf{L}_m]_b^l \dot{\mathbf{M}}^b \mathbf{V}_j^b$

4: **Fin Pour**

5: **Fin Pour**

Compléter \mathbf{A}_m bloc par bloc

6: **Pour** $i = 1$ à l_{sub} **faire**

7: **Pour** $j = 1$ à $(l_{\text{sub}} - i)$ **faire**

8: **Si** $(j \neq 0)$ **alors**

9: $[\mathbf{A}_m]_i^{j+i} = \sum_{l=1}^{l_m} \alpha_i^l \odot \bar{\alpha}_j^l$

10: $[\mathbf{A}_m]_{j+i}^i = [\mathbf{A}_m]_i^{j+i}$

11: **Sinon**

12: $[\mathbf{A}_m]_i^i = \sum_{l=1}^{l_m} \alpha_i^l \odot \bar{\alpha}_i^l$

13: **Fin Si**

14: **Fin Pour**

15: **Fin Pour**

Sortie : \mathbf{A}_m

De la même manière, la matrice $\mathbf{A}_h \triangleq \underline{\mathbf{V}}^H \dot{\mathbf{H}}^H \underline{\mathbf{L}}_h^H \dot{\mathbf{S}}^H \dot{\mathbf{S}} \underline{\mathbf{L}}_h \dot{\mathbf{H}} \underline{\mathbf{V}}$ définie par le modèle direct hyperspectral peut être décomposée en $l_{\text{sub}} \times l_{\text{sub}}$ blocs élémentaires tels que

$$\mathbf{A}_h = \begin{bmatrix} [\mathbf{A}_h]_1^1 & \dots & [\mathbf{A}_h]_{l_{\text{sub}}}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ [\mathbf{A}_h]_1^{l_{\text{sub}}} & \dots & [\mathbf{A}_h]_{l_{\text{sub}}}^{l_{\text{sub}}} \end{bmatrix}$$

où chaque bloc $[\mathbf{A}_h]_i^j \in \mathbb{R}^{p_m \times p_m}$ est également décomposé en $d^2 \times d^2$ matrices diagonales de taille $p_m d^2 \times p_m d^2$, i.e.,

$$[\mathbf{A}_h]_i^j = \beta_i^j \odot \Upsilon_{p_m, d^2}$$

avec $\beta_i^j = \frac{1}{d^2} \sum_{l=1}^{l_h} ([\mathbf{L}_h]_l^i)^2 \mathbf{V}_j^l \mathbf{V}_i^l (\dot{\mathbf{H}}^l) (\dot{\mathbf{H}}^l)^H$ et

$$\Upsilon_{p_m, d^2} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{p_m d^2} & \dots & \mathbf{I}_{p_m d^2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{I}_{p_m d^2} & \dots & \mathbf{I}_{p_m d^2} \end{bmatrix} \quad (\text{C.1})$$

On remarquera que la matrice \mathbf{A}_h est très creuse, ce qui évite de calculer toutes les entrées des matrices β_i^j mais seulement ses coefficients

non nuls dont les positions correspondent aux valeurs non nulles dans Υ_{p_m, d^2} . Ceci est résumé dans l'algorithme 9 qui exploite aussi de la symétrie Hermitienne de \mathbf{A}_h . Notons également que les $2l_{\text{sub}}^2$ blocs définissant les matrices \mathbf{A}_m et \mathbf{A}_h de la matrice \mathbf{A} du système linéaire peuvent être calculés indépendamment, ce qui permettrait dans des travaux futurs une parallélisation efficace afin de bénéficier d'un traitement multi-coeur.

Algorithme 9 : Calculer \mathbf{A}_h

Entrée : $\mathbf{L}_h, \mathbf{V}, \dot{\mathbf{H}}, d$
Compléter \mathbf{A}_h bloc par bloc
1: **Pour** $i = 1$ à l_{sub} **faire**
2: **Pour** $j = 1$ à $(l_{\text{sub}} - i)$ **faire**
3: **Si** $(j \neq 0)$ **alors**
4: *# Identifier les éléments non nuls dans le bloc $\binom{j}{i}$*
5: **Pour** (m, n) t.q. $[\Upsilon_{p_m, d^2}]_m^n \neq 0$ **faire**
6: $[\mathbf{A}_h]_{i, m}^{i+j, n} = \frac{1}{d^2} \sum_{l=1}^{l_h} ([\mathbf{L}_h]_l^i)^2 \mathbf{V}_j^l \mathbf{V}_i^l \dot{\mathbf{H}}_m^l \dot{\mathbf{H}}_n^l$
7: $[\mathbf{A}_h]_{i+j}^i = \overline{[\mathbf{A}_h]_i^{i+j}}$
8: **Fin Pour**
9: **Sinon**
10: *# Identifier les éléments non nuls dans le bloc $\binom{i}{i}$*
11: **Pour** (m, n) t.q. $[\Upsilon_{p_m, d^2}]_m^n \neq 0$ **faire**
12: $[\mathbf{A}_h]_{i, m}^{i, n} = \frac{1}{d^2} \sum_{l=1}^{l_h} ([\mathbf{L}_h]_l^i)^2 \mathbf{V}_i^l \mathbf{V}_i^l \dot{\mathbf{H}}_m^l \dot{\mathbf{H}}_n^l$
13: **Fin Pour**
14: **Fin Si**
15: **Fin Pour**
16: **Fin Pour**
Sortie : \mathbf{A}_h

Finalement, la dernière matrice impliquée dans la définition de \mathbf{A} est $\mathbf{A}_r \triangleq \underline{\dot{\mathbf{D}}}^H \underline{\dot{\mathbf{D}}}$, qui est une matrice diagonale et dont le calcul est trivial.

C.3 COUPE À TRAVERS LES STRUCTURES BRILLANTES

Cette annexe présente les coupes à travers les structures brillantes (en bleu clair dans les figures du chapitre 4) de la raie du Fe^+ à $1.644 \mu\text{m}$ pour les images de référence, hyperspectrale et reconstruites par la méthode de fusion proposée munie de chacune des régularisations.

Un léger lissage de la structure d'intérêt (proplyd) est observé par rapport à la structure de référence. Les trois versions de la fusion donnent des résultats qualitativement similaires, notamment ceux liés à la régularisation Sobolev et la régularisation Sobolev pondéré, l'image originale étant majoritairement lisse. On remarque cependant que l'intensité de la structure est mieux restaurée par la fusion utilisant la régularisation Sobolev pondéré, plus particulièrement autour des pixels 37 et 51. La structure de la bande spectrale liée à la régularisation par dictionnaire semble moins bien reconstruite autour de ces mêmes pixels. Par ailleurs, la figure C.1 illustre le gain important en résolution spatiale des produits fusionnés par rapport à l'image hyperspectrale observée, notamment dans les zones de

structures.

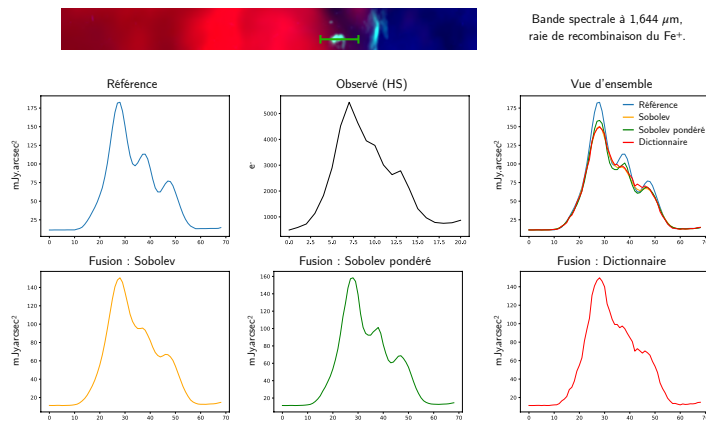


FIGURE C.1 – **En haut** : Composition colorée RGB de l'image de référence et localisation, en vert, de la coupe à travers les structures brillantes. **En bas** : Coupes à travers les structures brillantes (en bleu clair dans les figures du chapitre 4) de la raie du Fe^+ à 1.644 μm pour les images de référence, hyperspectrale et reconstruites par la méthode de fusion proposée munie de chacune des régularisations.

C.4 PERFORMANCES DANS LE CAS D'UN SNR RÉDUIT

C.4.1 Protocole expérimental

Dans cette annexe, nous étudions les performances de la méthode de fusion rapide proposée munie de la régularisation de type Sobolev (voir chapitre 4) sur le jeu de données simulé présenté au chapitre 3 dans le cas d'observations à faible rapport signal à bruit (10 fois moins intense que le signal de la scène du chapitre 3). Ce jeu de données est composé d'une image simulée originale de haute résolution spatiale et spectrale et d'images multispectrales et hyperspectrales correspondantes qui seraient observées par deux instruments dédiés. Cette scène simulée représente une région de photodissociation située dans la Barre d'Orion et est construite sous une hypothèse de rang faible spectral. Plus précisément, cette scène simulée est la combinaison de quatre spectres élémentaires et de quatre cartes spatiales dérivées d'observations réelles. Cette image de référence est composée de 300×300 pixels et de 4974 bandes spectrales infrarouges proches, de longueur d'onde allant de 1 à 2.35 microns. Une composition colorée RGB est montrée dans la figure Fig. C.2 a).

À partir de cette scène originale, les images multispectrale et hyperspectrale observées ont été dérivées des modèles directs introduits dans le chapitre 3 pour simuler des observations de l'imageur de NIRC*am* et de l'IFU de NIRS*pec* embarqués sur le télescope spatial James Webb [Gardner *et al.*, 2006]. L'image multispectrale est composée de 300×300 pixels et de 11 bandes spectrales tandis que l'image hyperspectrale est composée de 100×100 pixels et de 4974 bandes spectrales. Les opérateurs de dégradation spatiale et spectrale qui modélisent la réponse des deux instruments est celle décrite dans le chapitre 3 et fournie par la documentation du JWST [Space Telescope Science Institute (STScI), 2017a, 2017c, 2017b].

Pour modéliser un bruit mixte Poisson-Gaussien, les images non bruitées sont d'abord corrompues par un bruit multiplicatif gaussien de moyenne et de variance le comptage de photons dans le pixel. Ensuite, on considère un bruit additif Gaussien spatialement corrélé dont la moyenne et

la variance dépendent des instruments, comme spécifié dans la documentation du JWST. Pour évaluer les performances de notre méthode dans le cas d'observations à faible SNR, on considère que le signal est 10 fois moins intense que le signal qui serait observé dans la région de la barre d'Orion présentée dans le chapitre 3. Les images multispectrale et hyperspectrale observées sont affichées dans la figure C.2 b) et c) comme des compositions colorées de trois bandes spectrales.

C.4.2 Résultats

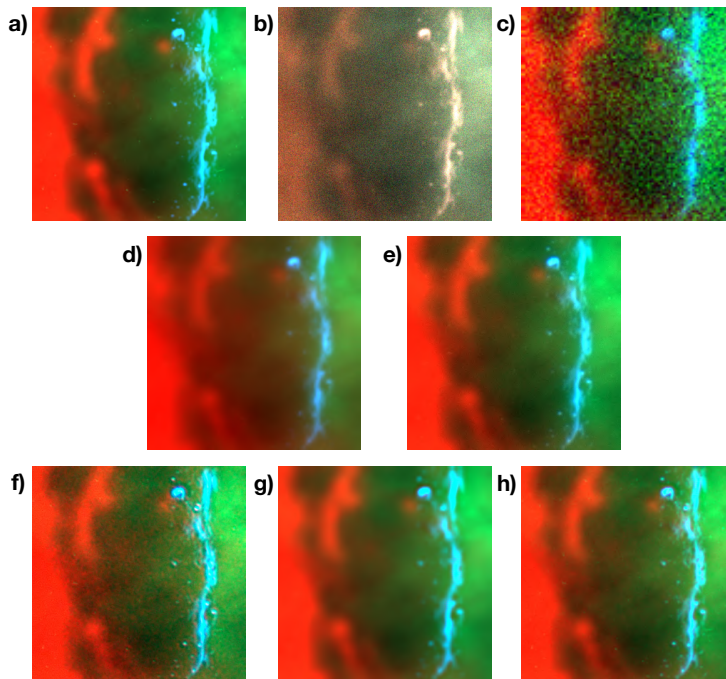


FIGURE C.2 – Compositions colorées RGB de a) l'image originale, b) l'image multispectrale observée, c) l'image hyperspectrale observée et les produits fusionnés de d) la méthode par interpolation, e) la méthode Brovey, f) l'inversion MS, g) l'inversion HS et h) la méthode proposée munie de la régularisation de type Sobolev.

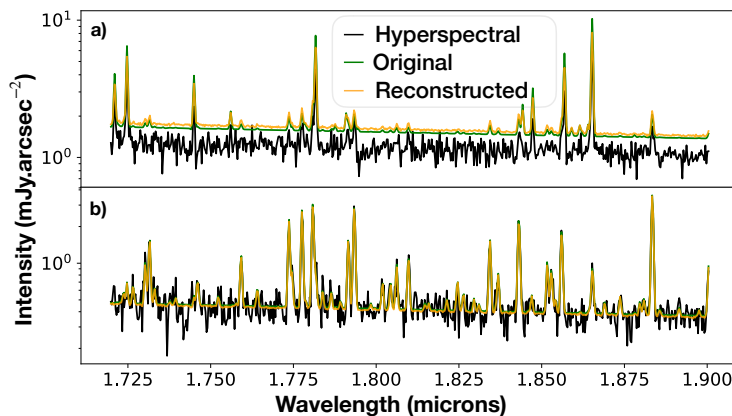


FIGURE C.3 – Spectres hyper-spectraux, originaux et reconstruits (avec la méthode proposée) provenant de a) une zone de frontière de l'image, b) une région spatialement lisse correspondant à un pixel affiché en bleu et rouge respectivement dans la figure C.2.

Les figures C.2 d) à h) montrent des compositions colorées RGB des produits fusionnés ainsi que l'image originale (a) à reconstruire. La méthode proposée fournit clairement les meilleurs résultats. En particulier, la reconstruction de détails spatiaux fins autour des zones de frontière (pixels

bleus) semble bien meilleure que les résultats fournis par la méthode de base, la méthode Brovey et l'inversion HS. L'inversion MS semble capable de reconstruire ces détails mais produit une image fusionnée plus bruitée. Les spectres de l'image hyperspectrale, de l'image originale et de l'image reconstruite avec la méthode proposée sont présentés dans la figure C.3 pour deux zones particulières. En haut (resp. en bas), les spectres sont associés à un pixel provenant d'une région structurée (resp. lisse) affiché en bleu (resp. rouge) dans la figure C.2. Pour ces deux régions, notre méthode semble capable de reconstruire la plupart des raies, même celles de faible intensité. Plus généralement, la reconstruction spectrale est excellente mais la figure C.3 a) souligne les limitations de la régularisation spatiale qui lisse les intensités le long des structures et mène à certaines aberrations spectrales. D'après ces deux illustrations, le débruitage spatial et spectral effectué par la fusion semble efficace.

| Méthodes | aSAM | aSSIM | PSNR | Temps |
|---------------|--------------|---------------|--------------|-----------|
| Interpolation | 0.052 | 0.9502 | 66.90 | / |
| Brovey | 0.052 | 0.9930 | 69.48 | 19 |
| Inversion HS | 0.029 | 0.9741 | 70.69 | 1300 + 20 |
| Inversion MS | 0.068 | 0.9908 | 70.38 | 600 + 15 |
| Fusion rapide | 0.037 | 0.9948 | 72.64 | 1900 + 20 |

TABLE C.1 – Performance des méthodes de fusion : aSAM (rad), aSSIM, PSNR (dB), and temps de calcul (pré-traitement + fusion, secondes).

Pour évaluer la qualité de la reconstruction au delà d'une inspection visuelle rudimentaire, nous étudions les trois mesures quantitatives présentées dans le chapitre 4. La qualité de la reconstruction spectrale est mesurée en calculant l'indice aSAM, l'indice de similarité structurelle (aSSIM) évalue la dégradation spatiale des structures sur chaque bande spectrale. Le PSNR est utilisé pour évaluer la qualité globale de la reconstruction au sens des moindres carrés. Les résultats quantitatifs sont reportés dans la table C.1 où, pour chaque métrique, les deux meilleurs résultats apparaissent en gras. En comparaison de toutes les autres méthodes, l'algorithme de fusion proposé apparaît comme le meilleur compromis, fournissant la meilleure reconstruction spatiale et globale et la deuxième meilleure reconstruction spectrale. l'inversion HS fournit la meilleure reconstruction spectrale avec mais une mauvaise reconstruction spatiale avec la deuxième valeur la moins bonne de aSSIM. Au contraire, l'inversion MS fournit la deuxième meilleure reconstruction spatiale mais la plus mauvaise reconstruction spectrale. La meilleure reconstruction globale est atteinte par la méthode proposée, améliorant les résultats de la méthode par interpolation jusqu'à 8dB. La méthode Brovey n'améliore que peu les résultats donnés par la méthode par interpolation. Abstraction faite du temps de prétraitement, toutes les méthodes comparées dans leur implémentation optimale sont très rapides et accomplissent la fusion en moins de 20 secondes.

Cette étude montre finalement que, dans le cas de données observées multispectrales et hyperspectrales à faible rapport signal à bruit, lorsque le signal provenant de la scène n'est pas intense, la méthode de fusion pro-

posée munie de la régularisation de type Sobolev surpasse les méthodes de l'état de l'art, reconstruisant correctement les détails spatiaux et spectraux.

C.5 EXPÉRIENCES SUR LA SCÈNE COMPLÉMENTAIRE

C.5.1 *Protocole expérimental et méthodes comparées*

Cette annexe détaille les résultats de la fusion de données avec flous spectralement variant décrite dans le chapitre 4 appliquée au jeu de données complémentaire décrit dans l'annexe B.1. Ce jeu de données est composé d'une image simulée originale de haute résolution spatiale et spectrale et d'images multispectrales et hyperspectrales correspondantes qui seraient observées par deux instruments dédiés. Cette scène a été créée uniquement dans un but de test algorithmique complémentaire de la méthode de fusion développée dans ces travaux de thèse sur une scène contenant des hautes fréquences spatiales. Elle est construite sous une hypothèse de rang faible spectral. Plus précisément, cette scène simulée est la combinaison de quatre spectres élémentaires et de quatre cartes spatiales complexes dérivées d'observations réelles. Cette image de référence correspond à un découpage spatial et spectral de l'image décrite dans l'annexe B.1 et est composée de 300×300 pixels et de 4974 bandes spectrales, de longueur d'onde allant de 1 à 2.35 microns. Une composition colorée RGB est montrée dans la figure C.4.

À partir de cette scène originale, les images multispectrale et hyperspectrale observées ont été dérivées des modèles directs introduits dans le chapitre 3 pour simuler des observations de l'imageur de NIRCam et de l'IFU de NIRSpec embarqués sur le télescope spatial James Webb [Gardner *et al.*, 2006]. L'image multispectrale est composée de 300×300 pixels et de 11 bandes spectrales tandis que l'image hyperspectrale est composée de 100×100 pixels et de 4974 bandes spectrales. Les opérateurs de dégradation spatiale et spectrale qui modélisent la réponse des deux instruments est celle décrite dans le chapitre 3 et fournie par la documentation du JWST [Space Telescope Science Institute (STScI), 2017a, 2017c, 2017b]. Ces données observées sont corrompues par un bruit mixte Poisson-Gaussien également décrit dans le chapitre 3. Les images hyperspectrale et multispectrale observées sont affichées dans la figure C.4 comme des compositions colorées de trois bandes spectrales. La dégradation spatiale du signal, plus particulièrement des structures, est clairement visible sur la visualisation de l'image hyperspectrale. Le manque de contraste de la composition colorée associée à l'image multispectrale témoigne de la dégradation spectrale induite par l'instrumentation d'observation multispectrale.

Nous comparons premièrement l'algorithme de fusion proposé avec une technique naïve de super-résolution, dont il sera fait référence par la suite comme la méthode par interpolation. Elle repose sur une hypothèse de rang faible sur le contenu spectral et consiste à interpoler par splines bicubiques la projection de l'image hyperspectrale sur le sous-espace spectral. Deuxièmement, on considère la méthode Brovey. Finalement, on évalue

la méthode proposée dans ces travaux de thèse, munies des trois régularisations décrites dans le chapitre 4 : la régularisation de type Sobolev, la régularisation de type Sobolev pondéré et la régularisation par dictionnaire. Notons que, toutes ces méthodes précédemment mentionnée ainsi que celle proposée, requiert une identification du sous-espace. Dans ce travail, cette étape est effectuée à l'aide d'une ACP sur l'image hyperspectrale. Les hyperparamètres nécessaires aux différentes versions de la méthode proposée ont été déterminés empiriquement de manière à obtenir les meilleurs résultats.

C.5.2 Résultats

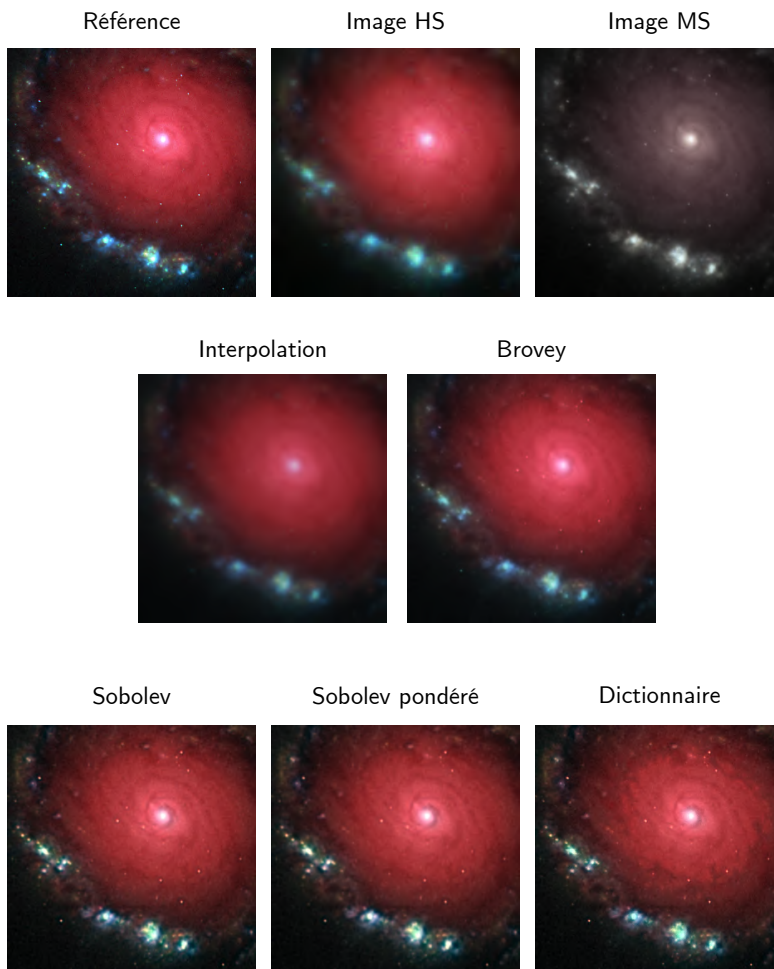


FIGURE C.4 – De gauche à droite et de haut en bas : compositions colorées RGB de l'image synthétique de référence, l'image hyperspectrale observée, l'image multispectrale observée et les produits fusionnés obtenus par la méthode d'interpolation, la méthode Brovey, la méthode de fusion proposée munie de la régularisation de type Sobolev, de la régularisation de type Sobolev pondéré et de la régularisation par dictionnaire.

Les résultats de fusion obtenus par les méthodes comparées sont décrits dans la figure C.4 comme des images RGB utilisant la même composition de couleurs que dans les figures du chapitre 3. Des zooms sur les structures de la scène sont montrés dans la figure C.5. Qualitativement, la reconstruction semble excellente. Le débruitage semble efficace pour la plupart des méthodes. L'intensité du signal d'origine n'est cependant pas restaurée par la méthode par interpolation tandis que la méthode Brovey et la méthode proposée munie de chacune des régularisations semblent mieux

reconstruire les hautes intensités. L'intensité du pourtour du centre de la galaxie, en rouge, lors de l'utilisation de la régularisation par dictionnaire, semble mal reconstruite. Le gain en résolution spatiale et spectrale des images reconstruites par les versions de l'algorithme proposé comparativement aux images multispectrale, hyperspectrale et reconstruite par la méthode par interpolation est clairement remarquable. Le contraste entre les composantes colorées dans l'image multispectrale observée est restauré, tout comme des détails spatiaux floutés dans l'image hyperspectrale observée. Plus particulièrement, les structures de la figure C.5 apparaissent encore mieux reconstruites par la méthode proposée, quelle que soit la régularisation, que par la méthode Brovey. On observe cependant, pour la méthode proposée, des artefacts autour des structures de l'image. Une partie des artefacts est due à la déconvolution spatiale et l'autre partie est due à la super-résolution spatiale.

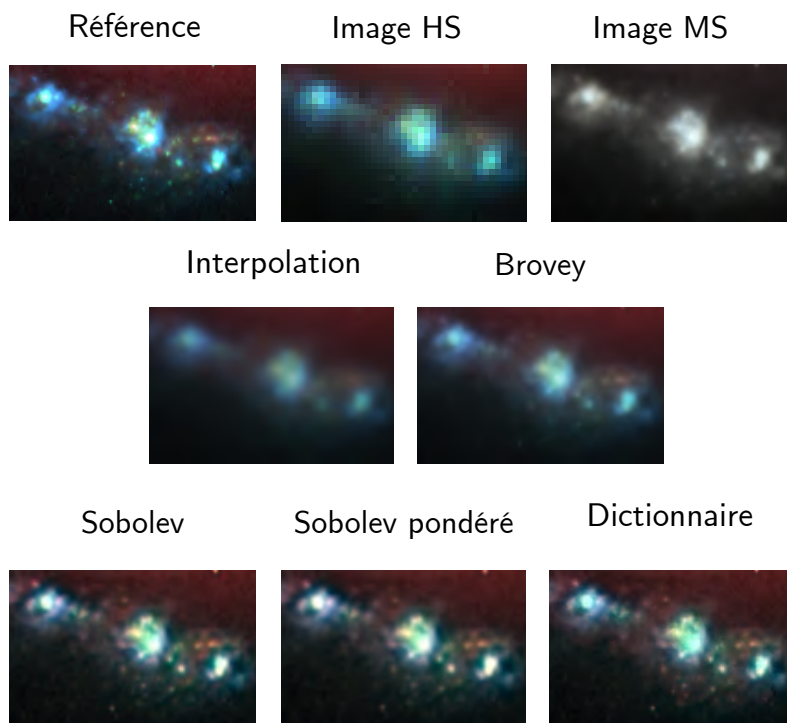


FIGURE C.5 – Zooms sur les structures de la galaxie extraites de la figure C.4 pour chacune des images simulée, observée et reconstruites par les méthodes comparées.

Pour évaluer la qualité de la reconstruction au delà d'une inspection visuelle rudimentaire, nous étudions les trois mesures quantitatives présentées dans le chapitre 4. La qualité de la reconstruction spectrale est mesurée en calculant l'indice aSAM, l'indice de similarité structurelle (acSSIM) évalue la dégradation spatiale des structures sur chaque bande spectrale. Le PSNR est utilisé pour évaluer la qualité globale de la reconstruction au sens des moindres carrés. Ces résultats quantitatifs sont reportés dans la table C.2. Les deux meilleurs résultats pour chaque mesure sont accentués en gras.

La méthode par interpolation et la méthode Brovey obtiennent la valeur de aSAM la plus basse tandis que les trois versions de la méthode proposée montrent des résultats équivalents entre elles, environ 40% moins bons que

| Méthodes | aSAM | acSSIM | PSNR | Temps de calcul |
|-----------------|--------------|---------------|--------------|-----------------|
| Interpolation | 0.023 | 0.1146 | 60.05 | / |
| Brovey | 0.023 | 0.0330 | 65.23 | 32 |
| Sobolev | 0.039 | 0.0067 | 64.17 | 2000 + 10 |
| Sobolev pondéré | 0.039 | 0.0067 | 64.18 | 2000 + 13 |
| Dictionnaire | 0.038 | 0.0054 | 64.00 | 2200 + 90 |

les deux autres méthodes. La méthode proposée munie de la régularisation par dictionnaire donne les meilleurs résultats de reconstruction spatiale, avec une valeur de acSSIM 20% meilleure que lors de l'utilisation des régularisations de type Sobolev et Sobolev pondéré. Comme confirmation des observations qualitatives, la méthode par interpolation et la méthode Brovey montrent des résultats bien moins bons. En effet, leur valeur associée de acSSIM correspond à 6 et 21 fois la valeur obtenue en choisissant la méthode proposée liée à la régularisation par dictionnaire. Le gain en performance de reconstruction spatiale par les différentes versions de la méthode proposée est ici extrêmement important. La meilleure reconstruction globale est atteinte par la méthode Brovey et la méthode proposée liée à la régularisation de type Sobolev pondéré, améliorant les résultats de la méthode par interpolation jusqu'à 5dB. Bien qu'apparaissant visuellement moins bonne sur les figures C.4 et C.5, la méthode Brovey fournit une meilleure performance globale que la fusion proposée qui introduit des artéfacts peu visibles sur ces figures. Les versions de la méthode proposée donnent des résultats de reconstruction globale similaires, avec une différence de moins de 0.2dB. Abstraction faite du temps de prétraitement, toutes les méthodes comparées dans leur implémentation optimale sont très rapides et accomplissent la fusion en moins de 90 secondes. Lors de l'utilisation de la régularisation de type Sobolev ou Sobolev pondéré, le temps propre de fusion est d'environ 10 secondes. L'optimisation alternée pour résoudre le problème de fusion par dictionnaire nécessite ici quelques dizaines d'itérations externes, allongeant substantiellement le temps de calcul.

La figure C.6 présente les cartes d'erreur SAM. Ces erreurs spectrales ont été calculées entre les spectres de référence et reconstruits sans moyennage sur les pixels. Contrairement aux autres expériences effectuées dans le chapitre 4, les spectres situés autour des détails de la scène (caractérisées par une région à fort gradient) semblent aussi bien reconstruits que dans les zones lisses. Pour toutes les méthodes comparées, la région ne présentant que très peu de signal, en bas à gauche de l'image, apparaît comme la zone contenant l'erreur spectrale la plus grande. Le centre de la galaxie, région à texture spatiale plutôt lisse, semble moins bien reconstruite par les versions de la méthode proposée. Sur les cartes d'erreurs associées à ces versions de la fusion, on observe également un motif spatial de mauvaise reconstruction dû à la super-résolution. Enfin, toutes les cartes d'erreurs semblent bruitées. Cet effet peut venir de la construction

TABLE C.2 – Performances des méthodes de fusion : aSAM (rad), acSSIM, PSNR (dB), et temps de calcul (prétraitement + fusion, secondes).

de la scène complémentaire décrite dans l'annexe B.1. Les composantes spatiales de la scène proviennent de données d'observation réelles non traitées et donc contiennent du bruit probablement non reconstruit par les différentes méthodes de fusion. La figure C.7 représente les erreurs cSSIM en fonction de la longueur d'onde, i.e., sans moyennage sur les bandes spectrales. Le spectre de référence affiché en bas du graphique met en lumière que les variations de cSSIM en fonction de la longueur d'onde sont corrélées avec les raies d'émission de haute intensité dans la scène. La méthode par interpolation et la méthode Brovey montrent des erreurs spatiales très grandes mais un peu plus faibles pour des bandes spectrales correspondant à des longueurs d'onde de raies d'émission de haute et moyenne intensité. Les trois versions de la méthode proposée donnent des erreurs spatiales en fonction de la longueur d'onde basses et très similaires entre elles. Cependant, la régularisation par dictionnaire apparaît comme la meilleure, avec des valeurs de cSSIM obtenues plus faibles pour toutes les bandes spectrales. La qualité de la reconstruction spatiale obtenue, pour des bandes spectrales correspondant à des longueurs d'onde de raies d'émission de haute intensité et par les trois versions de la méthode proposée est moins bonne, jusqu'à parfois devenir plus mauvaise que la qualité de la reconstruction spatiale obtenue par la méthode Brovey.

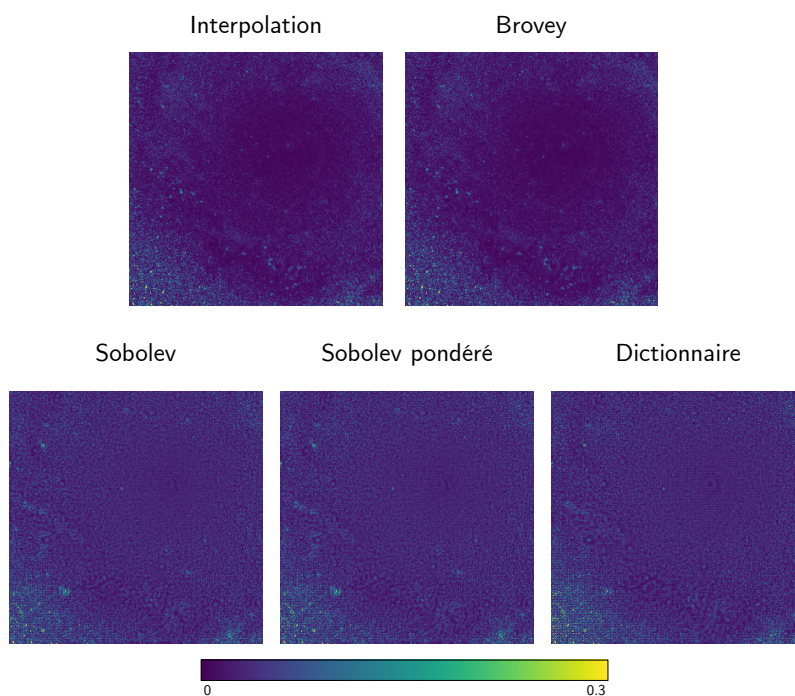


FIGURE C.6 – Cartes spatiales de la métrique SAM obtenues par, de haut en bas, la méthode par interpolation, la méthode Brovey et la méthode proposée munies des régularisations de type Sobolev, Sobolev pondéré et par dictionnaire. La reconstruction est meilleure pour des petites valeurs de SAM.

Les figures C.8 a) et b) montrent respectivement les histogrammes cumulés des erreurs cSSIM et SAM. D'après la figure C.8 a), la méthode par interpolation et la méthode Brovey fournissent une très grande erreur systématique avec un nombre important de bandes spectrales reconstruites ayant une grande valeur de cSSIM, supérieure à $2 \cdot 10^{-2}$. Au contraire, une très grande majorité de bandes spectrales reconstruites par les versions de la méthode proposée présentent une erreur spatiale inférieure à

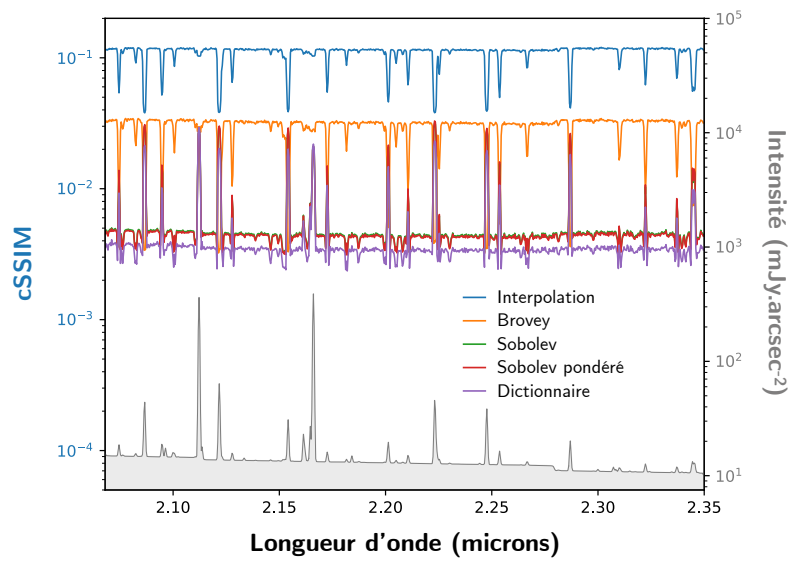


FIGURE C.7 – Lignes colorées : cSSIM en fonction de la longueur d'onde obtenu par les méthodes comparées. La reconstruction est meilleure pour des petites valeurs de cSSIM. Ligne grise et ombragée : un spectre de la scène originale situé sur une structure.

1.10^{-2} . Toutes les méthodes semblent toutefois avoir un très petit nombre de bandes spectrales avec une très grande valeur de cSSIM. Dans la figure C.8 b), les courbes correspondant à la régularisation de type Sobolev et Sobolev pondéré ainsi que les courbes correspondant à la méthode par interpolation et à la méthode Brovey sont superposées. Ces deux dernières présentent une faible erreur systématique, avec une grande majorité de pixels ayant une erreur de reconstruction spectrale inférieure à 2.10^{-2} . Au contraire, les trois versions de la méthode proposée montrent une grande erreur systématique, un grand nombre de pixels ayant une erreur spectrale supérieure à 2.10^{-2} . Ces méthodes semblent obtenir des performances de reconstruction spectrale très proches. Toutes les méthodes semblent ici aussi avoir un très petit nombre de pixels avec une très grande valeur de SAM.

L'étude complémentaire menée dans cette annexe montre finalement que, dans le cas d'une scène synthétique spatialement et spectralement complexe, la méthode de fusion proposée munie des régularisations de type Sobolev, Sobolev pondéré ou dictionnaire améliore grandement la qualité de la reconstruction spatiale obtenue par les méthodes de l'état de l'art, tout en conservant une très bonne reconstruction globale.

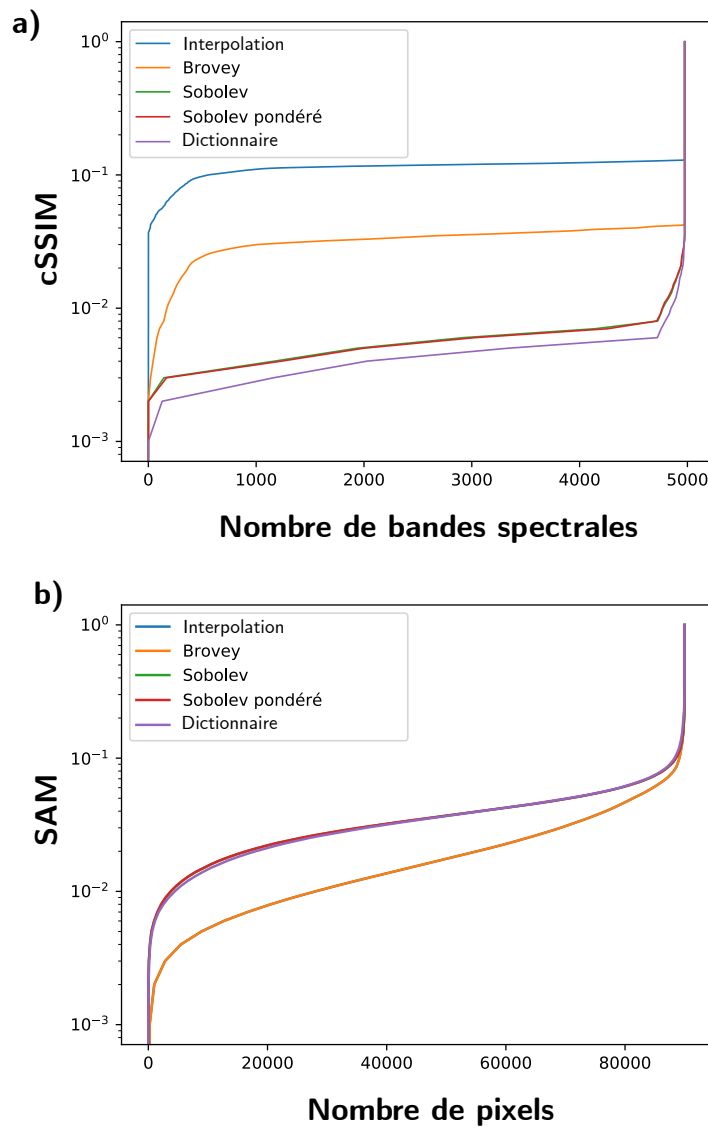


FIGURE C.8 – a) : Histogrammes cumulatifs des valeurs de cSSIM obtenues par la méthode par interpolation, la méthode Brovey et la méthode proposée munies des régularisations de type Sobolev, Sobolev pondéré et par dictionnaire. b) : Histogrammes cumulatifs des valeurs de SAM obtenues par les méthodes citées précédemment.

Generative Networks For Emulating Synthetic Sky Images



Le programme d'été en astrophysique Kavli regroupe des scientifiques avec un large éventail de compétences pour résoudre des problèmes concrets de recherche en astrophysique. Il a lieu tous les étés pour 6 semaines. Ce programme a regroupé à l'université de Californie à Santa Cruz, en 2019, 15 chercheurs seniors, 15 chercheurs post-doctoraux et 15 étudiants doctorants pour collaborer à différents projets de recherche d'apprentissage automatique à l'ère des grands jeux de données en astrophysique. Parmi les divers projets proposés par les chercheurs seniors et post-doctoraux, j'ai contribué à l'étude de réseaux génératifs pour l'émulation d'images synthétiques de galaxies. Le rapport technique suivant détaille les travaux que j'ai mené, en collaboration avec étudiants et chercheurs, durant ces 6 semaines.

GENERATIVE NETWORKS FOR EMULATING SYNTHETIC SKY IMAGES

Emulating astronomical images using Deep Generative models conditioned with Gaussian Processes or Autoregressive flows.

Claire Guilloteau

Université de Toulouse

Nesar Ramachandra

Argonne National Laboratory

François Lanusse

UC Berkeley

Sultan Hassan

New Mexico State University

Yuan-Sen Ting

Princeton University

Marc Huertas-Company

Observatoire de Paris & U. Paris Diderot

Sunny Cheng

University of Nottingham

Brant Robertson

University of California Santa Cruz

Alexie Leauthaud

University of California Santa Cruz

Song Huang

University of California Santa Cruz

September, 2019

ABSTRACT

Robust generation of high-fidelity data is an essential component of large astronomical survey analysis. While expensive simulations are typically used for creating synthetic data, recent development of fast emulators using machine learning techniques like Generative models – Variational Autoencoders[1], Generative Adversarial Networks[2] or Gaussian Processes – have made high precision predictions of cosmological functions possible. This projects deals with a natural progression of the above for emulating astronomical images using Deep Generative models. The project involves creating training images using GalSim, a software library for generating images of stars and galaxies, tuning a relatively few number of physical parameters on a space-filling scheme. A second dataset, made of real galaxy images from Cosmic Evolution Survey – COSMOS[3, 4] –, is also considered in this work. Ensemble of generative networks, Principal Component Analysis, Gaussian Processes, Variational Autoencoders and Masked Autoregressive Flow[5], is trained at interpolating values of input parameters. Independent measurement pipelines are applied to validate the emulated images beyond visual confirmation and hold-out tests. The network will be made more physics-aware based on this preliminary results and is extended to emulate realistic synthetic images tuned for other surveys and catalogs. Generative models designed in this work are compared at generating galaxy images and Deep generative models as Variational Autoencoders outperform machine learning techniques such as Principal Component Analysis for analytical and real images. An effort will be made in future work to improve current models performances and interpolate physical parameters to extend emulation to other surveys, as Illustris/TNG simulations.

Keywords Galaxy emulation · Neural Networks · Generative models · Variational Autoencoder

1 Introduction

The generation of high-fidelity data is a crucial challenge in large astronomical analyses, either for creation of mock sky catalogs in anticipation of future surveys, or in parameter inference pipelines for confrontations with observation. While modeling the complex non-linear physics as gravitational or Magneto-hydrodynamical interactions can be very precise, they cannot be described analytically and generally require expensive numerical simulations. Application of these in traditional statistical inverse problems of astrophysical parameter inference such as the Markov Chain Monte Carlo (MCMC) Metropolis-Hastings algorithm[6] is prohibitively expensive since these Bayesian inference algorithms rely on hundreds of thousands forward model evaluations to estimate posterior probabilities of model parameters.

Recent developments of machine learning techniques enable model parameters inference from experimental data at low computational cost. Progress on emulation techniques based on deep generative models allow high-precision and inexpensive forward models evaluation. Emulation methods in astrophysics, for example [7, 8, 9], are presented as relevant to many problems when a large number of expensive model evaluations is needed and so are those presented in this work.

This project aims at creating a robust emulator based on generative models and neural networks to generate synthetic sky images, composed of galaxy postage stamps. Such emulator will be trained at generating images of galaxies from a number of physical parameters. Meticulous assessments and measurement pipelines will be performed to validate the emulated images beyond visual confirmation.

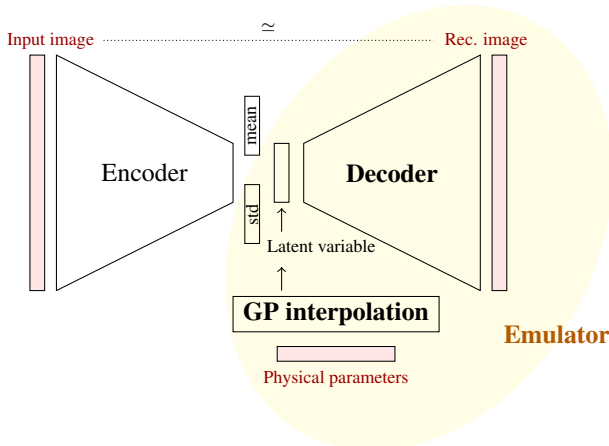


Figure 1: Emulation : an example with Variational Autoencoder and Gaussian Process

and decoder Fig. 1), learning a low-dimensional representation of the inputs, known as latent variables. Once trained, the dimensionality reduction network is removed and an interpolator (designated as Gaussian Processes – GP – interpolation Fig. 1) or a conditioning process is trained to map from physical parameters to latent variables. Finally, emulating synthetic galaxy images from physical parameters is presented here as mapping the latter to latent variables and decoding them to images. In this work, we propose three emulator architectures. The first one uses Principal Components Analysis (PCA) as generative model and GP as an interpolator. The second one, as shown in Fig. 1, is composed of a Variational AutoEncoder (VAE) [1] and GP interpolation. The third emulator architecture also consists of a VAE as a generative model but a conditional density estimation network (Masked Autoregressive Flow – MAF [5]) is used as a conditioning process. To assess these emulators performance, we consider several measurement and validation pipelines. We first evaluate reconstruction quality through first order metrics and compare pixel intensities between original and emulated images, compute reconstruction errors as Mean Square Error (MSE) and R-squared error (R^2). Then, we propose higher order metrics to confirm that the emulator is capable of realistic data synthesis. To do so, we measure, on original and emulated images independently, shear parameters using GalSim. The distribution of these parameters should be similar.

This report is organized as follows : in Sect. 2, we describe the 2 datasets used in this work. Emulation methods are detailed in Sect. 3 and results are evaluated in Sect. 4. Finally, perspectives and future work are discussed and conclusions of this work are presented in Sect. 5.

Given the complexity involved in real galaxy images, we first create a simulated dataset using GalSim [10], a library for generating images of stars and galaxies. This training set is made of elliptical exponential profile images generated by tuning relatively few parameters on an optimal space-filling sampling scheme [11]. However, deep learning techniques are known to be sensitive to input noise and real galaxy images are much more complex than analytical profiles. Therefore, an emulator trained on this first data wouldn't be able to generate high-fidelity data. Therefore, we define a second dataset made of real galaxy postage stamps from the Cosmic Evolution Survey (COSMOS) [3] taken by Hubble Space Telescope (HST) and related physical parameters given by GalSim and by Leauthaud et al. [4]. Several emulators are then trained and experienced on these datasets. Emulators in this work are designed with two components and trained in two steps, as illustrated Fig.1. First, an unsupervised generative model is trained to reproduce input images through dimensionality reduction and reconstruction (respectively denoted as encoder

2 Data

2.1 GalSim images

Galaxy images emulated in this work are generated using GalSim [10]. This open-source toolkit aims at providing images of galaxies and stars, including several transformations handling such as dilation, rotation, shear or convolution with Point spread function (PSF) profiles. GalSim allows one to generate and transform a number of parametric profiles or images of galaxies from Cosmic Evolution Survey (COSMOS) [3], a real astrophysical catalog, associated to a PSF model and a parametric representation.

2.1.1 Analytical profiles

Given some well-chosen physical parameters, GalSim is able to generate galaxy profile images. Therefore, as a first simple dataset, we define five physical parameters to tune for galaxy images generation with GalSim. We initially generate a set of parametric exponential profiles. The surface brightness varies along with r as

$$I(r) = \frac{F}{2\pi r_0^2} \exp - \frac{r}{r_0},$$

with respect to F , total flux and r_0 , scale radius. Such generated profiles are circularly symmetric and centered on the coordinate origin. Then we introduce two additional parameters describing a shear distortion to transform a circle into an ellipse with a minor-to-major axis ratio $q = \frac{b}{a}$ and a position angle β . In practice, we use as parameters $g_1 = \frac{a-b}{a+b} \cos 2\beta$ and $g_2 = \frac{a-b}{a+b} \sin 2\beta$, under the constraint $\sqrt{g_1^2 + g_2^2} < 1$, to define this transformation. The g_1 and g_2 are called "reduced shear" parameters. Finally, these elliptical exponential profiles are convolved with a Gaussian PSF, characterized by its Full Width at Half Maximum (FWHM), linearly related to the variance σ^2 of the related 2-D Gaussian distribution. The values of these 5 physical parameters ($F, r_0, g_1, g_2, \sigma^2$) are generated on a latin hypercube design for optimal space filling. This space-filling scheme is explained in detail in Appendix A.

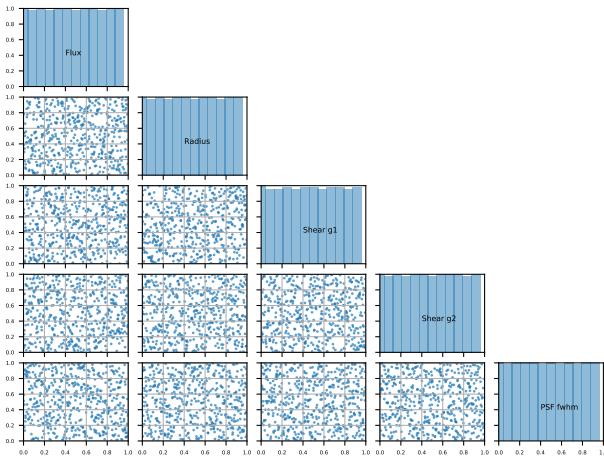


Figure 2: Optimal space filling scheme: latin hypercube for 512 evaluations.

A realization of latin hypercube sampling performed for 512 sampled points is presented Fig. 2. Each graph in the diagonal plots the distribution histogram of each parameter, which is, as expected, uniformly distributed. Each scatter plot represents the normalized value of 2 physical parameters associated to each sampled point. Using these physical parameters samples, we generate with GalSim a representative analytical profiles dataset. Fig. 3 shows a subset of these parametric galaxy images and emphasizes the large diversity of generated elliptical profiles.

2.1.2 COSMOS-type images

The COSMOS survey is the largest survey taken by the Hubble Space Telescope (HST). A publicly available subset of this survey, the COSMOS HST Advanced Camera for Survey (ACS) is used by GalSim as postage stamps provided by [add ref Leauthaud et al. 2007] with a PSF model based on the optical properties of HST. The catalog used here is a catalog of ~ 82000 galaxies taken by the Wide Field Channel (WFC),

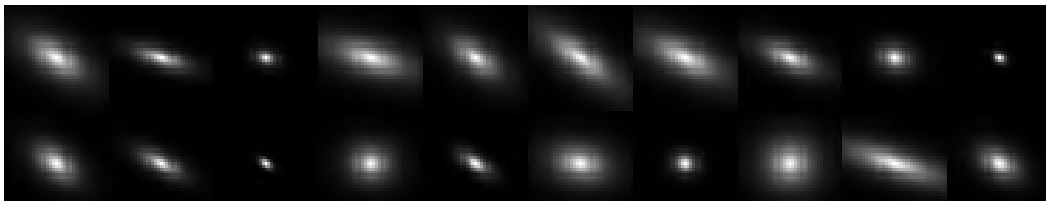


Figure 3: 20 GalSim profiles generated with 5 parameters: galaxy flux, radius, shear profile parameters g_1 and g_2 , Gaussian PSF fwhm.

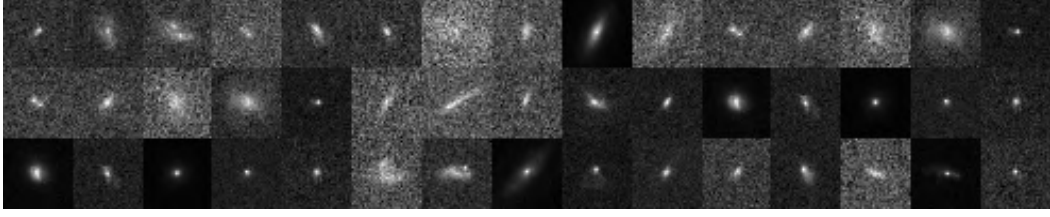


Figure 4: 45 postage stamps (64×64 pixels) of real galaxy images from COSMOS with an absolute depth magnitude lower than $I_{AB} = 25.2$, provided by GalSim.

through the F814W filter with an absolute depth magnitude lower than $I_{AB} = 25.2$. fig. 4 shows 45 postage stamps of size 64×64 pixels of such real galaxies in COSMOS provided by GalSim. The noisy images of the galaxies depart significantly from the analytical profiles from Fig. 3, due to the reduction in brightness and features with decreased signal-to-noise ratio. This underlines the fact that analytical profiles are highly over-simplified to understand their complexities of real galaxies.

Every postage stamp in GalSim is associated with a parametric representation. Galaxies have been fitted either with a sersic profile or a bulge and disk profile. The surface brightness of a sersic profile varies as

$$I(r) = \frac{F}{a(n)r_e^2} \exp -b(n) (r/r_e)^{\frac{1}{n}},$$

where r_e is the half-light radius (the radius within half of the galaxy light is contained), $a(n)$ is a normalization function and $b(n)$ computed by GalSim following [add ref Ciotti et al. 1999] with respect to n , the sersic index. The bulge profile is fitted with a DeVaucouleurs profile whose surface brightness is

$$I(r) = \frac{F}{0.010584r_e^2} \exp -7.66925 (r/r_e)^{\frac{1}{4}},$$

and the disk profile is finally fitted with an exponential profile. Similar to elliptical exponential profiles generation (Sect. 2.1.1), the two shear parameters $q = \frac{b}{a}$ and β are added to describe each galaxy. GalSim also provides an estimate of the redshift z of each galaxy. Hence, these 6 parameters (F, r_e, n, q, β, z) represent the physical parameters provided by GalSim. We also include some additional parameters introduced in [add ref Leauthaud et al. 07] : absolute magnitude I_{AB} in the AB system, star formation rate SFR , specific star formation rate $sSFR$ and stellar mass M .

In this set of real galaxy images, the distribution of each parameter is not uniform as in analytical profiles generated in the previous section with an optimal space-filling scheme. Fig. 5 presents the distribution histogram of 5 physical parameters associated to each image (in the diagonal) and scatter plots of normalized values of 2 physical parameters. These plots give an overview of galaxies in our COSMOS-type dataset. The distribution of these 5 physical parameters looks like Gamma or Normal distributions where normalized extreme values (near 0 or 1) are under-represented in the dataset. This might have an influence on the performance of our generative model, which will not be trained enough to generate outliers in the training set, as instance galaxies with a high or medium half-light radius and a high flux.

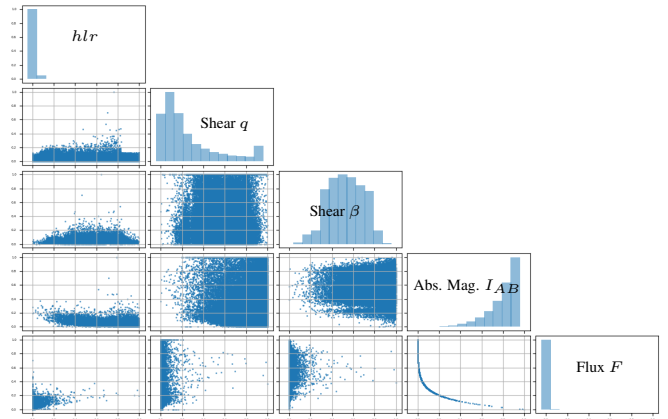


Figure 5: An overview of a few COSMOS galaxy physical parameters given by GalSim et Leauthaud et al. [4] : half-light radius, shear parameters q and β , absolute magnitude and galaxy flux. In the diagonal: the distribution histogram of physical parameters associated to each image. Other plots : scatter plots of normalized values of 2 physical parameters associated to each image.

3 Emulation methods

This section develops different emulation methods build up with a generator (Principal Components Analysis - PCA or Variational AutoEncoder - VAE) and an interpolating (Gaussian Processes - GP) or a conditioning (Masked Autoregressive Flow - MAF) process, their main characteristics and architecture. These emulators are trained and tested on the various datasets we introduced in Sect. 2. Visual results on each dataset and for each method are shown and discussed.

3.1 Emulation with PCA and GP

PCA is known as an orthogonal and linear dimensionality reduction procedure to transform a set of N observations of dimension p expected to be correlated into a smaller set of linearly independent M principal components of dimension p . This process performs a M -dimensional ellipsoid fitting to the data. The principal components are then the axes of the ellipsoid. More formally, a PCA allows to write each observation $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^p$ as

$$\mathbf{X} \simeq \mathbf{B}\mathbf{z}, \quad (1)$$

with $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{p \times M}$ is the orthogonal truncated basis (i.e. the principal components basis) and $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^M$ are the weights associated to each principal component. The encoding part of the PCA generator is finding the best ellipsoid fit and thus the principal components matrix \mathbf{B} . In practice, the number of principal components M is an hyperparameter and is often set as the smallest number of components that statistically explain at least a certain percentage (99.5 % in Fig. 6.a)) of the variance of the dataset. The decoding part of the PCA generator is basically multiplying this basis matrix \mathbf{B} with a latent vector \mathbf{z} . As PCA relies on linear assumptions, if the data is not linearly correlated, or if data doesn't fit in an ellipsoid manifold, PCA could fail to find a relevant basis of principal components. Therefore, we expect PCA to be a powerful generator on the simple analytical profiles dataset and quickly be over-performed by other generators for complex COSMOS images.

Once a dimensionality reduction has been performed on the training set and an efficient generator model such as PCA has been trained, we aim at linking the related physical parameters to the low-dimensionality representation of the data, i.e. the latent space represented in Eq. 1 by \mathbf{z} . To this aim, we need to observe and ensure a dependency between the observed physical parameters of the training set and the related latent variables. This can be achieved by simply plotting point-wise dependency graphs between 2 dimensions of the latent space and assigning to each point a color corresponding to the value of a specific physical parameter. Such a graph is given Fig. 7 and will be discussed later. If any dependency is noticed, mapping physical parameters $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^d$ into a latent variable $\mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^M$ can be performed with a Gaussian Process (GP) interpolation. GP interpolation process is detailed in Appendix B.

As shown in Fig. 6, we performed a PCA on 512 analytical profiles generated with GalSim in Sect 2.1.1, setting the number M of components to 12 such that the model explains $\sim 99.5\%$ of the variance of the data. The resultant 12 components are shown in Fig. 6.b). Fig 7 shows an example of a point-wise dependency plot of the first 2 dimensions of the latent space, i.e. the values of the two first principal components, where a light yellow point corresponds to a large-radius galaxy and a dark blue point to a small-radius galaxy. There is here a very clear dependency between the physical parameter r_0 and the value of the first two components. Similar plots can be derived to ensure that dependencies are observed with every physical parameter and that an interpolation between physical parameters and latent variables is possible. A Gaussian Process is then trained to perform such interpolation and the emulator finally the system {GP, inverse PCA}, with GP interpolating from physical parameters to a latent variable and inverse PCA generating a galaxy image from the interpolated latent variable. Results of this emulator on 10 test-analytical profiles (which are not included in the training set) are shown in Fig. 8. The top row shows the original analytical profiles whereas the bottom row shows the emulated image from the physical parameters associated to each profile in the first row. These results confirm that, visually, our emulator is able to generate realistic simple profiles from physical parameters. However, very sheared galaxies aren't visually well emulated as an artifact appears in the emulated images such that the emulated profile doesn't look like an exponential profile anymore. The last column of Fig. 8 is an example of this phenomenon. Such artefacts occur during image generation by inverse PCA, we train another generative model on this dataset in Sect. 3.2 to fix this issue.

The same PCA pipeline is then applied on the COSMOS-type dataset. The number of components is set to $M = 20$ to explain 97.7% of the variance of the data. The threshold of explained variance ratio is reduced here because a small part of the total variance of the data is related to the noise in training set. We aim here at recovering only the principal components only related to the galaxies in our dataset. Before controlling dependency between physical parameters and latent variable, we need to verify that is able to reproduce more complex images than analytical profiles, Fig. 9. Similarly the first row shows the original COSMOS images. The second row plots the reconstructed image after basis truncation and last row images are noisy versions of second row images, to confirm that reconstructed images with Gaussian noise are visually similar to original COSMOS images. PCA seems to be able to generate realistic galaxies when they are close to simple profiles but fails to reproduce more sophisticated profiles as galaxies flagged with a red star Fig. 9. Moreover, dependencies between physical parameters and latent variable are more difficult to notice in point-wise dependency plots, as illustrated in Fig. 10. Training a Gaussian Process to interpolate physical parameters in such a latent space isn't relevant and emulating COSMOS images with a {GP, inverse PCA} system fails to capture more complex structures. We next explore other methods that might overcome PCA-GP limitation.

3.2 Emulation with VAE and GP

In this section, we explore another generative model, a Variational Autoencoder, associated with Gaussian Processes to emulate more realistic analytical profiles and COSMOS images. VAE and GP emulator is expected to fix or improve PCA issues highlighted in the previous section. A Variational AutoEncoder (VAE) is an unsupervised generative model designed to, given a training data, generate new samples from the same distribution. VAEs are a subset

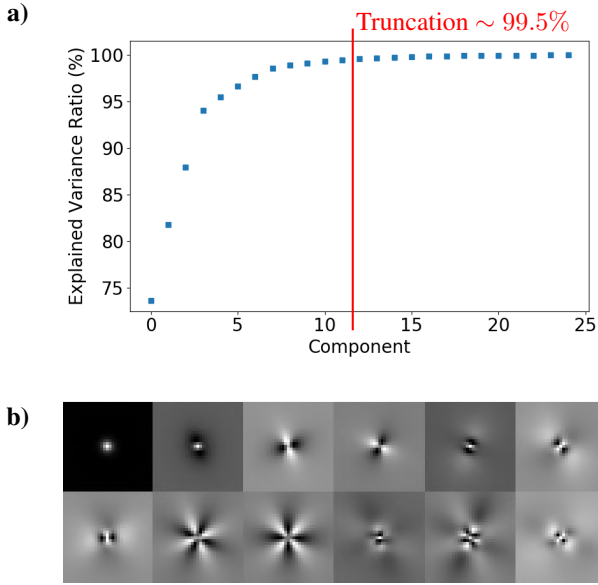


Figure 6: **a)** Explained variance ratio (%) versus number of components in truncated basis for a PCA performed on 512 analytical profiles generated with GalSim in Sect. 2.1.1. The truncation (in red) is performed such that linear combinations of the first principal components statistically explain $\sim 99.5\%$ of the variance of the data. **b)** The 12 first components (from highest to lowest individual explained variance ratio) composing the truncated basis \mathbf{B} in Eq. 1.

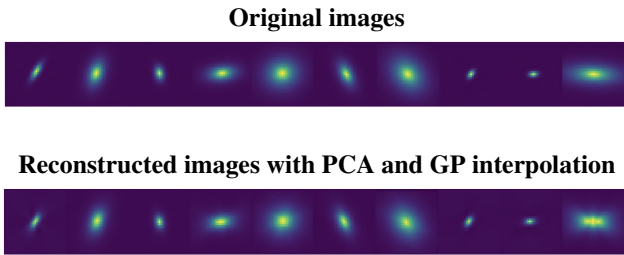


Figure 8: Visualisation of PCA-GP emulation of analytical profile images. Top row: Original COSMOS images to be reconstructed. Bottom row: Reconstructed COSMOS images with PCA and GP interpolation.

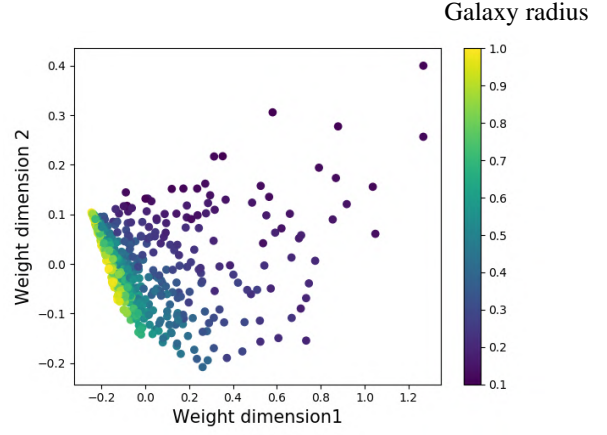


Figure 7: Point-wise dependency scatter plot for the first 2 dimensions of the latent vector \mathbf{z} in Eq. 1 calculated on the 512 analytical profiles dataset generated with GalSim in Sect. 2.1.1. A color is assigned to each point according to the radius of the related simulated galaxy.

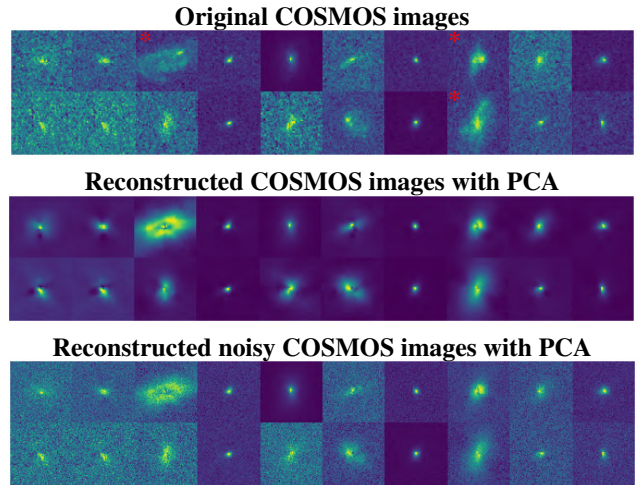


Figure 9: Visualisation of PCA emulation of COSMOS images. Top row: Original COSMOS images to be reconstructed. Middle row: Reconstructed COSMOS images with PCA. Bottom row: Reconstructed COSMOS images with PCA and Gaussian noise added.

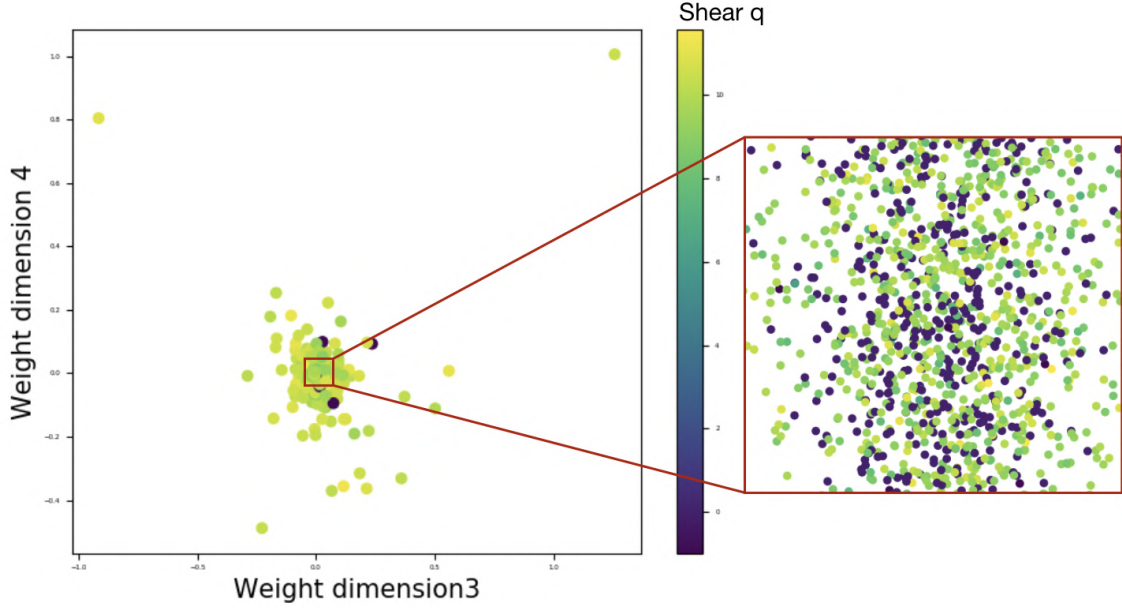


Figure 10: Point-wise dependency scatter plot for the first 2 dimensions of the latent vector \mathbf{z} in Eq. 1 calculated on the COSMOS-type dataset presented in Sect. 2.1.2. A color is assigned to each point according to the shear parameters q of the related galaxy.

of generative models with approximate (but explicit) density estimation. Given a training data \mathbf{x} , they define an untractable density function with latent variable \mathbf{z} , $p_\theta(\mathbf{x}) = \int p_\theta(\mathbf{z})p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})$. This density function cannot be optimized toward the network parameters θ directly. In practice, it is derived and a lower bound of the likelihood is optimized.

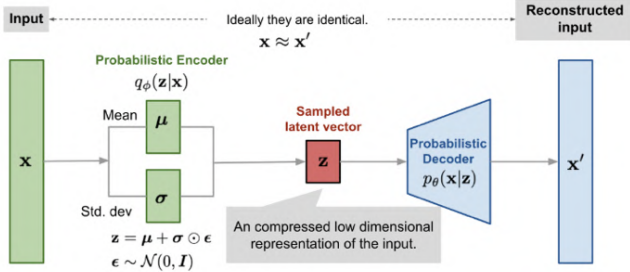


Figure 11: Probabilistic model of Variational Autoencoders: illustration.

VAEs, unlike Autoencoders, allow to sample from the model to generate data. Following the general architecture of a VAE detailed in Fig. 11, the generative model named here as probabilistic decoder, should be able from a sampled latent vector \mathbf{z} . This latent variable is a low-dimensional representation capturing the main features of our dataset, to sample from a true conditional $p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})$ a realistic generated output \mathbf{x}' . That latent vector \mathbf{z} is sampled from a true prior $p_\theta(\mathbf{z})$ usually chosen Gaussian such that $\mathbf{z} \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$, where Σ is a diagonal matrix of diagonal σ . The training aims at estimating the true parameters θ of the model. The intractability of the likelihood and the posterior density leads to introduce an encoder network which takes as input \mathbf{x} and estimates a posterior $q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$, with ϕ parameters of the encoder, which approximates the posterior $p_\theta(\mathbf{z}|\mathbf{x})$. Both encoder and decoder produce distributions over \mathbf{z} and \mathbf{x} and sample from this distribution to obtain \mathbf{z} and \mathbf{x}' . The loss function $l(\phi, \theta)$ detailed in Eq. 2 used to optimize parameters ϕ and θ is a lower bound of the log-likelihood $\log p_\theta(\mathbf{x})$.

$$l(\phi, \theta) = -\mathbb{E}_{\mathbf{z} \sim q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})} [\log p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})] + \mathbb{KL}[q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})||p(\mathbf{z})] \quad (2)$$

The training is thus maximizing this lower bound composed of two terms : the negative KL-divergence between the posterior $q_\phi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ and the prior $p_\theta(\mathbf{z})$ and the log-likelihood of $p_\theta(\mathbf{x}|\mathbf{z})$. This means that the training is optimizing toward ϕ and θ in order to make approximate posterior close to prior and reconstruct input data.

In practice, encoder and decoder parts of VAEs are designed as neural networks with different kind and number of layers depending on the task. Our VAE consists of convolutional layers (4×4 kernels and a ReLU activation function), that are expected to efficiently extract features from images. The general architecture of VAEs we work with in this work is detailed in Fig. 11. As the architecture of a VAE can rely on non-linear transformations, it is more likely to extract complex features from the data than PCA and thus provides a non-linear low dimensional representation of the data.

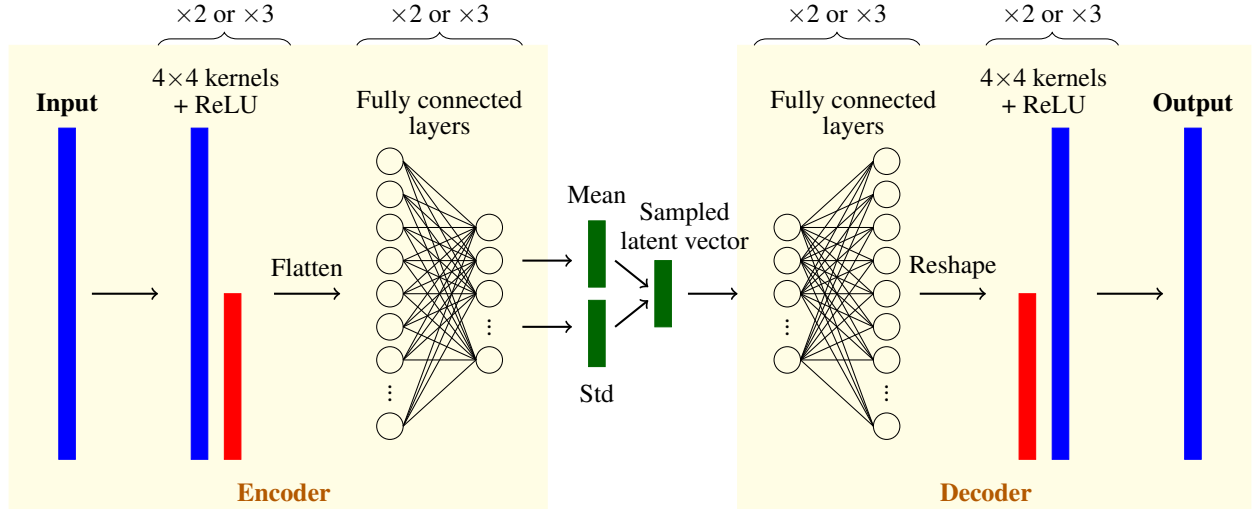


Figure 12: Overall architecture of Variational Autoencoders used as generative models in this work, either trained with analytical profile images or COSMOS images.

Once the network is well trained to reproduce each input data, the encoder part is no longer used and the proper generative model is the probabilistic decoder. As in Sect. 3.1, if possible, a GP is trained to interpolate a set physical parameters (related to training images) to the latent space established by the training of a VAE. New galaxy images are then emulated from physical parameters to a latent variable by GP interpolation and from a latent variable to a realistic image by VAE-decoding.

We apply the above pipeline to a training set composed of 512 analytical profiles generated in Sect. 2.1.1 and we create a 64 images testing set from physical parameters sampled with a latin hypercube scheme. We set the dimension of the latent space to 20, a trade-off between the number of components used in Sect. 3.1 and the need of a low-dimensional latent space. The VAE training converges very fast after about a hundred epochs. Before any GP training, Fig. 13 illustrates a dependency between physical parameters and latent variables through a point-wise dependency plot of the first two dimensions of the latent space, where a color related to the galaxy has been assigned to each point. The first colorbar matches galaxies from the testing set and the second one galaxies from the training set.

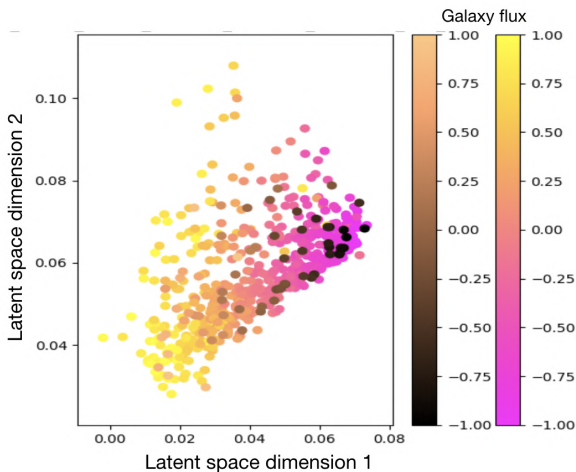


Figure 13: Point-wise dependency scatter plot for the first 2 dimensions of the latent vector \mathbf{z} calculated on the analytical profiles dataset presented in Sect. 2.1.1. A color (copper colorscale for testing set images and yellow colorscale for training set images) is assigned to each point according to the flux of the related simulated galaxy.

As mentioned earlier in Fig. 7, a clear dependency is observed between fluxes of galaxies and the first two dimensions of the low-dimensional representation of the data established by VAE training. Such dependency is similarly noticed for other physical parameters associated to our dataset. After GP training, we visually control Fig. 14 that our emulator, composed of GP interpolation and VAE decoding, is able to reproduce, from the same physical parameters, similar profiles (2nd row) than GalSim simulation (1st row). Almost no difference can be detected between simulations and emulations, even for very sheared galaxies (5th and 7th images) that are badly reconstructed with PCA and GP emulation. The major visual issue of emulating analytical profiles with PCA and GP is here solved by replacing the generative model by a VAE. Further validation tests are performed in Sect. 4.

Next, a similar VAE is trained on reproducing a subset of COSMOS postage stamps introduced in Sect. 2.1.2. The training is first performed on ~ 20000 COSMOS-type images dataset to reduce computational time but still assess our emulator performances on a reasonably trained model. A training on the whole dataset will be performed later. As COSMOS images are more complex images than analytical profiles, we suppose there are more features to extract from this dataset and we set the latent space dimension to 32. VAE training converges after ~ 4000 epochs. Before connecting the interpolator, we assess

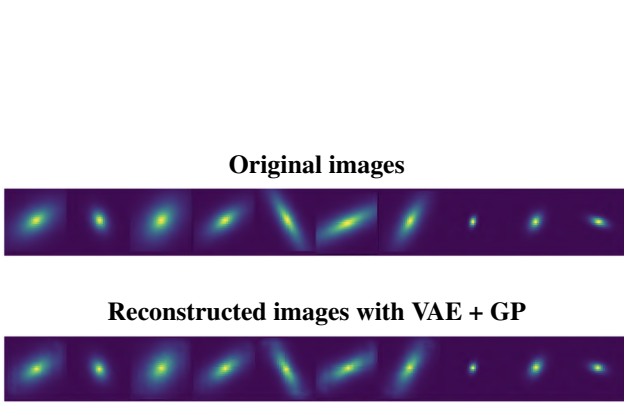


Figure 14: Visualisation of VAE-GP emulation of analytical profile images. Top row: Original images to be reconstructed. Bottom row: Emulated images with VAE-GP.

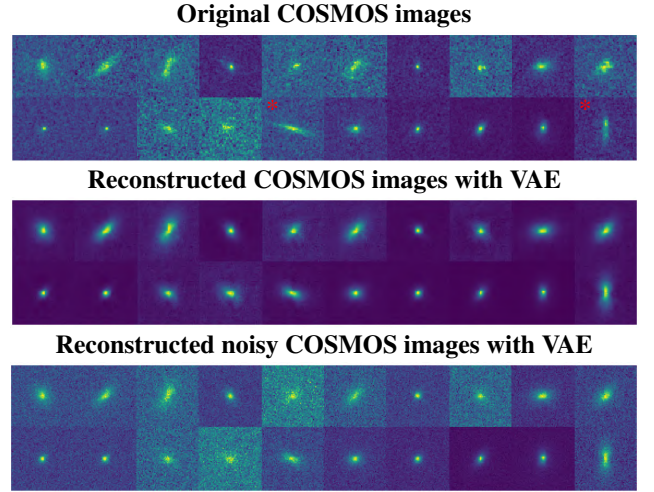


Figure 15: Visualisation of VAE generation of COSMOS images. Top row: Original COSMOS images to be reconstructed. Middle row: Reconstructed COSMOS images with VAE trained on COSMOS images. Bottom row: Reconstructed COSMOS images with VAE and Gaussian noise added.

the viability of the VAE in reproducing galaxies as shown in Fig. 15. The first row shows the original COSMOS images, the second row the reconstructed images with VAE and last row images are noisy versions of second row images. Third row galaxies should be visually close to original COSMOS images. Given the higher complexity of these COSMOS-type galaxy images generating problem than analytical profiles generation, we cannot expect as good results as those shown Fig. 14 mainly due to noise corruption and large heterogeneity of profiles in COSMOS images. Galaxies seem to be well reproduced by the encoding and decoding process, except for very flat galaxies (flagged galaxies in Fig. 15), that are reconstructed shrunk but thicker. This may be because of under-representation of very flat galaxies in the dataset. This problem is not solved yet but improvements to deal with under-representation are proposed Sect. 5. Then, we try to visualize some dependency between physical parameters and latent variables of training and testing sets Fig. 16.a), through point-wise dependency plots of 2 dimensions of the latent space where each point in gray-scale is related to a galaxy image in the training set and each point in orange-scale to a galaxy image in the testing set. Each point varies in gray or orange level according to the half-light radius of the matching galaxy. In this plot in particular and in the majority of point-wise dependency plots, dependency between physical parameters and latent variable is difficult to observe. Therefore, we use UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection), a non-linear dimensionality reduction method for visualization based on geometry and topology. In this case, the idea is to project the dimension of the latent space to a 2-dimension space to visualize this projection and the projected value of latent variables. This can be a better visual indicator of the dependency between latent variables and physical parameters than point-wise dependency plots, that doesn't take into account every dimension of the latent space. Fig. 16.b) shows the UMAP plot of the latent space related to the VAE trained with COSMOS images, with colors corresponding to galaxy half-light radius. A dependency is indeed clearly noticed in this plot, especially for high half-light radius (*hlr*) galaxies. However, the difference between very low and low *hlr* galaxies, in the bottom-right part of the plot, is hardly distinguishable. As a matter of fact, no GP we trained was able to effectively interpolate from physical parameters to this latent space. The reason could be that the conditional distribution of latent variables given physical parameters is not as simple as a Gaussian and a more complex interpolator or conditional density estimator is needed here.

3.3 Emulation with VAE and MAF

This section explores the option of considering a density estimator neural network instead of a Gaussian Process interpolator to map from physical parameters to latent variables of the VAE trained on COSMOS images previously. Masked Autoregressive Flows (MAFs) provide an estimation of a joint density $p(\mathbf{x})$ of a set of variables \mathbf{x} based on a joint interpretation of autoregressive models, a neural-network like function that is invertible, and normalizing flows, that map the distribution to a normal distribution from which we can easily sample. This joint density $p(\mathbf{x})$ can be decomposed into a product of 1-dimensional conditionals, parametrized in autoregressive models as Gaussian such that :

$$p(\mathbf{x}) = \prod_i p(x_i | x_{1:i-1}), \text{ where } p(x_i | x_{1:i-1}) = \mathcal{N}(x_i | \mu_i, (\exp \alpha_i)^2)$$

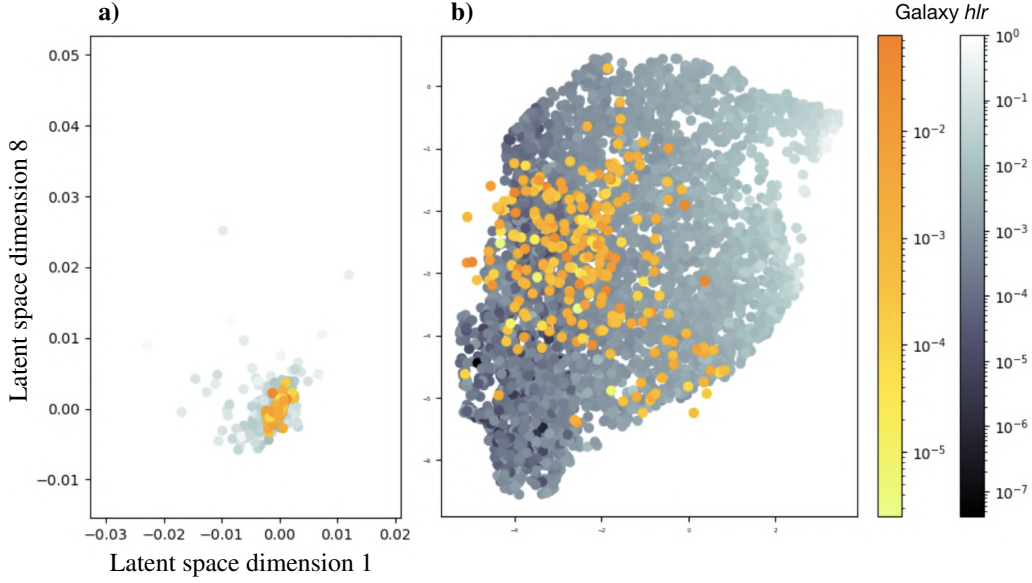


Figure 16: **a)** Point-wise dependency scatter plot for 2 dimensions of the latent vector \mathbf{z} calculated on the COSMOS-type dataset presented in Sect. 2.1.2. A color (orange colorscale for testing set images and gray colorscale for training set) is assigned to each point according to the half-light radius of the related galaxy. **b)** Uniform Manifold Approximation and Projection plot of latent variables over training and testing sets. Colorbars stand for both plots.

$$\text{with } \begin{aligned} \mu_i &= f_{\mu_i}(x_{1:i-1}) \\ \alpha_i &= f_{\alpha_i}(x_{1:i-1}). \end{aligned}$$

This allows to write this data generation equation :

$$x_i = f(u_i), \text{ with } \mathbf{u}_i \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}) \text{ and } f(u_i) = u_i \exp \alpha_i + \mu_i.$$

f is here easily invertible such that :

$$u_i = f^{-1}(x_i) \text{ where } f^{-1}(x_i) = (x_i - \mu_i) \exp -\alpha_i.$$

Thus, the determinant of the Jacobian of f^{-1} is easily computable : $\left| \det \frac{\partial f^{-1}}{\partial \mathbf{x}} \right| = \exp - \sum_i \alpha_i$, which allows this autoregressive model to be seen as a normalizing flow where $p(\mathbf{x}) = \pi(f^{-1}(\mathbf{x})) \left| \det \frac{\partial f^{-1}}{\partial \mathbf{x}} \right|$ where $\pi(\cdot) \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I})$. The function f can be interpreted as an invertible and differentiable transformation of a standard normal density into the target density. This flow is implemented by stacking several Masked Autoencoders for Density Estimation (MADEs). MADE is an adaptation of Autoencoders to make them estimate a tractable distribution in a single pass through the network as shown in Fig. 17.

An alternative of MAFs used in this work is conditional MAFs which task is to estimate the conditional joint density $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \prod_i p(x_i|x_{1:i-1}, \mathbf{y})$ given a set of pairs (\mathbf{x}, \mathbf{y}) . This is done by extending the set of input variables with \mathbf{y} and only modeling conditional densities. \mathbf{y} is then an additional input in each MADE layer of this conditional MAF and $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \pi(f^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \left| \det \frac{\partial f^{-1}}{\partial \mathbf{x}} \right|$. In our physical parameters \mathbf{p} to latent variables \mathbf{z} mapping problem, the idea is to sample a new latent variable \mathbf{z} from the estimated distribution $p(\mathbf{z}|\mathbf{p})$ using a conditional MAF as described above taking \mathbf{x} as a latent variable \mathbf{z} and \mathbf{y} as physical parameters \mathbf{p} . So far, unfortunately, this conditional density estimation with MAFs does not give acceptable results and this work is still in progress. Considering this generation problem and dependencies observed in the previous section between physical

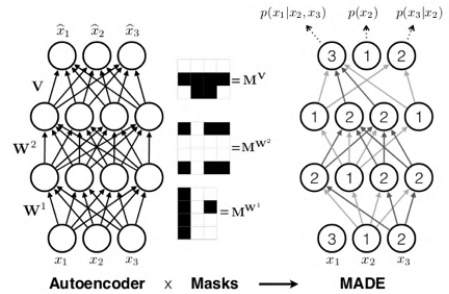


Figure 17: Masked Autoencoder for Density Estimation : illustration. The final density is calculated as follows: $p(\mathbf{x}) = p(x_2)p(x_3|x_2)p(x_1|x_2, x_3)$

parameters and latent variables, well designed and trained MAFs should, eventually, be able to estimate a relevant conditional distribution of latent variables given physical parameters.

4 Validation schemes

This section develops validation schemes we perform on emulation methods introduced previously to analyze and compare their performance. We first evaluate these methods with first order validation tests, which essentially are pixel-to-pixel comparisons. Then, we assess performances on higher order metrics, designed to confirm that emulators are truly generating realistic galaxy images that can be used in survey analysis. Validation tests are applied, in this section, to the emulators PCA and GP, and VAE and GP trained on analytical profiles. Given visual performances of emulators trained on COSMOS images and the difficulty of mapping physical parameters to latent variables we are currently confronting, we only discuss performances of the VAE model trained on COSMOS images. Nevertheless, each validation pipeline shall apply on every emulator which generate realistic galaxy images.

4.1 First order validation

We first evaluate emulators performances on their ability to generate images for which pixel values are close to simulated or real COSMOS images. To do so, we first plot the histogram distribution of true and predicted pixel intensities. Ideally, these two distributions are equal. We also plot predicted pixel intensities versus true pixel intensities, showing good one-to-one correlation. Figs. 18 and 19 show these plots respectively for PCA-GP and VAE-GP emulation, both trained on the analytical profiles dataset described in Sect. 2.1.1. According to these plots, the distribution of PCA-GP reconstructed pixel intensities is closer to the true distribution than the distribution of VAE-GP reconstructed pixel intensities. Similarly, the scatter plot of predicted versus true pixel intensity related to PCA-GP emulation is closer to identity than VAE-GP emulation scatter plot. This result is expected given the relatively small size of the training set (512 images). We experienced, in this work, that VAE-GP emulator performance on this dataset increases with training set size, outperforming very fast PCA-GP emulator performance. Fig. 22 shows both plots for VAE image generation, trained on ~ 20000 COSMOS-type images, described in Sect. 2.1.2. Predicted pixel intensity plotted here is non-noisy generated images pixel intensities. Therefore, predicted pixel intensity distribution and predicted versus true pixel intensity scatter plot are not expected to be as close as, respectively, true pixel intensity distribution and identity. In particular, the scatter plot is expected to be spread around identity with a deviation corresponding to the standard deviation of the noise in training images, without any bias. Fig. 22 shows that distributions of predicted and true pixel intensities are very close to each other and that the scatter plot of predicted versus true pixel intensity is spread around identity with a small bias for very small intensities, which might be due to bad reconstruction of low-flux flat galaxies.

Then, we assess emulators performance with first order metrics. These first order metrics are pixel-wise quantitative assessments that measure a reconstruction error based on differences between true and reconstructed pixel values. Let us denote by \mathbf{x} original images to be reconstructed and \mathbf{x}' emulated images, both composed of n pixels, where \mathbf{x}_i stands for the i^{th} pixel of the image \mathbf{x} . We define the Mean Square Error (MSE) as :

$$\text{MSE}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'_i)^2$$

Ideally, the difference between each pixel $\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'_i$ is null such that the lower MSE the better. Thus, the distribution of Mean Square Errors among a set of images is, optimally, a Dirac distribution. Figs. 20 and 21 show MSE distributions, respectively over training and testing sets of analytical profiles, for both PCA-based and VAE-based emulators. For a 512 images training set and a 64 images testing set of analytical profiles, MSE distribution of the PCA-based emulator is closer to a Dirac distribution than the VAE-based emulator. This means that, for these datasets, PCA-GP emulator is more able to reconstruct, pixel-wisely, analytical profile images, than VAE-GP emulator. Again, as experienced, VAE-GP emulator median MSE values on this dataset decreases with training set size and outperforms PCA-GP median MSE emulator performance. Fig. 23 shows the MSE distribution related to COSMOS images reconstruction with VAE. This distribution is very close to a Dirac distribution and minimum, maximum and median MSE value, respectively equal to $8.5\text{e-}9$, $1.2\text{e-}6$, $1.3\text{e-}8$, are very low, with, though, a few outlier values. It highlights the very good ability of VAE to reproduce COSMOS-type images.

These first validation tests are designed to provide first-order assessments on emulators described in Sect. 3. These tests and metrics only allow to verify a pixel-wise reconstruction quality. The next section extends validation tests to second and higher metrics that are more likely to confirm that emulators are able to generate physically realistic galaxy images.

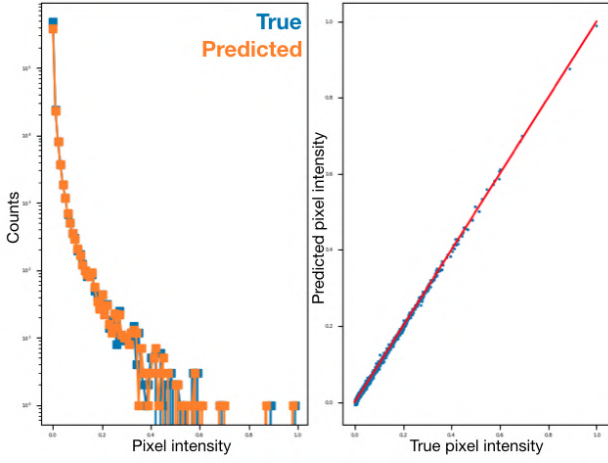


Figure 18: Left-hand plot: histogram distribution of true and predicted pixel intensities for PCA-GP emulated analytical profiles generated in Sect 2.1.1. Ideally, these two distributions are equal. Right-hand plot : predicted versus true pixel intensity scatter plot. It should fit or be similar to identity.

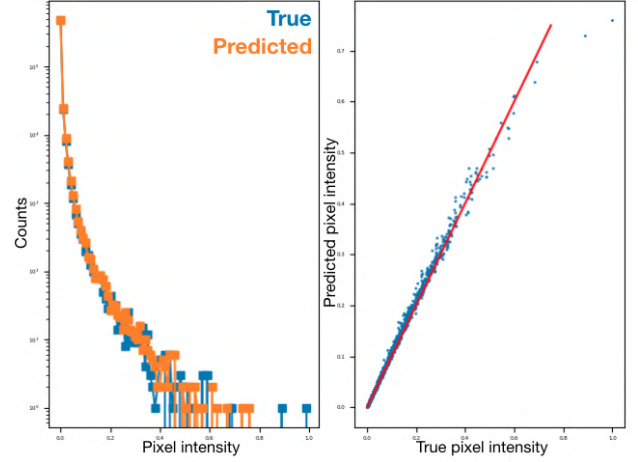


Figure 19: Left-hand plot: histogram distribution of true and predicted pixel intensities for VAE-GP emulated analytical profiles generated in Sect 2.1.1. Right-hand plot : predicted versus true pixel intensity scatter plot.

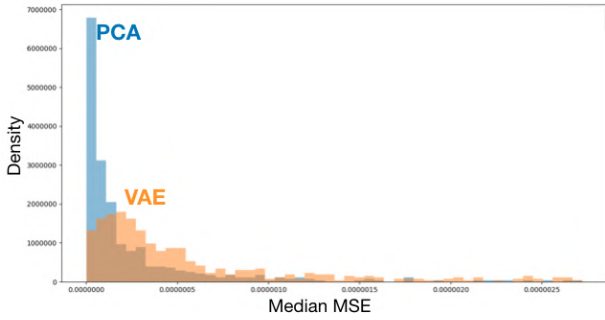


Figure 20: Mean Square Error distribution over the training set composed of 512 analytical profiles. The blue histogram is related to PCA-GP emulation and the orange histogram is related to VAE-GP emulation.

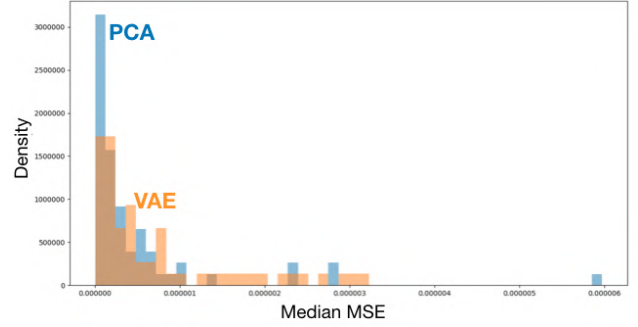


Figure 21: Mean Square Error distribution over the testing set composed of 64 analytical profiles. The blue histogram is related to PCA-GP emulation and the orange histogram is related to VAE-GP emulation.

4.2 Shear measurements, higher order metrics

To validate emulators performances with higher order metrics, we use the shape measurement module of GalSim. This module contains functions for second order moments evaluation of images following Hirata et al. method [12]. These functions find the best elliptical Gaussian that match every input image. These moments are represented as a shear distortion in GalSim and shear parameters estimates of the observed galaxy are returned. The idea here is to estimate shear parameters of emulated images and confirm that they are matching shear parameters of original images. This validation test, of higher order, allows to verify that our emulators are able to generate realistic galaxies for physical parameters recovering, beyond visual confirmation and pixel-to-pixel comparison. Fig. 24 top row shows true (in blue) and predicted (in orange) distributions of shear parameters g_1 and g_2 . Ideally, these distribution are equal. Fig. 24 bottom row shows predicted shear parameters versus true shear parameters. This scatter plot should match the identity line. The two first left-hand columns plots stand for the PCA-GP emulator and the two last right-hand columns stand for VAE-GP emulator. Both emulators has been trained on the analytical profiles dataset. PCA-GP emulator seems to generate realistic low-shear galaxies, but, as visually observed in Sect. 3.1, high-shear galaxies are reconstructed with a lower shear than expected. Indeed, a bias is clearly noticed in bottom row scatter plot. This bias does not exist for VAE-GP emulation, for which true and predicted shear parameters distributions are very close and scatter plot of predicted versus true shear parameters matches almost perfectly identity. Despite first-order validation tests outperformed by PCA-GP emulation, VAE-GP seems to be able to generate more physically realistic galaxies, with no bias in shear parameters recovering. Fig. 25

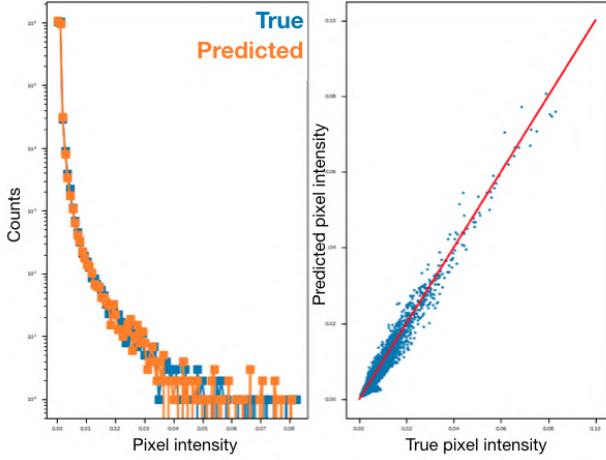


Figure 22: Left-hand plot: histogram distribution of true and predicted pixel intensities for VAE generated COSMOS profiles generated in Sect 2.1.2. Right-hand plot : predicted versus true pixel intensity scatter plot.

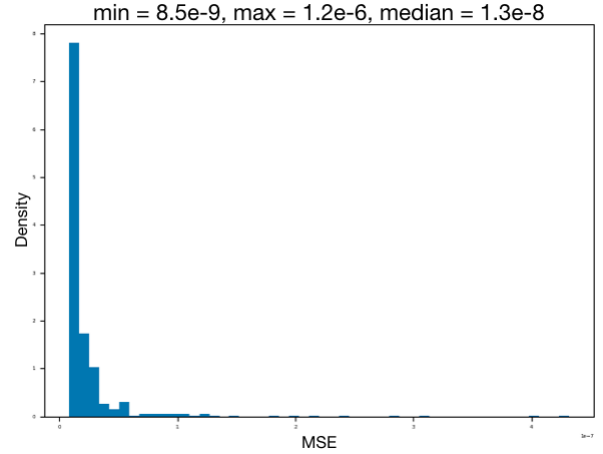


Figure 23: Mean Square Error distribution over the training set composed of analytical profiles. The blue histogram is related to PCA-GP emulation and the orange histogram is related to VAE-GP emulation.

| Emulator | Analytical profiles | | Generative model | COSMOS-type |
|----------|---------------------|------------|------------------|-------------|
| | Small size | Large size | | |
| PCA-GP | ++ | ++ | PCA | + |
| VAE-GP | + / ++ | +++ | VAE | ++ |

Table 1: Global performance qualitative assessments for every emulator validated in this section and trained on analytical profile images (left-hand table) and COSMOS images (right-hand images).

shows shows true (in blue) and predicted (in orange) distributions of shear parameters g_1 and g_2 (top row) and predicted shear parameters versus true shear parameters scatter plot (bottom row). Shear estimation has been done for images generated with a VAE trained on the COSMOS-type dataset. The two first left-hand columns plots stand training set images shear estimation and the two last right-hand columns stand for testing set images shear estimation. Again, the first two left-hand columns show that VAE is a very good model to generate realistic COSMOS-type images. Indeed, true and predicted shear parameters distributions are very close and scatter plot of predicted versus true shear parameters spreads around identity. However, results for testing set images (right-hand columns) are not as good as for training set images. This highlights an over-training problem. This problem makes the VAE generative model very good at reproducing training set images but not as good as reproducing image that have never been seen by the network in the training process. This situation should be solved with a bigger training set size, or a shorter training.

We also propose to compare emulated images given physical parameters with real or simulated datasets such as the Illustris/TNG simulation [13] or the Sloan Digital Sky Survey (SDSS) [14] through several indicators of dispersion between distributions of recovered parameters. An extension of shear measurement validation test could be more generally proving that the emulator is able to generate physically realistic images compared to other simulated or real datasets. Given a number of physical parameters, galaxy images are emulated. Then, these images are convolved with a specific PSF and are corrupted with a specific noise model, depending on the dataset we want our emulator to be compared with. As example, if we want to compare our dataset with images taken by the Hubble Space Telescope, we will convolve output images from our emulator with an HST PSF and add Poisson and specific HST noise. This process would generate realistic galaxy images as long as the PSF applied in post-processing is (non-strictly) larger than the PSF applied to images of the training set. Finally, we compare the distribution of some physical parameters recovered with extraction algorithms as well as Gini-m20 indexes [15] calculated for the emulated dataset and the simulated (TNG) or real dataset. This validation test will be performed as soon as a VAE-MAF emulator is working great and is validated with first and second order tests with a COSMOS-type training set.

Table 1 shows a global performance qualitative assessment for all emulators and training sets introduced in this work. Every validation scheme is expected to be performed on a well-trained VAE-MAF emulator and its performance are likely to outperform current COSMOS-type generation and emulate realistic galaxies for other simulated or real datasets.

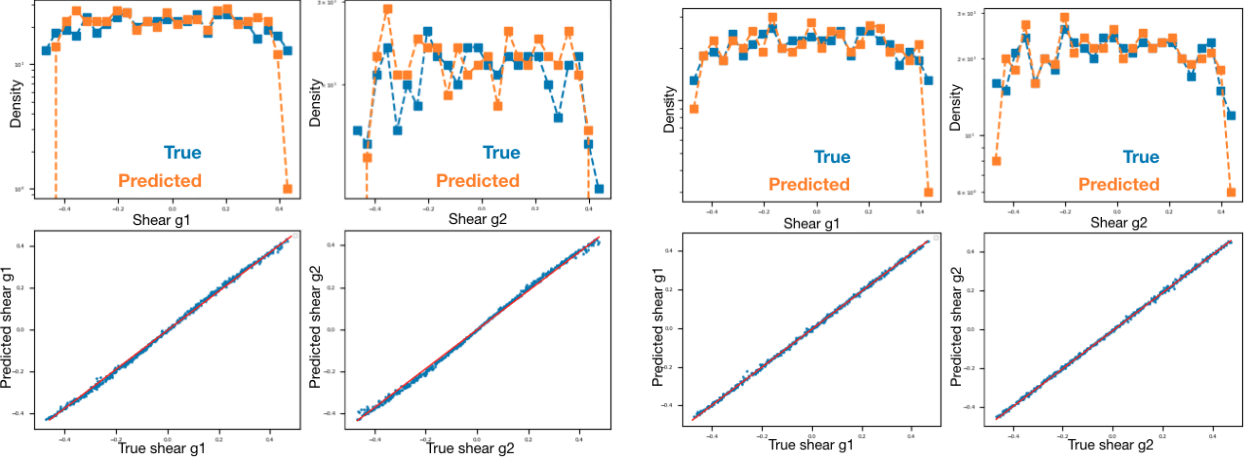


Figure 24: Top row: true (in blue) and predicted (in orange) distributions of shear parameters g_1 and g_2 (top row). Bottom row: predicted shear parameters versus true shear parameters scatter plot. Left-hand columns: shear estimation for PCA-GP emulated analytical profile images. Right-hand column: shear estimation for VAE-GP emulation of analytical profile images.

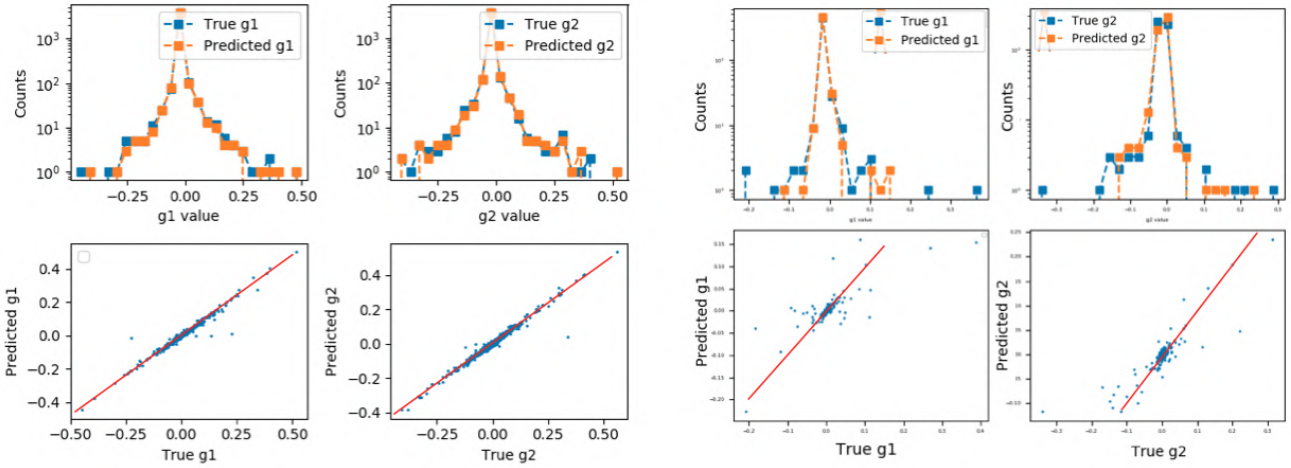


Figure 25: Top row: true (in blue) and predicted (in orange) distributions of shear parameters g_1 and g_2 (top row). Bottom row: predicted shear parameters versus true shear parameters scatter plot. Left-hand columns: shear estimation over the training set for VAE emulated analytical profile images. Right-hand column: shear estimation over the testing set for VAE emulation of analytical profile images.

5 Future work and conclusion

5.1 Perspectives

In the near future, efforts will be made on three main perspectives. VAE performances on generating realistic COSMOS images still need to be improved. Better performances of this VAE on testing set images could be achieved in carefully train the network to avoid over-fitting. Then, general performances could benefit from data augmentation. Indeed, we highlighted in Sect. 2.1.2 that the distribution of physical parameters on the COSMOS-type dataset is not uniform and this leads to bad generation of outliers that are under-represented in this dataset.

Once a better generator is trained as generating realistic images, we will train a conditioning process to interpolate from physical parameters to latent variable to be decoded using MAFs. As dependency between physical parameters and latent space has been shown in Sect. 3.2, we should be able to perform this conditioning, modifying MAF hyper-parameters.

Then, we will actually perform meticulous assessments with Illustris/TNG simulations to prove that the VAE-MAF emulator is able to generate physically realistic images compared with this simulated data. The general idea is to compare the distribution of some physical parameters, recovered with extraction algorithms, calculated for the emulated dataset and the simulated (TNG) or real dataset.

5.2 About other generative models and data

Another perspective in the near future could be training other generative models to figure out which one is the best for this kind of emulation and study whether or not any mapping from physical parameters is possible. An ensemble of generative models could be tested here : Vector Quantized VAE (VQ-VAE[16]), Generative Adversarial Networks (GAN[2]) or Pixel Convolutional Neural Networks (Pixel-CNN[17]).

VQ-VAEs[16] is a generative model for large scale image generation. It is composed of an encoder and a decoder, as a classic VAE. But the encoded variable is quantized based on its distance to prototype vectors in a codebook. The latent variable is then replaced by the index of the nearest prototype vector in the codebook. The decoder is trained to map the original image from this nearest prototype vector. The main advantages of such architecture is the fast training due to quantization and the broader diversity of trained images. GANs[2] are also generative models designed for large scale image generation but is build with two neural networks competing with each other. The first network is a generator neural network creating images by mapping random noise into an image, and the second network is a discriminator, which classifies input images as real or fake. The generator is trained at fooling the discriminator and the discriminator is trained at recognizing generated images. Larger scale GANs can generate high-quality and high-resolution images but are known to be challenging to train and evaluate. PixelCNNs[17] models the joint distribution of pixels of an image as a product of conditional distributions of a pixel given every previous pixel. Every conditional distribution is modelled by a convolutional neural network. The conditioning given every previous pixel is modelled as a mask for convolutional layers. Therefore, PixelCNN model is several masked convolutional layers stacked. Pixel are predicted sequentially, which means that each time a pixel is predicted, it is fed back into the neural network to predict the next pixel. The major drawback of PixelCNNs is their performance generating realistic images.

As emulating can be done for many applications and many kind of datasets, we would like to perform emulation on diverse astronomical datasets, for which simulations are very expensive. In the future, we will design a generative model for 3-D magneto-hydrodynamical (MHD) structures in the Interstellar Medium, 2-D radiative transfer images, and 1-D emission spectra of star-formation regions.

5.3 Conclusions

In this work, we proposed an ensemble of generative models trained at interpolating physical parameters onto galaxy images. The project involved creating two different training sets respectively composed of simulated profiles and real COSMOS-type images. Then, we designed three emulators, made of a generator that emulate images from a latent variable and an interpolator or conditioning process that map from physical parameters into a latent variable. The first emulator is composed of a linear generative model, Principal Components Analysis and a Gaussian Process interpolator, expected to be powerful for simple analytical profiles emulation but outperformed very fast by deep generative models. The second emulator is composed of a deep generative model, a Variational Autoencoder (VAE), and a Gaussian Process interpolator. As interpolation with Gaussian Processes can fail when this interpolation from physical parameters to a latent variable is not Gaussian, we proposed to use a deep conditional density estimator, Masked Autoregressive Flow (MAF). This third emulator made of VAE as a generative model and MAF as a conditioning process is not functional yet but expected to be in the very near future.

With several assessment pipelines, from first order to higher order, we demonstrated on analytical profiles the capability of deep neural networks to emulate physically realistic images compared to linear models as PCA. We then showed that VAE is also able to reproduce realistic COSMOS-type images. An effort in the near future will be put at conditioning this generative model given physical parameters and prove its ability to generate realistic images compared with other real or simulated datasets as Illustris/TNG.

Several generative models, as VQ-VAEs, GANs or PixelCNNs, will also be trained and assessed at emulating realistic images as detailed in Sect. 5.2. Then, we will experiment emulation on other astronomical surveys, such as MHD simulations or radiative transfer images.

Acknowledgements

This report describes the work conducted during the Kavli Summer Program in Astrophysics, hosted in University of California Santa Cruz in 2019. We would like to thank the Kalvi Foundation and all the organisers involved in this summer school for their generous support.

References

- [1] D. P. Kingma and M. Welling, “Auto-Encoding Variational Bayes,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1312.6114, Dec 2013.
- [2] I. J. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. Courville, and Y. Bengio, “Generative Adversarial Networks,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1406.2661, Jun 2014.
- [3] P. Capak, H. Aussel, M. Ajiki, H. J. McCracken, B. Mobasher, and N. e. a. Scoville, “The First Release COSMOS Optical and Near-IR Data and Catalog,” , vol. 172, no. 1, pp. 99–116, Sep 2007.
- [4] A. Leauthaud, R. Massey, J.-P. Kneib, J. Rhodes, D. E. Johnston, P. Capak, C. Heymans, R. S. Ellis, A. M. Koekemoer, O. Le Fèvre, Y. Mellier, A. Réfrégier, A. C. Robin, N. Scoville, L. Tasca, J. E. Taylor, and L. Van Waerbeke, “Weak Gravitational Lensing with COSMOS: Galaxy Selection and Shape Measurements,” , vol. 172, no. 1, pp. 219–238, Sep 2007.
- [5] G. Papamakarios, T. Pavlakou, and I. Murray, “Masked Autoregressive Flow for Density Estimation,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1705.07057, May 2017.
- [6] “Monte Carlo Sampling Methods using Markov Chains and their Applications,” *Biometrika*, vol. 57, no. 1, pp. 97–109, Apr 1970.
- [7] K. Heitmann, M. White, C. Wagner, S. Habib, and D. Higdon, “The Coyote Universe. I. Precision Determination of the Nonlinear Matter Power Spectrum,” , vol. 715, no. 1, pp. 104–121, May 2010.
- [8] M. Mustafa, D. Bard, W. Bhimji, Z. Lukić, R. Al-Rfou, and J. M. Kratochvil, “CosmoGAN: creating high-fidelity weak lensing convergence maps using Generative Adversarial Networks,” *Computational Astrophysics and Cosmology*, vol. 6, no. 1, p. 1, May 2019.
- [9] J. Caldeira, W. L. K. Wu, B. Nord, C. Avestruz, S. Trivedi, and K. T. Story, “DeepCMB: Lensing reconstruction of the cosmic microwave background with deep neural networks,” *Astronomy and Computing*, vol. 28, p. 100307, Jul 2019.
- [10] B. T. P. Rowe, M. Jarvis, R. Mandelbaum, G. M. Bernstein, J. Bosch, M. Simet, J. E. Meyers, T. Kacprzak, R. Nakajima, J. Zuntz, H. Miyatake, J. P. Dietrich, R. Armstrong, P. Melchior, and M. S. S. Gill, “GALSIM: The modular galaxy image simulation toolkit,” *Astronomy and Computing*, vol. 10, pp. 121–150, Apr 2015.
- [11] M. McKay, R. Beckman, and W. Conover, “Comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code,” *Technometrics*, vol. 21, pp. 266–294, 01 2000.
- [12] C. Hirata and U. Seljak, “Shear calibration biases in weak-lensing surveys,” , vol. 343, no. 2, pp. 459–480, Aug 2003.
- [13] D. Nelson, A. Pillepich, V. Springel, R. Pakmor, R. Weinberger, S. Genel, P. Torrey, M. Vogelsberger, F. Marinacci, and L. Hernquist, “First Results from the TNG50 Simulation: Galactic outflows driven by supernovae and black hole feedback,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1902.05554, Feb 2019.
- [14] K. Abazajian, J. K. Adelman-McCarthy, M. A. Agüeros, S. S. Allam, S. F. Anderson, and J. e. a. Annis, “The First Data Release of the Sloan Digital Sky Survey,” , vol. 126, no. 4, pp. 2081–2086, Oct 2003.
- [15] J. M. Lotz, J. Primack, and P. Madau, “A New Nonparametric Approach to Galaxy Morphological Classification,” , vol. 128, no. 1, pp. 163–182, Jul 2004.

- [16] A. Razavi, A. van den Oord, and O. Vinyals, “Generating Diverse High-Fidelity Images with VQ-VAE-2,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1906.00446, Jun 2019.
- [17] A. van den Oord, N. Kalchbrenner, O. Vinyals, L. Espeholt, A. Graves, and K. Kavukcuoglu, “Conditional Image Generation with PixelCNN Decoders,” *arXiv e-prints*, p. arXiv:1606.05328, Jun 2016.

A Latin hypercube sampling scheme

Latin hypercube sampling scheme is a statistical sampling method used to generate a near-random sample of values from a multi-dimensional distribution. The idea is to sample a function of N parameters dividing the range of each parameter into M equally probable subdivisions separated by hyperplanes. A hypercube is then a latin hypercube if and only if there is only one sample in each subdivision. In $N = 2$ dimensions, a sampled grid is a latin square if and only if there is only one sample in each row and each column, as shown in Fig.26.a). The distribution is here a multivariate uniform distribution and thus, the $M = 5$ subdivisions are regularly distributed along each axis. Compared to a random space-filling scheme Fig 26.b), which does not take into account the previous sampled points in a new sampled point generation, latin hypercube sampling ensures an optimal representation of the variability of parameters, given a number of samples. Given a number a of subdivisions, latin hypercube sampling ensures an optimal number of samples compared to an uniform space-filling scheme. Indeed, as highlighted in Fig.26.c), the number of samples is equal to N^M in an uniform space-filling scheme versus M in latin hypercube sampling. Considering the significant cost of many data generation algorithms, this sampling method is particularly useful to generate a representative dataset at low cost.

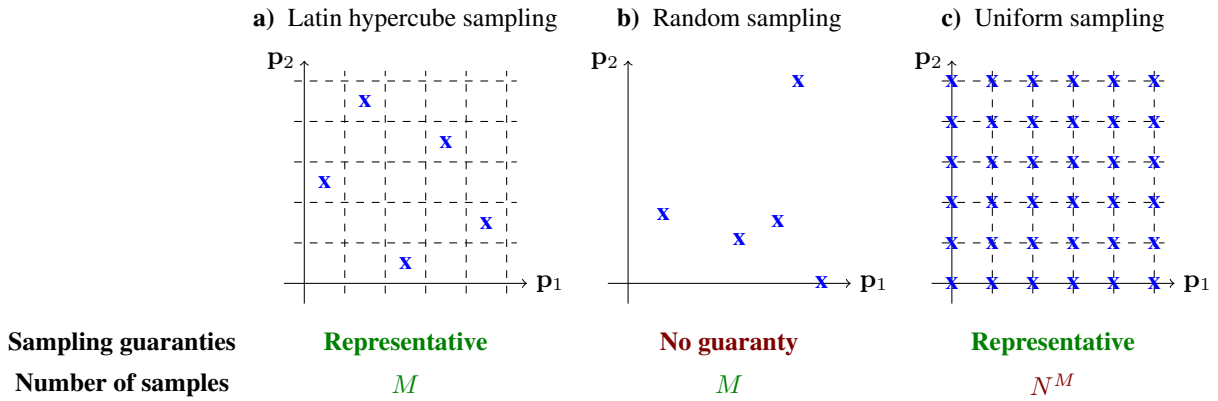


Figure 26: a) Latin hypercube, b) random, and c) uniform sampling in $N = 2$ dimensions with $M = 5$ subdivisions for parameters p_1 and p_2 .

B Gaussian Processes

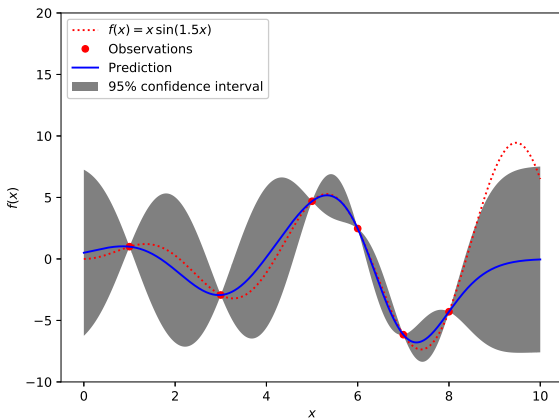


Figure 27: Gaussian Processes illustration in 1 dimension.

on the width of the 95% confidence interval and the smoothness of realization functions, depending on the prior knowledge available on the function to approximate. The main drawback of Gaussian Processes is their computational cost. Indeed, As a GP is a non-parametric method, the computational cost of its training can be very expensive and grows cubically with the training

set size and dimension. The dimensionality reduction performed by any generative model described in this work is thus a key process to reduce computational costs and training times.

Bibliographie

- Abi-rizk, R., F. Orieux et A. Abergel (2020). "Non-Stationary Hyperspectral Forward Model and High-Resolution". In *2020 IEEE International Conference on Image Processing (ICIP)*, 2975-2979. <https://doi.org/10.1109/ICIP40778.2020.9190681>. (Cité à la page 59).
- Adams, F. C., D. Hollenbach, G. Laughlin et U. Gorti (2004). "Photoevaporation of circumstellar disks due to external far-ultraviolet radiation in stellar aggregates". *The Astrophysical Journal* 611 (1) : 360. <https://doi.org/10.1086/421989>. (Cité à la page 61).
- Afonso, M. V., J. M. Bioucas-Dias et M. A. T. Figueiredo (2010). "Fast Image Recovery Using Variable Splitting and Constrained Optimization". *IEEE Trans. Image Process.* 19, n° 9 (septembre) : 2345-2356. <https://doi.org/10.1109/TIP.2010.2047910>. (Cité à la page 49).
- Afonso, M. V., J. M. Bioucas-Dias et M. A. T. Figueiredo (2011). "An Augmented Lagrangian Approach to the Constrained Optimization Formulation of Imaging Inverse Problems". *IEEE Transactions on Image Processing* 20 (3) : 681-695. <https://doi.org/10.1109/TIP.2010.2076294>. (Cité à la page 50).
- Aiazzi, B., L. Alparone, S. Baronti, A. Garzelli et M. Selva (2006). "MTF-tailored Multiscale Fusion of High-resolution MS and Pan Imagery". *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing* 72 : 591-596. (Cité à la page 43).
- Aiazzi, B., L. Alparone, S. Baronti, A. Garzelli, M. Selva et C. Chen (2011). "25 years of pansharpening : a critical review and new developments". *Signal and Image Processing for Remote Sensing*, 533-548. (Cité à la page 41).
- Akhtar, N., F. Shafait et A. Mian (2014). "Sparse spatio-spectral representation for hyperspectral image super-resolution". In *European Conf. Computer Vision (ECCV)*, 63-78. Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-319-10584-0_5. (Cité à la page 87).
- Allys, E., F. Levrier, S. Zhang, C. Colling, B. Regalado-Saint Blancard, F. Boulanger, P. Hennebelle et S. Mallat (2019). "The RWST, a comprehensive statistical description of the non-Gaussian structures in the ISM". *Astronomy & Astrophysics* 629 (septembre) : A115. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201834975>. (Cité à la page 113, 119).
- Amro, I., J. Mateos, M. Vega, R. Molina et A. K. Katsaggelos (2011). "A survey of classical methods and new trends in pansharpening of multispectral images". *EURASIP J. Adv. Signal Process.* 2011 (1) : 1-22. <https://doi.org/10.1186/1687-6180-2011-79>. (Cité à la page 57).
- Anzengruber, S. W., et R. Ramlau (2009). "Morozov's discrepancy principle for Tikhonov-type functionals with nonlinear operators". *Inverse Problems* 26, n° 2 (décembre) : 025001. <https://doi.org/10.1088/0266-5611/26/2/025001>. (Cité à la page 103).
- Aronstein, D. L., J. S. Smith, T. P. Zielinski, R. Telfer, S. C. Tournois, D. B. Moore et J. R. Fienup (2016). "Wavefront-error performance characterization for the James Webb Space Telescope (JWST) Integrated Science Instrument Module (ISIM) science instruments". In *Space Telescopes and Instrumentation 2016 : Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, sous la direction de H. A. MacEwen, G. G. Fazio, M. Lystrup, N. Batalha, N. Siegler et E. C. Tong, 9904 : 990409. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Juillet. <https://doi.org/10.1117/12.2233842>. (Cité à la page 79).

- Ayasso, H., T. Rodet et A. Abergel (2012). "A variational Bayesian approach for unsupervised super-resolution using mixture models of point and smooth sources applied to astrophysical map-making". *Inverse Problems* 28 (12) : 125005. <https://doi.org/10.1088/0266-5611/28/12/125005>. (Cit      la page 25).
- Bacon, R., M. Accardo, L. Adjali, H. Anwand, S. Bauer, I. Biswas, J. Blaizot *et al.* (2010). "The MUSE second-generation VLT instrument". In *Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy III*, sous la direction d'I. S. McLean, S. K. Ramsay et H. Takami, 7735 : 773508. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Juillet. <https://doi.org/10.1117/12.856027>. (Cit      la page 21).
- Bally, J. e. a. (2015). *The First Ultraviolet Survey of Orion Nebula's Protoplanetary Disks and Outflows*. HST Proposal ID 13419. Cycle 21. (Cit      la page 32, 63, 66, 67, 70).
- Barrett, R., M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine et H. van der Vorst (1994). *Templates for the Solution of Linear Systems : Building Blocks for Iterative Methods*. Society for Industrial / Applied Mathematics. <https://doi.org/10.1137/1.9781611971538>. (Cit      la page 48).
- Bartels, R. H., et G. W. Stewart (1972). "Solution of the Matrix Equation $AX + XB = C$ [F4]". *Commun. ACM* (New York, NY, USA) 15, n   9 (septembre) : 820-826. <https://doi.org/10.1145/361573.361582>. (Cit      la page 123).
- Beck, A., et M. Teboulle (2009). "A Fast Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm for Linear Inverse Problems". *SIAM J. Imag. Sci.* 2 (janvier) : 183-202. <https://doi.org/10.1137/080716542>. (Cit      la page 49, 87).
- Beckwith, S. V. W., M. Stiavelli, A. M. Koekemoer, J. A. R. Caldwell, H. C. Ferguson, R. Hook, R. A. Lucas *et al.* (2006). "The Hubble Ultra Deep Field". *The Astronomical Journal* 132, n   5 (septembre) : 1729-1755. <https://doi.org/10.1086/507302>. (Cit      la page 24).
- Bernard-Salas, J., et A. G. G. M. Tielens (2005). "Physical conditions in Photo-Dissociation Regions around Planetary Nebulae". *Astronomy & Astrophysics* 431 (f  vrier) : 523-538. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20035746>. (Cit      la page 61).
- Bern  , O., E. Habart, E. Peters et et al. (s.d.). "PDR4all : A JWST Early Release Science Program on radiative feedback from massive stars." *Proceedings of the Astronomical Society of the Pacific, in prep.*, (Cit      la page 31, 32, 33, 65, 70, 116).
- Bern  , O., C. Joblin, Y. Deville, J. D. Smith, M. Rapacioli, J. P. Bernard, J. Thomas, W. Reach et A. Abergel (2007). "Analysis of the emission of very small dust particles from Spitzer spectro-imagery data using blind signal separation methods". *Astronomy & Astrophysics* 469, n   2 (juillet) : 575-586. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20066282>. (Cit      la page 15, 27, 83).
- Bern  , O., C. Joblin, M. Rapacioli, J. Thomas, J. -.-C. Cuillandre et Y. Deville (2008). "Extended Red Emission and the evolution of carbonaceous nanograins in NGC 7023". *Astronomy & Astrophysics* 479, n   3 (mars) : L41-L44. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20079158>. (Cit      la page 27).
- Bern  , O., J. Montillaud et C. Joblin (2015). "Top-down formation of fullerenes in the interstellar medium". *Astronomy & Astrophysics* 577 (mai) : A133. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201425338>. (Cit      la page 62).
- Bern  , O., E. Habart, E. Peeters, A. Abergel, E. Bergin, J. Bernard-Salas, E. Bron, J. Cami, S. Cazaux et E. Dartois (2017). *Radiative Feedback from Massive Stars as Traced by Multiband Imaging and Spectroscopic Mosaics*. JWST Proposal ID 1288. Cycle 0 Early Release Science, novembre. (Cit      la page 60, 65, 72, 76, 79).

- Berné, O., A. Helens, P. Pilleri et C. Joblin (2010). "Non-negative matrix factorization pansharpener of hyperspectral data : An application to mid-infrared astronomy". In *Proc. IEEE GRSS Workshop Hyperspectral Image Signal Process. : Evolution in Remote Sens. (WHISPERS)*, 1-4. Juin. <https://doi.org/10.1109/WHISPERS.2010.5594900>. (Cité à la page 42, 44).
- Bertin, E., et S. Arnouts (1996). "SExtractor : Software for source extraction". *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* 117 (2) : 393-404. <https://doi.org/10.1051/{Astronomy}&Astrophysics}s:1996164>. (Cité à la page 26).
- Bijaoui, A., et G. Jammal (2001). "On the distribution of the wavelet coefficient for a Poisson noise". *Signal Processing* 81 (9) : 1789-1800. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0165-1684\(01\)00031-7](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0165-1684(01)00031-7). (Cité à la page 25).
- Bioucas-Dias, J. M., et J. M. P. Nascimento (2008). "Hyperspectral Subspace Identification". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 46, n° 8 (août) : 2435-2445. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2008.918089>. (Cité à la page 83).
- Bioucas-Dias, J. M., A. Plaza, N. Dobigeon, M. Parente, Q. Du, P. Gader et J. Chanussot (2012). "Hyperspectral Unmixing Overview : Geometrical, Statistical, and Sparse Regression-Based Approaches". *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing* 5 (2) : 354-379. <https://doi.org/10.1109/JSTARS.2012.2194696>. (Cité à la page 51).
- Bobin, J., J.-L. Starck, J. Fadili et Y. Moudden (2007). "Sparsity and Morphological Diversity in Blind Source Separation". *IEEE Transactions on Image Processing* 16 (11) : 2662-2674. <https://doi.org/10.1109/TIP.2007.906256>. (Cité à la page 28).
- Boudineau, M. (2019). "Vers la résolution "optimale" de problèmes inverses non linéaires parcimonieux grâce à l'exploitation de variables binaires sur dictionnaires continus : applications en astrophysique". Theses, Université Paul Sabatier - Toulouse III, février. (Cité à la page 26).
- Boulais, A., O. Berné, G. Faury et Y. Deville (2021). "Unmixing methods based on nonnegativity and weakly mixed pixels for astronomical hyperspectral datasets". *Astronomy & Astrophysics* 647 (mars) : A105. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201936399>. (Cité à la page 27).
- Boulais, A., Y. Deville et O. Berné (2015). "A geometrical blind separation method for unconstrained-sum locally dominant sources". In *2015 IEEE International Workshop of Electronics, Control, Measurement, Signals and their Application to Mechatronics (ECMSM)*, 1-6. <https://doi.org/10.1109/ECMSM.2015.7208711>. (Cité à la page 15, 45).
- Bourguignon, S., D. Mary et É. Slezak (2011). "Restoration of Astrophysical Spectra With Sparsity Constraints : Models and Algorithms". *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing* 5 (5) : 1002-1013. <https://doi.org/10.1109/JSTSP.2011.2147278>. (Cité à la page 24, 25).
- Boutsidis, C., et E. Gallopoulos (2008). "SVD based initialization : A head start for nonnegative matrix factorization". *Pattern recognition* 41 (4) : 1350-1362. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.patcog.2007.09.010>. (Cité à la page 45).
- Bron, E., C. Daudon, J. Pety, F. Levrier, M. Gerin, P. Gratier, J. H. Orkisz, V. Guzman, S. Bardeau, J. R. Goicoechea et al. (2018). "Clustering the Orion B giant molecular cloud based on its molecular emission". *Astronomy & Astrophysics* 610 : A12. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201731833>. (Cité à la page 28).
- Bron, E., J. Le Bourlot et F. Le Petit (2014). "Surface chemistry in the interstellar medium. II. H₂ formation on dust with random temperature fluctuations". *Astronomy & Astrophysics* 569 (septembre) : A100. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201322101>. (Cité à la page 34, 62).

- C.-I Chang (2003). *Hyperspectral Imaging : Techniques for Spectral detection and classification*. New York : Kluwer. (Cit     la page 37).
- C.-I Chang (2007). *Hyperspectral Data Exploitation : theory and applications*. Hoboken, NJ : John Wiley & Sons. (Cit     la page 37).
- Carloni Gertosio, R., et J. Bobin (2020). "Joint deconvolution and blind source separation on the sphere with an application to radio-astronomy". *arXiv e-prints* (septembre) : arXiv :2009.03606. (Cit     la page 28).
- Cavalcanti, Y. C., T. Oberlin, N. Dobigeon, S. Stute, M. Ribeiro et C. Tauber (2018). "Unmixing dynamic PET images with variable specific binding kinetics". *Medical Image Analysis* 49 : 117-127. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.media.2018.07.011>. (Cit     la page 15, 118).
- Champion, J., O. Bern  , S. Vicente, I. Kamp, F. Le Petit, A. Gusdorf, C. Joblin et J. R. Goicoechea (2017). "Herschel survey and modelling of externally-illuminated photoevaporating protoplanetary disks". *Astronomy & Astrophysics* 604 (ao  t) : A69. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201629404>. (Cit     la page 61).
- Chauvin, G., A. .-.M. Lagrange, C. Dumas, B. Zuckerman, D. Mouillet, I. Song, J. .-.L. Beuzit et P. Lowrance (2004). "A giant planet candidate near a young brown dwarf. Direct VLT/NACO observations using IR wavefront sensing". *Astronomy & Astrophysics* 425 (octobre) : L29-L32. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:200400056>. (Cit     la page 23).
- Ch  vez, C. E., F. Alonzo-Atienza et D.  lvarez (2013). "Avoiding the inverse crime in the Inverse Problem of electrocardiography : estimating the shape and location of cardiac ischemia". In *Computing in Cardiology 2013*, 687-690. (Cit     la page 57).
- Chavez, P., S. Sides et J. Anderson (1991). "Comparison of three different methods to merge multiresolution and multispectral data : Landsat TM and SPOT panchromatic". *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing* 57 : 295-303. (Cit     la page 43).
- Cheng, T.-Y., C. J. Conselice, A. Arag  n-Salamanca, N. Li, A. F. L. Bluck, W. G. Hartley, J. Annis et al. (2020). "Optimizing automatic morphological classification of galaxies with machine learning and deep learning using Dark Energy Survey imaging". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 493, n   3 (f  vrier) : 4209-4228. [https://doi.org/10.1093/{MonthlyNoticesoftheRoyalAstronomicalSociety:Letters}/st{Astronomy\&Astrophysics}501](https://doi.org/10.1093/MonthlyNoticesoftheRoyalAstronomicalSociety:Letters/st{Astronomy\&Astrophysics}501). (Cit     la page 27).
- Chouzenoux, E., A. Jezierska, J.-C. Pesquet et H. Talbot (2015). "A Convex Approach for Image Restoration with Exact Poisson-Gaussian Likelihood". *SIAM Journal on Imaging Sciences* 8 (4) : 2662-2682. <https://doi.org/10.1137/15M1014395>. (Cit     la page 117).
- Colliex, C., M. Tenc  , E. Lef  vre, C. Mory, H. Gu, D. Bouchet et C. Jeanguillaume (1994). "Electron energy loss spectrometry mapping". *Microchimica Acta* 114 (1) : 71-87. <https://doi.org/10.1007/BF01244534>. (Cit     la page 37).
- Compi  gne, M., L. Verstraete, A. Jones, J.-P. Bernard, F. Boulanger, N. Flagey, J. Le Bourlot, D. Paradis et N. Ysard (2011). "The global dust SED : tracing the nature and evolution of dust with DustEM". *Astronomy & Astrophysics* 525 (janvier) : A103. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201015292>. (Cit     la page 65).
- Cooley, J. W., et J. W. Tukey (1965). "An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series". *Math. Comp.* 19 : 297-301. <https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1965-0178586-1>. (Cit     la page 88).
- Cox, N. L. J., P. Pilleri, O. Bern  , J. Cernicharo et C. Joblin (2016). "Polycyclic aromatic hydrocarbons and molecular hydrogen in oxygen-rich planetary nebulae : the case of NGC 6720". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society : Letters* 456, n   1 (f  vrier) : L89-L93. <https://doi.org/10.1093/{MonthlyNoticesofth eRoyalAstronomicalSociety:Letters}|/slv184>. (Cit     la page 61).

- Damelin, S. B., et N. S. Hoang (2018). "On surface completion and image inpainting by biharmonic functions : Numerical aspects". *Int. J. Mathematics and Mathematical Sciences* (février). <https://doi.org/10.1155/2018/3950312>. (Cit      la page 66).
- Daubechies, I., M. Defrise et C. De Mol (2004). "An iterative thresholding algorithm for linear inverse problems with a sparsity constraint". *Communications on Pure and Applied Mathematics : A Journal Issued by the Courant Institute of Mathematical Sciences* 57 (11) : 1413-1457. <https://doi.org/10.1002/cpa.20042>. (Cit      la page 49).
- De Beule, P. A. A., C. Dunsby, N. P. Galletly, G. W. Stamp, A. C. Chu, U. Anand, P. Anand, C. D. Benham, A. Naylor et P. M. W. French (2007). "A hyperspectral fluorescence lifetime probe for skin cancer diagnosis". *Review of Scientific Instruments* 78 (12). <https://doi.org/10.1063/1.2818785>. (Cit      la page 37).
- Dian, R., S. Li, A. Guo et L. Fang (2018). "Deep Hyperspectral Image Sharpening". *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems* 29 (11) : 5345-5355. <https://doi.org/10.1109/TNNLS.2018.2798162>. (Cit      la page 55).
- Dian, R., S. Li, B. Sun et A. Guo (2021). "Recent advances and new guidelines on hyperspectral and multispectral image fusion". *Information Fusion* 69 : 40-51. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.inffus.2020.11.001>. (Cit      la page 42, 53).
- Diaz, A., et D. Steele (2021). "Analysis of the robustness of NMF algorithms". *arXiv e-prints* (juin) : arXiv :2106.02213. (Cit      la page 46).
- Dobigeon, N., et N. Brun (2012). "Spectral mixture analysis of EELS spectrum-images". *Ultramicroscopy* 120 (septembre) : 25-34. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2012.05.006>. (Cit      la page 37).
- Dout  , S., B. Schmitt, Y. Langevin, J.-P. Bibring, F. Altieri, G. Bellucci, B. Gondet, F. Poulet et the MEX OMEGA team (2007). "South Pole of Mars : Nature and composition of the icy terrains from Mars Express OMEGA observations". *Planetary and Space Science* 55 (janvier) : 113-133. <https://doi.org/10.1016/j.pss.2006.05.035>. (Cit      la page 37).
- Du, Q., N. H. Younan, R. King et V. P. Shah (2007). "On the Performance Evaluation of Pan-Sharpener Techniques". *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 4 (4) : 518-522. <https://doi.org/10.1109/LGRS.2007.896328>. (Cit      la page 57).
- Eckstein, J., et D. P. Bertsekas (1992). "On the Douglas-Rachford Splitting Method and the Proximal Point Algorithm for Maximal Monotone Operators". *Math. Program.* (Berlin, Heidelberg) 55, n   3 (juin) : 293-318. <https://doi.org/10.1007/BF01581204>. (Cit      la page 49).
- El Hamzaoui, I. (2020). "Unsupervised separation of sparse multivalued components with applications in astrophysics". Theses, Universit   Paris-Saclay, d  cembre. (Cit      la page 118).
- Fazio, G. G., J. L. Hora, L. E. Allen, M. L. N. Ashby, P. Barmby, L. K. Deutsch, J. .-.S. Huang et al. (2004). "The Infrared Array Camera (IRAC) for the Spitzer Space Telescope". *Astrophys. J. Supp.* 154, n   1 (septembre) : 10-17. <https://doi.org/10.1086/422843>. (Cit      la page 63).
- Ferland, G. J., K. T. Korista, D. A. Verner, J. W. Ferguson, J. B. Kingdon et E. M. Verner (1998). "CLOUDY 90 : Numerical Simulation of Plasmas and Their Spectra". *Publ. Astron. Society of the Pacific* 110 (juillet) : 761-778. <https://doi.org/10.1086/316190>. (Cit      la page 65).
- Ferraris, V., N. Dobigeon, Q. Wei et M. Chabert (2018). "Detecting Changes Between Optical Images of Different Spatial and Spectral Resolutions : A Fusion-Based Approach". *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 56 (3) : 1566-1578. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2017.2765348>. (Cit      la page 15).

- Foschino, S., O. Berné et C. Joblin (2019). "Learning mid-IR emission spectra of polycyclic aromatic hydrocarbon populations from observations". *Astronomy & Astrophysics* 632 (décembre) : A84. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201935085>. (Cité à la page 15, 27, 45, 65).
- Fraix-Burnet, D., C. Bouveyron et J. Moultağa (2021). "Unsupervised classification of SDSS galaxy spectra". *Astronomy & Astrophysics* 649 (mai) : A53. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202040046>. (Cité à la page 26).
- Fuente, A., S. Garcia-Burillo, M. Gerin, D. Teyssier, A. Usero, J. R. Rizzo et P. de Vicente (2005). "Photon-dominated Chemistry in the Nucleus of M82 : Widespread HOC⁺ Emission in the Inner 650 Parsec Disk". *Astrophys. J. Letters* 619, n° 2 (février) : L155-L158. <https://doi.org/10.1086/427990>. (Cité à la page 61).
- Galaz, G., et V. de Lapparent (1998). "The ESO-Sculptor Survey : spectral classification of galaxies with $Z < 0.5$ ". *Astronomy and Astrophysics* 332 : 459-478. (Cité à la page 26).
- Gardner, J. P., J. C. Mather, M. Clampin, R. Doyon, M. A. Greenhouse, H. B. Hammel, J. B. Hutchings, P. Jakobsen, S. J. Lilly et K. S. Long (2006). "The James Webb Space Telescope". *Space Science Reviews* 123, n° 4 (avril) : 485-606. <https://doi.org/10.1007/s11214-006-8315-7>. (Cité à la page 132, 135).
- Gastineau, A., J.-F. Aujol, Y. Berthoumieu et C. Germain (2021). "Generative Adversarial Network for Pansharpening With Spectral and Spatial Discriminators". *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 1-11. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2021.3060958>. (Cité à la page 55).
- Gehrz, R. D., T. L. Roellig, M. W. Werner, G. G. Fazio, J. R. Houck, F. J. Low, G. H. Rieke, B. T. Soifer, D. A. Levine et E. A. Romana (2007). "The NASA Spitzer Space Telescope". *Review of Scientific Instruments* 78, n° 1 (janvier) : 011302-011302. <https://doi.org/10.1063/1.2431313>. (Cité à la page 37).
- Gillespie, A. R., A. B. Kahle et R. E. Walker (1987). "Color enhancement of highly correlated images. II. Channel ratio and "chromaticity" transformation techniques". *Remote Sens. Environment* 22, n° 3 (août) : 343-365. [https://doi.org/10.1016/0034-4257\(87\)90088-5](https://doi.org/10.1016/0034-4257(87)90088-5). (Cité à la page 41).
- Goicoechea, J. R., J. Pety, S. Cuadrado, J. Cernicharo, E. Chapillon, A. Fuente, M. Gerin, C. Joblin, N. Marcelino et P. Pilleri (2016). "Compression and ablation of the photo-irradiated molecular cloud the Orion Bar". *Nature* 537, n° 7619 (septembre) : 207-209. <https://doi.org/10.1038/nature18957>. (Cité à la page 32, 61, 62, 63, 64, 66, 67, 68, 69).
- Goldstein, T., B. O'Donoghue, S. Setzer et R. Baraniuk (2014). "Fast Alternating Direction Optimization Methods". *SIAM Journal on Imaging Sciences* 7 (3) : 1588-1623. <https://doi.org/10.1137/120896219>. (Cité à la page 50).
- Goodfellow, I. J., J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. Courville et Y. Bengio (2014). "Generative Adversarial Networks". *arXiv e-prints* (juin) : arXiv :1406.2661. (Cité à la page 55).
- Gorti, U., et D. Hollenbach (2008). "Photoevaporation of circumstellar disks by far-ultraviolet, extreme-ultraviolet and X-ray radiation from the central star". *The Astrophysical Journal* 690 (2) : 1539. <https://doi.org/10.1088/0004-637x/690/2/1539>. (Cité à la page 61).
- Gowen, A., C. O'Donnell, P. Cullen, G. Downey et J. Frias (2007). "Hyperspectral imaging : an emerging process analytical tool for food quality and safety control". *Trends in Food Science & Technology* 18 (12) : 590-598. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2007.06.001>. (Cité à la page 37).
- Gratton, S., A. Sartenaer et J. Tshimanga (2011). "On A Class of Limited Memory Preconditioners For Large Scale Linear Systems With Multiple Right-Hand Sides". *SIAM Journal on Optimization* 21 (3) : 912-935. <https://doi.org/10.1137/08074008>. (Cité à la page 48).

- Green, A. A., M. Berman, P. Switzer et M. D. Craig (1988). "A transformation for ordering multispectral data in terms of image quality with implications for noise removal". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 26, n° 1 (janvier) : 65-74. <https://doi.org/10.1109/36.3001>. (Cité à la page 83).
- Grogin, N. A., D. D. Kocevski, S. M. Faber, H. C. Ferguson, A. M. Koekemoer, A. G. Riess, V. Acquaviva et al. (2011). "CANDELS : The Cosmic Assembly Near-infrared Deep Extragalactic Legacy Survey". *Astrophys. J. Supp.* 197, n° 2 (décembre) : 35. <https://doi.org/10.1088/0067-0049/197/2/35>. (Cité à la page 24).
- Gulati, R. K., R. Gupta, P. Gothoskar et S. Khobragade (1994). "Stellar Spectral Classification Using Automated Schemes". *Astrophys. J.* 426 (mai) : 340. <https://doi.org/10.1086/174069>. (Cité à la page 26).
- Habart, E., A. Abergel, F. Boulanger, C. Joblin, L. Verstraete, M. Compiègne, G. P. des Forêts et J. Le Bourlot (2011). "Excitation of H2 in photodissociation regions as seen by Spitzer". *Astronomy & Astrophysics* 527 : A122. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/20077327>. (Cité à la page 62).
- Hadj-Youcef, M. A., F. Orieux, A. Fraysse et A. Abergel (2017). "Restoration from multispectral blurred data with non-stationary instrument response". In *Proc. European Signal Process. Conf. (EUSIPCO)*, 503-507. Août. <https://doi.org/10.23919/EUSIPCO.2017.8081258>. (Cité à la page 82).
- Hadj-Youcef, M. A., F. Orieux, A. Abergel et A. Fraysse (2020). "Fast Joint Multiband Reconstruction From Wideband Images Based on Low-Rank Approximation". *IEEE Transactions on Computational Imaging* 6 : 922-933. <https://doi.org/10.1109/TCl.2020.2998170>. (Cité à la page 59).
- Hadj-Youcef, M. e. A., F. Orieux, A. Fraysse et A. Abergel (2018). "Spatio-Spectral Multichannel Reconstruction from few Low-Resolution Multispectral Data". In *Proc. European Signal Process. Conf. (EUSIPCO)*. Rome, Italy, septembre. <https://doi.org/10.23919/EUSIPCO.2018.8553166>. (Cité à la page 71, 87, 97).
- Hardie, R., M. Eismann et G. Wilson (2004). "MAP estimation for hyperspectral image resolution enhancement using an auxiliary sensor". *IEEE Transactions on Image Processing* 13 (9) : 1174-1184. <https://doi.org/10.1109/TIP.2004.829779>. (Cité à la page 46, 52).
- He, K., X. Zhang, S. Ren et J. Sun (2016). "Deep Residual Learning for Image Recognition". In *2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, 770-778. <https://doi.org/10.1109/CVPR.2016.90>. (Cité à la page 54, 55).
- Hocking, A., J. E. Geach, Y. Sun et N. Davey (2017). "An automatic taxonomy of galaxy morphology using unsupervised machine learning". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 473, n° 1 (septembre) : 1108-1129. <https://doi.org/10.1093/MNRAS/473/1/1108>. (Cité à la page 27).
- Houck, J. R., T. L. Roellig, J. van Cleve, W. J. Forrest, T. Herter, C. R. Lawrence, K. Matthews et al. (2004). "The Infrared Spectrograph (IRS) on the Spitzer Space Telescope". *Astrophys. J. Supp.* 154, n° 1 (septembre) : 18-24. <https://doi.org/10.1086/423134>. (Cité à la page 22).
- Huertas-Company, M. (2021). "Galaxy Morphology in the deep learning era". In *2021 International Conference on Content-Based Multimedia Indexing (CBMI)*, 1-6. <https://doi.org/10.1109/CBMI50038.2021.9461889>. (Cité à la page 27).
- Joblin, C., E. Bron, C. Pinto, P. Pilleri, F. Le Petit, M. Gerin, J. Le Bourlot, A. Fuente, O. Berné et J. R. Goicoechea (2018). "Structure of photodissociation fronts in star-forming regions revealed by Herschel observations of high-J CO emission lines". *Astronomy & Astrophysics* 615 (juillet) : A129. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201832611>. (Cité à la page 61, 62).

- Kaipio, J., et E. Somersalo (2007). "Statistical inverse problems : discretization, model reduction and inverse crimes". *J. Computation. Appl. Math.* 198 (2) : 493-504. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2005.09.027>. (Cité à la page 57, 104).
- Karl, W. C. (2005). "Regularization in image restoration and reconstruction". In *Handbook of Image and Video Processing*, 183-V. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-012119792-6/50075-9>. (Cité à la page 84).
- Karoui, M. S., Y. Deville, F. Z. Benhalouche et I. Boukerch (2017). "Hypersharpener by Joint-Criterion Non-negative Matrix Factorization". *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 55 (3) : 1660-1670. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2016.2628889>. (Cité à la page 44).
- Kelsall, T., J. L. Weiland, B. A. Franz, W. T. Reach, R. G. Arendt, E. Dwek, H. T. Freudenreich, M. G. Hauser, S. H. Moseley et N. P. Odegard (1998). "The COBE Diffuse Infrared Background Experiment Search for the Cosmic Infrared Background. II. Model of the Interplanetary Dust Cloud". *Astrophys. J.* 508, n° 1 (novembre) : 44-73. <https://doi.org/10.1086/306380>. (Cité à la page 74).
- Kimble, R. A., J. W. MacKenty, R. W. O'Connell et J. A. Townsend (2008). "Wide Field Camera 3 : a powerful new imager for the Hubble Space Telescope". In *Space Telescopes and Instrumentation 2008 : Optical, Infrared, and Millimeter*, sous la direction de J. Oschmann Jacobus M., M. W. M. de GrAstronomy & Astrophysicsuw et H. A. MacEwen, t. 7010, 70101E. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Juillet. <https://doi.org/10.1117/12.789581>. (Cité à la page 23).
- Laben Craig, C., et A. B. Bernard. 2000. Process For Enhancing The Spatial Resolution Of Multispectral Imagery Using Pan-sharpening. Granted Patent US 6011875 A (United States), déposé 4 janvier 2000. (Cité à la page 43).
- Lagage, P. O., J. W. Pel, M. Authier, J. Belorgey, A. Claret, C. Doucet, D. Dubreuil *et al.* (2004). "Successful Commissioning of VISIR : The Mid-Infrared VLT Instrument". *The Messenger* 117 (septembre) : 12-16. (Cité à la page 21).
- Lagrange, A., M. Fauvel, S. May, J. Bioucas-Dias et N. Dobigeon (2020). "Matrix cofactorization for joint representation learning and supervised classification – Application to hyperspectral image analysis". *Neuro-computing* 385 : 132-147. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.neucom.2019.12.068>. (Cité à la page 15).
- Lanaras, C., E. Baltsavias et K. Schindler (2015). "Hyperspectral super-resolution by coupled spectral unmixing". In *Proc. IEEE Int. Conf. Computer Vision (ICCV)*, 3586-3594. <https://doi.org/10.1109/ICCV.2015.409>. (Cité à la page 87).
- Lawson, C. L., et R. J. Hanson (1995). *Solving Least Squares Problems*. Society for Industrial / Applied Mathematics. <https://doi.org/10.1137/1.9781611971217>. (Cité à la page 45).
- Le Petit, F., C. Nehmé, J. Le Boulrot et E. Roueff (2006). "A Model for Atomic and Molecular Interstellar Gas : The Meudon PDR Code". *Astrophys. J. Supp.* 164 (juin) : 506-529. <https://doi.org/10.1086/503252>. (Cité à la page 65).
- Leach, S. M., J. -F. Cardoso, C. Baccigalupi, R. B. Barreiro, M. Betoule, J. Bobin, A. Bonaldi *et al.* (2008). "Component separation methods for the PLANCK mission". *Astronomy & Astrophysics* 491, n° 2 (novembre) : 597-615. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:200810116>. (Cité à la page 28).
- Lee, D. D., et H. S. Seung (1999). "Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization". *Nature* 401, n° 6755 (octobre) : 788-791. <https://doi.org/10.1038/44565>. (Cité à la page 44).

- Leisenring, J. M., M. Rieke, K. Misselt et M. Robberto (2016). "Characterizing persistence in JWST NIRCcam flight detectors". In *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy VII*, sous la direction d'A. D. Holland et J. Beletic, t. 9915, 99152N. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Août. <https://doi.org/10.1117/12.2233917>. (Cit      la page 79).
- Lempitsky, V., A. Vedaldi et D. Ulyanov (2018). "Deep Image Prior". In *2018 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, 9446-9454. <https://doi.org/10.1109/CVPR.2018.00984>. (Cit      la page 55, 119).
- Lenzen, R., M. Hartung, W. Brandner, G. Finger, N. N. Hubin, F. Lacombe, A.-M. Lagrange, M. D. Lehnert, A. F. M. Moorwood et D. Mouillet (2003). "NAOS-CONICA first on sky results in a variety of observing modes". In *Instrument Design and Performance for Optical/Infrared Ground-based Telescopes*, sous la direction de M. Iye et A. F. M. Moorwood, 4841 : 944-952. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Mars. <https://doi.org/10.1117/12.460044>. (Cit      la page 23).
- Liu, J. G. (2000). "Smoothing filter-based intensity modulation : A spectral preserve image fusion technique for improving spatial details". *Int. J. Remote Sens*, 3461-3472. <https://doi.org/10.1080/014311600750037499>. (Cit      la page 43).
- Loncan, L., L. B. de Almeida, J. M. Bioucas-Dias, X. Briottet, J. Chanussot, N. Dobigeon, S. Fabre et al. (2015). "Hyperspectral Pansharpening : A Review". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 3, n   3 (septembre) : 27-46. <https://doi.org/10.1109/MGRS.2015.2440094>. (Cit      la page 41, 42, 43).
- Mairal, J., F. Bach, J. Ponce et G. Sapiro (2009). "Online Dictionary Learning for Sparse Coding". In *Proceedings of the 26th Annual International Conference on Machine Learning*, 689-696. ICML '09. Montreal, Quebec, Canada : Association for Computing Machinery. <https://doi.org/10.1145/1553374.1553463>. (Cit      la page 86).
- Maoz, D., A. J. Barth, L. C. Ho, A. Sternberg et A. V. Filippenko (2001). "An Ultraviolet through Infrared Look at Star Formation and Super Star Clusters in Two Circumnuclear Starburst Rings". 121, n   6 (juin) : 3048-3074. <https://doi.org/10.1086/321080>. (Cit      la page 125, 126).
- Martin, G., S. Kaviraj, A. Hocking, S. C. Read et J. E. Geach (2020). "Galaxy morphological classification in deep-wide surveys via unsupervised machine learning". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 491 (1) : 1408-1426. <https://doi.org/10.1093/mnras/stz3006>. (Cit      la page 27).
- Masias, M., J. Freixenet, X. Llad   et M. Peracaula (2012). "A review of source detection approaches in astronomical images". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 422, n   2 (avril) : 1674-1689. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2966.2012.20742.x>. (Cit      la page 26).
- Meganem, I., Y. Deville, S. Hosseini, H. Carfantan et M. S. Karoui (2011). "Extraction of stellar spectra from dense fields in hyperspectral muse data cubes using non-negative matrix factorization". In *2011 3rd Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*, 1-4. <https://doi.org/10.1109/WHISPERS.2011.6080930>. (Cit      la page 28).
- Te-Ming, T., S. Shun-Chi, S. Hsuen-Chyun et P. S. Huang (2001). "A new look at IHS-like image fusion methods". *Information Fusion* 2 (3) : 177-186. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1566-2535\(01\)00036-7](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S1566-2535(01)00036-7). (Cit      la page 43).
- Monier,   ., T. Oberlin, N. Brun, M. Tenc  , M. de Frutos et N. Dobigeon (2018). "Reconstruction of Partially Sampled Multiband Images – Application to STEM-EELS Imaging". *IEEE Trans. Comput. Imag.* 4, n   4 (d  cembre) : 585-598. <https://doi.org/10.1109/TCI.2018.2866961>. (Cit      la page 15, 37).

- Nascimento, J., et J. Dias (2005). "Vertex component analysis : a fast algorithm to unmix hyperspectral data". *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 43 (4) : 898-910. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2005.844293>. (Cité à la page 51).
- Nesterov, Y. (1983). "A method for solving the convex programming problem with convergence rate $O(1/k^2)$ ". *Proceedings of the USSR Academy of Sciences* 269 : 543-547. (Cité à la page 49, 121, 122).
- Olsen, S. (1993). "Estimation of Noise in Images : An Evaluation". *CVGIP : Graphical Models and Image Processing* 55 (4) : 319-323. <https://doi.org/https://doi.org/10.1006/cgip.1993.1022>. (Cité à la page 25).
- Oppenheim, A. V., et R. W. Schafer (2009). *Discrete-Time Signal Processing*. 3rd. USA : Prentice Hall Press. (Cité à la page 88, 89).
- Orieux, F., J.-F. Giovannelli, T. Rodet, A. Abergel, H. Ayasso et M. Husson (2012). "Super-resolution in map-making based on a physical instrument model and regularized inversion. Application to SPIRE/Herschel". *Astronomy & Astrophysics* 539 (mars) : A38. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201116817>. (Cité à la page 25).
- Osher, S., et N. Paragios (2003). *Geometric level set methods in imaging, vision, and graphics*. Springer Science & Business Media. (Cité à la page 53).
- Pearson, J. E. (1976). "Atmospheric turbulence compensation using coherent optical adaptive techniques". *Appl. Opt.* 15, n° 3 (mars) : 622-631. <https://doi.org/10.1364/AO.15.000622>. (Cité à la page 59).
- Peeters, E., J. Bauschlicher Charles W., L. J. Allamandola, A. G. G. M. Tielens, A. r. Ricca et M. G. Wolfire (2017). "The PAH Emission Characteristics of the Reflection Nebula NGC 2023". *Astrophys. J.* 836, n° 2 (février) : 198. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/836/2/198>. (Cité à la page 62).
- Perrin, M. D., R. Soummer, E. M. Elliott, M. D. Lallo et A. Sivaramakrishnan (2012). "Simulating point spread functions for the James Webb Space Telescope with WebbPSF". In *Space Telescopes and Instrumentation 2012 : Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, 8442 : 84423D. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Septembre. <https://doi.org/10.1117/12.925230>. (Cité à la page 70, 71, 78, 104).
- Pilbratt, G. L., J. R. Riedinger, T. Passvogel, G. Crone, D. Doyle, U. Gageur, A. M. Heras *et al.* (2010). "Herschel Space Observatory. An ESA facility for far-infrared and submillimetre astronomy". *Astronomy & Astrophysics* 518 (juillet) : L1. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201014759>. (Cité à la page 20, 37).
- Pilleri, P., J. Montillaud, O. Berné et C. Joblin (2012). "Evaporating very small grains as tracers of the UV radiation field in photo-dissociation regions". *Astronomy & Astrophysics* 542 (juin) : A69. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201015915>. (Cité à la page 65).
- Poglitsch, A., C. Waelkens, N. Geis, H. Feuchtgruber, B. Vandenbussche, L. Rodriguez, O. Krause *et al.* (2010). "The Photodetector Array Camera and Spectrometer (PACS) on the Herschel Space Observatory". *Astronomy & Astrophysics* 518 (juillet) : L2. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201014535>. (Cité à la page 24).
- Pohl, C. (1996). "Geometric aspects of multisensor image fusion for topographic map updating in the humid tropics" [en English]. ITC Dissertation ; 24. Thèse de doct. (Cité à la page 96).

- Pontoppidan, K. M., T. E. Pickering, V. G. Laidler, K. Gilbert, C. D. Sontag, C. Slocum, M. J. Sienkiewicz, C. Hanley, N. M. Earl et L. Pueyo (2016). "Pandaia : a multi-mission exposure time calculator for JWST and WFIRST". In *Observatory Operations : Strategies, Processes, and Systems VI*, 9910 : 991016. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Juillet. <https://doi.org/10.1117/12.2231768>. (Cité à la page 68, 73, 74, 117).
- Poon, C., et J. Liang (2019). "Trajectory of Alternating Direction Method of Multipliers and Adaptive Acceleration". In *Advances in Neural Information Processing Systems*, sous la direction de H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d'Alché-Buc, E. Fox et R. Garnett, t. 32. Curran Associates, Inc. (Cité à la page 50).
- Puget, P., E. Stadler, R. Doyon, P. Gigan, S. Thibault, G. Luppino, G. Barrick *et al.* (2004). "WIRCam : the infrared wide-field camera for the Canada-France-Hawaii Telescope". In *Ground-based Instrumentation for Astronomy*, sous la direction d'A. F. M. Moorwood et M. Iye, 5492 : 978-987. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Septembre. <https://doi.org/10.1117/12.551097>. (Cité à la page 23).
- Rauscher, B. J., O. Fox, P. Ferruit, R. J. Hill, A. Waczynski, Y. Wen, W. Xia-Serafino, B. Mott, D. Alexander et C. K. Brambora (2007). "Detectors for the James Webb Space Telescope Near-Infrared Spectrograph. I. Readout Mode, Noise Model, and Calibration Considerations". *Publ. Astron. Society of the Pacific* 119, n° 857 (juillet) : 768-786. <https://doi.org/10.1086/520887>. (Cité à la page 73).
- Rayleigh, L. (1880). "Investigations in optics, with special reference to the spectroscope". *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society : Letters* 40 (février) : 254. <https://doi.org/10.1093/{MonthlyNoticesoftheRoyalAstronomicalSociety:Letters}/40.4.254>. (Cité à la page 19, 25, 59, 82).
- Rodet, T., F. Orieux, J.-F. Giovannelli et A. Abergel (2009). "Data inversion for hyperspectral objects in astronomy". In *First IEEE GRSS Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing*. Grenoble, France, août. <https://doi.org/10.1109/WHISPERS.2009.5289008>. (Cité à la page 25).
- Röllig, M., N. P. Abel, T. Bell, F. Bensch, J. Black, G. J. Ferland, B. Jonkheid *et al.* (2007). "A photon dominated region code comparison study". *Astronomy & Astrophysics* 467, n° 1 (mai) : 187-206. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20065918>. (Cité à la page 62).
- Ronneberger, O., P. Fischer et T. Brox (2015). "U-Net : Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation". *arXiv e-prints* (mai) : arXiv :1505.04597. (Cité à la page 56).
- Saad, Y. (2003). *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Second. Society for Industrial / Applied Mathematics. <https://doi.org/10.1137/1.9780898718003>. (Cité à la page 48).
- Salgado, F., O. Berné, J. Adams, T. Herter, L. Keller et A. Tielens (2016). "The Orion HII Region and the Orion Bar in the mid-infrared". *The Astrophysical Journal* 830 (2) : 118. <https://doi.org/10.3847/0004-637X/830/2/118>. (Cité à la page 32).
- Shewchuk, J. R. (1994). *f. Rapport technique*. Pittsburgh, PA, USA : Carnegie Mellon University. (Cité à la page 47, 87).
- Sidorov, O., et J. Y. Hardeberg (2019). "Deep Hyperspectral Prior : Single-Image Denoising, Inpainting, Super-Resolution". In *2019 IEEE/CVF International Conference on Computer Vision Workshop (ICCVW)*, 3844-3851. <https://doi.org/10.1109/ICCVW.2019.00477>. (Cité à la page 53, 55, 56).
- Simoes, M., J. Bioucas-Dias, L. B. Almeida et J. Chanussot (2015). "A Convex Formulation for Hyperspectral Image Superresolution via Subspace-Based Regularization". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 53, n° 6 (juin) : 3373-3388. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2014.2375320>. (Cité à la page 39, 40, 42, 53, 82, 83, 87).

- Smith, J. O. (2011). *Spectral Audio Signal Processing*. Online book, 2011 edition. W3K-publishing. (Cité à la page 88).
- Smith, R. M., M. Zavodny, G. Rahmer et M. Bonati (2008). "A theory for image persistence in HgCdTe photo-diodes". In *High Energy, Optical, and Infrared Detectors for Astronomy III*, sous la direction de D. A. Dorn et A. D. Holland, t. 7021, 70210J. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series. Juillet. <https://doi.org/10.1117/12.789372>. (Cité à la page 79).
- Sokoloff, D. (2011). "Galaxy formation and evolution, by Houjun Mo, Frank van den Bosch and Simon White". *Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics* 105, n° 6 (décembre) : 654-655. <https://doi.org/10.1080/03091929.2010.524822>. (Cité à la page 34).
- Soulez, F., E. Thiébaud et L. Denis (2013). "Restoration of hyperspectral astronomical data with spectrally varying blur". In *EAS Publications Series*, sous la direction de D. Mary, C. Theys et C. Aime, 59 : 403-416. EAS Publications Series. Mars. <https://doi.org/10.1051/eas/1359018>. (Cité à la page 25, 59, 82).
- Space Telescope Science Institute (STScI) (2017a). *NIRCam Filters, JWST User Documentation [Published 2017 November 29]*. Baltimore, MD. (Cité à la page 71, 132, 135).
- Space Telescope Science Institute (STScI) (2017b). *NIRSpec Dispersers and Filters, JWST User Documentation [Published 2017 March 29]*. Baltimore, MD. (Cité à la page 72, 132, 135).
- Space Telescope Science Institute (STScI) (2017c). *NIRSpec Integral Field Unit, JWST User Documentation [Published 2017 March 29]*. Baltimore, MD. (Cité à la page 74, 132, 135).
- Starck, J. L., E. Pantin et F. Murtagh (2002). "Deconvolution in Astronomy : A Review". *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 114, n° 800 (octobre) : 1051-1069. <https://doi.org/10.1086/342606>. (Cité à la page 25).
- Starck, J.-L., et F. Murtagh (2006). *Astronomical Image and Data Analysis*. Astronomy and Astrophysics Library. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-33025-7>. (Cité à la page 25, 73, 117).
- Szeliski, R. (2011). *Computer vision : algorithms and applications*. Texts in Computer Science. London, U.K. : Springer-Verlag. <https://doi.org/10.1007/978-1-84882-935-0>. (Cité à la page 81).
- The Planck Collaboration (2006). "The Scientific Programme of Planck". *arXiv e-prints* (avril) : astro-ph/0604069. (Cité à la page 28).
- Thiébaud, E., et J.-F. Giovannelli (2010). "Image reconstruction in optical interferometry". *IEEE Signal Processing Magazine* 27 (1) : 97-109. <https://doi.org/10.1109/MSP.2009.934870>. (Cité à la page 26).
- Thomas, C., T. Ranchin, L. Wald et J. Chanussot (2008). "Synthesis of Multispectral Images to High Spatial Resolution : A Critical Review of Fusion Methods Based on Remote Sensing Physics". *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing* 46 (5) : 1301-1312. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2007.912448>. (Cité à la page 42).
- Thouvenin, P.-A., N. Dobigeon et J.-Y. Tourneret (2016). "Hyperspectral Unmixing With Spectral Variability Using a Perturbed Linear Mixing Model". *IEEE Transactions on Signal Processing* 64 (2) : 525-538. <https://doi.org/10.1109/TSP.2015.2486746>. (Cité à la page 118).
- Tielens, A. G. G. M. (2005). *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*. Cambridge Univ. Press. (Cité à la page 61, 66).

- Tielens, A., et D. Hollenbach (1985). "Photodissociation regions. I-Basic model. II-A model for the Orion photodissociation region". *Astrophys. J.* 291 : 722-754. <https://doi.org/10.1086/163111>. (Cit      la page 34, 61).
- Villeneuve, E., et H. Carfantan (2014). "Nonlinear Deconvolution of Hyperspectral Data With MCMC for Studying the Kinematics of Galaxies". *IEEE Transactions on Image Processing* 23 (10) : 4322-4335. <https://doi.org/10.1109/TIP.2014.2343461>. (Cit      la page 25).
- Vivone, G., L. Alparone, J. Chanussot, M. Dalla Mura, A. Garzelli, G. A. Licciardi, R. Restaino et L. Wald (2015). "A Critical Comparison Among Pansharpening Algorithms". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 53, n   5 (mai) : 2565-2586. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2014.2361734>. (Cit      la page 41).
- Vivone, G., R. Restaino, M. Dalla Mura, G. Licciardi et J. Chanussot (2014). "Contrast and Error-Based Fusion Schemes for Multispectral Image Pansharpening". *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters* 11 (5) : 930-934. <https://doi.org/10.1109/LGRS.2013.2281996>. (Cit      la page 43).
- Vono, M., E. Bron, P. Chainais, F. L. Petit, S. Bardeau, S. Bourguignon, J. Chanussot et al. (2019). "A Fully Bayesian Approach For Inferring Physical Properties With Credibility Intervals From Noisy Astronomical Data". In *2019 10th Workshop on Hyperspectral Imaging and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*, 1-5. <https://doi.org/10.1109/WHISPERS.2019.8920859>. (Cit      la page 15).
- Wald, L., T. Ranchin et M. Mangolini (2005). "Fusion of satellite images of different spatial resolutions : assessing the quality of resulting image". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing* 43 : 1391-1402. (Cit      la page 16, 56, 60, 61, 115).
- Wang, W., W. Zeng, Y. Huang, X. Ding et J. Paisley (2019). "Deep Blind Hyperspectral Image Fusion". In *2019 IEEE/CVF International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 4149-4158. <https://doi.org/10.1109/ICCV.2019.00425>. (Cit      la page 55).
- Wang, Z., A. C. Bovik, H. R. Sheikh et E. P. Simoncelli (2004). "Image Quality Assessment : From Error Visibility to Structural Similarity". *IEEE Trans. Image Process.* 13, n   4 (avril) : 600-612. <https://doi.org/10.1109/TIP.2003.819861>. (Cit      la page 95).
- Wei, Q., J. M. Bioucas-Dias, N. Dobigeon, J.-Y. Tourneret, M. Chen et S. Godsill (2016). "Multi-Band Image Fusion Based on Spectral Unmixing". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 54, n   12 (d  cembre) : 7236-7249. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2016.2598784>. (Cit      la page 87).
- Wei, Q., N. Dobigeon et J.-Y. Tourneret (2015a). "Bayesian fusion of multi-band images". *IEEE J. Sel. Topics Signal Processing* 9, n   6 (septembre) : 1117-1127. <https://doi.org/10.1109/JSTSP.2015.2407855>. (Cit      la page 87).
- Wei, Q., N. Dobigeon, J. Tourneret, J. Bioucas-Dias et S. Godsill (2016). "R-FUSE : Robust Fast Fusion of Multiband Images Based on Solving a Sylvester Equation". *IEEE Signal Process. Lett.* 23, n   11 (novembre) : 1632-1636. <https://doi.org/10.1109/LSP.2016.2608858>. (Cit      la page 96).
- Wei, Q., J. Bioucas-Dias, N. Dobigeon et J.-Y. Tourneret (2015). "Hyperspectral and Multispectral Image Fusion Based on a Sparse Representation". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 53, n   7 (juillet) : 3658-3668. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2014.2381272>. (Cit      la page 51, 82, 86, 87, 93, 94).
- Wei, Q., N. Dobigeon et J.-Y. Tourneret (2015b). "Fast Fusion of Multi-Band Images Based on Solving a Sylvester Equation". *IEEE Trans. Image Process.* 24, n   11 (novembre) : 4109-4121. <https://doi.org/10.1109/TIP.2015.2458572>. (Cit      la page 39, 40, 42, 46, 50, 83, 87, 122, 123).

- Weingartner, J. C., et B. T. Draine (2001). "Dust Grain-Size Distributions and Extinction in the Milky Way, Large Magellanic Cloud, and Small Magellanic Cloud". *Astrophys. J.* 548, n° 1 (février) : 296-309. <https://doi.org/10.1086/318651>. (Cité à la page 64).
- Wycoff, E., T.-H. Chan, K. Jia, W.-K. Ma et Y. Ma (2013). "A non-negative sparse promoting algorithm for high resolution hyperspectral imaging". In *Proc. IEEE Int. Conf. Acoust., Speech and Signal Process. (ICASSP)*. Vancouver, Canada. <https://doi.org/10.1109/ICASSP.2013.6637883>. (Cité à la page 83).
- Xie, J., L. Xu et E. Chen (2012). "Image denoising and inpainting with deep neural networks". *Advances in neural information processing systems* 25 : 341-349. (Cité à la page 53).
- Yang, J., L. Xiao, Y.-Q. Zhao et J. C.-W. Chan (2021). "Variational Regularization Network With Attentive Deep Prior for Hyperspectral-Multispectral Image Fusion". *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 1-17. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2021.3080697>. (Cité à la page 56).
- Yang, J., Y.-Q. Zhao et J. Chan (2018). "Hyperspectral and Multispectral Image Fusion via Deep Two-Branches Convolutional Neural Network". *Remote Sensing* 10, n° 5 (mai) : 800. <https://doi.org/10.3390/rs10050800>. (Cité à la page 54).
- Yang, J., X. Fu, Y. Hu, Y. Huang, X. Ding et J. Paisley (2017). "PanNet : A Deep Network Architecture for Pan-Sharpener". In *2017 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 1753-1761. <https://doi.org/10.1109/ICCV.2017.193>. (Cité à la page 54).
- Yang, W., X. Zhang, Y. Tian, W. Wang, J.-H. Xue et Q. Liao (2019). "Deep learning for single image super-resolution : A brief review". *IEEE Transactions on Multimedia* 21 (12) : 3106-3121. <https://doi.org/10.1109/TMM.2019.2919431>. (Cité à la page 53).
- Yokoya, N., C. Grohnfeldt et J. Chanussot (2017). "Hyperspectral and Multispectral Data Fusion : A comparative review of the recent literature". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens. Mag* 5, n° 2 (juin) : 29-56. <https://doi.org/10.1109/MGRS.2016.2637824>. (Cité à la page 41, 43, 44, 46, 51, 53).
- Yokoya, N., T. Yairi et A. Iwasaki (2012). "Coupled Nonnegative Matrix Factorization Unmixing for Hyperspectral and Multispectral Data Fusion". *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.* 50, n° 2 (février) : 528-537. <https://doi.org/10.1109/TGRS.2011.2161320>. (Cité à la page 39, 40, 42, 44, 45, 82).
- Zhang, Y., et Y. Zhao (2004). "Automated clustering algorithms for classification of astronomical objects". *Astronomy & Astrophysics* 422 (août) : 1113-1121. <https://doi.org/10.1051/0004-6361:20040141>. (Cité à la page 27).
- Zhang, Y., Y. Wang, Y. Liu, C. Zhang, M. He et S. Mei (2015). "Hyperspectral and multispectral image fusion using CNMF with minimum endmember simplex volume and abundance sparsity constraints". In *2015 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, 1929-1932. <https://doi.org/10.1109/IGARSS.2015.7326172>. (Cité à la page 44).