

Sur l’influence du modèle pour l’approche inverse régularisée non-supervisée pour la reconstruction en Microscopie Tomographique Diffractive avec GSURE *

Laurence DENNEULIN, Fabien MOMEY

Laboratoire Hubert Curien UMR CNRS 5516, Université Jean Monnet, F-42000 Saint-Étienne, France
18 rue du professeur B. Laurus, 42000 Saint-Étienne, France

laurence.denneulin@univ-st-etienne.fr, fabien.momey@univ-st-etienne.fr

Résumé – Dans ce travail, nous étudions l’influence du modèle de formation d’image sur les performances d’une approche, récemment publiée, de reconstruction 3D régularisée non supervisée en microscopie tomographique diffractive, basée sur la minimisation de l’estimateur non-biaisé du risque de Stein généralisé (GSURE). L’étude est réalisée à la fois sur des données simulées et expérimentales. Nos résultats montrent que la précision du modèle est critique pour que GSURE constitue un critère efficace de réglage automatique des hyperparamètres de régularisation, ici la Variation Totale.

Abstract – In this paper, we study the influence of the image formation model on the performances of a recently published unsupervised regularized 3D reconstruction method in tomographic diffractive microscopy, based on the minimization of the Generalized Stein Unbiased Risk Estimator (GSURE). The study is performed on simulated and experimental data. Our results show that the accuracy of the model is critical for the GSURE to be an efficient criterion for automatically tune the regularization hyperparameters, here Total Variation.

1 Introduction

La Microscopie Tomographique Diffractive (TDM : *Tomographic Diffractive Microscopy*) est une technique d’imagerie 3D à haute résolution non-invasive [1]. Un jeu de données tomographique consiste en un ensemble d’hologrammes acquis pour différentes orientations d’illumination, à partir desquels on peut reconstruire une carte 3D de l’indice de réfraction (IR) complexe.

La reconstruction par inversion directe d’un modèle basée sur la première approximation de Born ou Rytov [2, 3], requiert un nombre important d’hologrammes, et n’est applicable que pour des échantillons présentant un faible gradient d’indice par rapport au milieu d’immersion. De plus, cette méthode est très sensible à la limitation de la couverture angulaire des acquisitions (problème du « cône manquant »). Les approches inverses régularisées permettent de lever ces verrous en appliquant des modèles de formation d’image plus fins et non nécessairement inversibles [6], et pallient au manque de données par l’injection d’information *a priori* au travers de contraintes et termes de régularisation. Les poids des régularisations, appelés hyperparamètres, sont choisis pour assurer le meilleur compromis entre l’accord du modèle aux données et l’information *a priori*. Leur réglage par approche empirique ou par exploration exhaustive pour trouver la valeur optimale, reste prohibitif, particulièrement pour les problèmes à grandes dimensions. Des méthodes

de réglage non supervisées continuent d’être explorées, comme la validation croisée généralisée (GCV) [7], la méthode de la *L-curve* [8], l’estimateur non biaisé du risque de Stein généralisé (GSURE : *Generalized Stein’s Unbiased Risk Estimator*) [9, 10, 18], ou les réseaux de neurones [11, 12].

Dans un travail récent [19], nous avons étudié l’utilisation du critère GSURE pour la reconstruction 3D régularisée non supervisée en TDM. Notre méthode se base sur une attache aux données utilisant un modèle appelé *beam propagation model* (BPM) [4, 20], avec ajout d’une régularisation de type lissage avec préservation de bord. Nous avons démontré que la minimisation de GSURE est un critère efficace de réglage automatique des hyperparamètres. Comme cela correspond à la minimisation d’une estimation de l’erreur en prédiction, c’est-à-dire l’erreur entre le modèle et les données « idéales », et non directement l’erreur entre l’objet reconstruit et l’objet « vrai », nous étudions ici la dépendance de notre méthode au modèle utilisé. Dans la Section 2 nous présentons notre méthode. Dans la Section 3 nous présentons nos reconstructions et analyses sur un jeu de données simulées.

2 La méthode

2.1 Modèle direct

Soit $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^N$ une carte 3D d’un échantillon immergé dans un milieu homogène, où N est le nombre de voxels de la carte.

*This work is funded by the ANR HORUS (ANR-18-CE45-0010) : *High Optical Resolution for Unlabeled Samples*.

Chaque valeur de voxel représente la différence entre l'IR complexe de l'objet et celui du milieu en ce point. Soit $\mathbf{d}_\ell^* \in \mathbb{C}^M$ l'hologramme parfait de l'échantillon obtenu pour la ℓ -ème orientation d'illumination dans $\{1, \dots, L\}$, où M est le nombre de pixels de l'hologramme. Nous supposons que l'hologramme acquis par la caméra $\mathbf{d}_\ell \in \mathbb{C}^M$ est dégradé par un bruit complexe Gaussien additif $\boldsymbol{\eta}_\ell \in \mathbb{C}^M$, indépendant et identiquement distribué (i.i.d.) de variance $2\sigma^2$, c'est-à-dire :

$$\mathbf{d}_\ell = \mathbf{d}_\ell^* + \boldsymbol{\eta}_\ell, \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\} \quad (1)$$

où $\Re(\boldsymbol{\eta}_\ell) \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathbf{I}_M)$ et $\Im(\boldsymbol{\eta}_\ell) \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \mathbf{I}_M)$.

Le modèle de formation de \mathbf{d}_ℓ^* étant inconnu, nous établissons le modèle des données suivant :

$$\mathbf{d}_\ell \approx \mathbf{A}_\ell(\mathbf{x}^*) + \boldsymbol{\eta}_\ell, \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\}, \quad (2)$$

où $\mathbf{x}^* \in \mathbb{C}^N$ est la vérité terrain inconnue de notre échantillon et $\mathbf{A}_\ell : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ un modèle du processus de formation de l'hologramme pour la ℓ -ème orientation d'illumination. Dans ce travail, nous utilisons 2 modèles différents : le modèle de Rytov [1, 15, 16], basée sur l'approximation de Born à l'ordre 1 [14] (diffraction unique de chaque point de l'objet), et la *Beam Propagation Method* (BPM) [4, 20], plus précise, prenant en compte la diffraction multiple à l'intérieur de l'objet. Dans la suite, $n \in \{1, \dots, N\}$ représentent les indices des voxels de \mathbf{x} , qui correspondent à une position $\{i, j, k\}$ sur la grille cartésienne 3D, tels que $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}_{i,j,k}$. Nous représentons par $m \in \{1, \dots, M\}$ les indices des pixels de \mathbf{d}_ℓ .

2.2 Fonction objectif

La reconstruction 3D régularisée de l'échantillon \mathbf{x} est obtenue par la minimisation d'une fonction objectif de la forme :

$$\hat{\mathbf{x}} \in \underset{\mathbf{x} \in \Omega}{\text{Argmin}} \{h(\mathbf{x}) + g_\lambda(\mathbf{D}\mathbf{x})\}, \quad (3)$$

où

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{C}^N, \quad h(\mathbf{x}) = \frac{1}{2L} \sum_{\ell} \|\mathbf{d}_\ell - \mathbf{A}_\ell(\mathbf{x})\|_{\mathbb{C}}^2, \quad (4)$$

est le terme d'attache aux données. Pour tout $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^M$, $\|\mathbf{y}\|_{\mathbb{C}}^2 = \sum_m \bar{y}_m y_m$ est la norme hermitienne, où \bar{y} représente le conjugué d'un nombre complexe.

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{C}^N, \quad g_\lambda(\mathbf{D}\mathbf{x}) = \lambda \sum_{n=1}^N \|(\mathbf{D}\mathbf{x})_n\|_{\ell_{1,2}} \quad (5)$$

est la régularisation par la variation totale (TV) [21], dont la contribution est pondérée via l'hyperparamètre λ et où $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^N \times \mathbb{R}^{3N}$ est l'opérateur des différences finies :

$$(\mathbf{D}\mathbf{x})_n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{i,j,k} - \mathbf{x}_{i+1,j,k} \\ \mathbf{x}_{i,j,k} - \mathbf{x}_{i,j+1,k} \\ \mathbf{x}_{i,j,k} - \mathbf{x}_{i,j,k+1} \end{pmatrix}, \quad \forall n \in \{1, \dots, N\} \quad (6)$$

Le choix d'une régularisation par TV est basé sur l'hypothèse *a priori* que les valeurs d'IR de l'échantillon sont constantes par morceaux et a prouvé être la meilleure dans nos travaux précédents [19].

La fonction objectif Eq. 3 est non différentiable. De plus, \mathbf{A}_ℓ n'est pas inversible. De ce fait, nous reconstruisons $\hat{\mathbf{x}}$ à l'aide de la méthode proximale de type primal-dual de Condat-Vũ [22, 23] avec backtracking [24].

2.3 Réglage non-supervisé des hyperparamètres

Soit $\widehat{\mathbf{x}}_\lambda$ la reconstruction obtenue pour une valeur fixée de λ . L'erreur quadratique moyenne en estimation (eMSE : *estimation Mean Square Error*) d'une reconstruction est donnée par :

$$\text{eMSE}(\widehat{\mathbf{x}}_\lambda) = \frac{1}{2} \|\mathbf{x}^* - \widehat{\mathbf{x}}_\lambda\|_{\mathbb{C}}^2. \quad (7)$$

Trouver une valeur de λ telle que $\widehat{\mathbf{x}}_\lambda$ minimise cette erreur permet d'assurer un bon compromis entre le biais et la variance dans la reconstruction. Comme \mathbf{x}^* n'est pas connue en pratique, la eMSE ne peut pas être calculée. Cependant, il est possible d'estimer l'erreur quadratique moyenne en prédiction (pMSE : *prediction mean square error*), donnée par :

$$\text{pMSE}(\widehat{\mathbf{x}}_\lambda) = \frac{1}{2\sigma} \sum_{\ell=1}^L \|\mathbf{A}_\ell(\mathbf{x}^*) - \mathbf{A}_\ell(\widehat{\mathbf{x}}_\lambda)\|^2, \quad (8)$$

avec l'estimateur non-biaisé du risque de Stein généralisé (GSURE : *generalized Stein's unbiased risk estimator*) [9, 10, 18], donné par :

$$\text{GSURE}(\widehat{\mathbf{x}}_\lambda) = \sum_{\ell=1}^L \left[\frac{1}{\sigma^2} \|\mathbf{d}_\ell - \mathbf{A}_\ell \widehat{\mathbf{x}}_\lambda\|_{\mathbb{C}}^2 - M + \frac{\langle \delta_\ell, \mathbf{A}_\ell \widehat{\mathbf{x}}_\lambda^\delta - \mathbf{A}_\ell \widehat{\mathbf{x}}_\lambda \rangle}{\varepsilon} \right], \quad (9)$$

où $\Re(\delta_\ell) \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_d)$, $\Im(\delta_\ell) \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_d)$, $\varepsilon > 0$ et $\widehat{\mathbf{x}}_\lambda^\delta$ est la solution de Eq. 3 où \mathbf{d}_ℓ est remplacée par $\mathbf{d}_\ell^\delta = \mathbf{d}_\ell + \varepsilon \delta_\ell$. La valeur de GSURE est un estimateur de la pMSE, c'est-à-dire $\mathbb{E}[\text{GSURE}(\widehat{\mathbf{x}}_\lambda)] = \text{pMSE}(\widehat{\mathbf{x}}_\lambda)$. Dans [19], nous avons montré que dans le cas de BPM, les courbes de pMSE et de GSURE en fonction de λ ont la même allure et donc le même argument minimal. Ainsi, trouver λ minimisant GSURE permet de minimiser la pMSE. Nous disposons ainsi dans nos reconstructions d'un critère de réglage automatique des hyperparamètres de régularisation, au sens de l'accord du modèle aux données. Cette méthode est donc tributaire de la qualité du modèle de formation d'image.

3 Application

Dans cette section, nous comparons les courbes de eMSE, pMSE et GSURE en fonction de λ , pour les reconstructions obtenues avec BPM d'une part et Rytov d'autre part. Nous procédons à cette comparaison sur un jeu de données simulées, d'une bille décentrée de $5\mu\text{m}$, non-absorbante, avec un gradient d'indice de -0.069 . Fig. 1 représente la vérité terrain \mathbf{x}^* . Les hologrammes de la bille \mathbf{d}^* sont simulés à partir des équations de Lorenz-Mie [13]. Les données sont ensuite obtenues à partir de l'équation 1 avec $\sigma = 0.01$. Ce jeu de données correspond au cas (a) dans [19]. Nous fixons ε comme le dixième de la médiane des données.

Fig. 2 représente les valeurs de eMSE, pMSE et GSURE en fonction de λ . Tout d'abord, on observe que le minimum des

deux eMSE est obtenu pour un même λ , et que la valeur de eMSE avec BPM est plus basse que celle obtenue avec Rytov. Cependant, dans le cas de reconstructions sous-régularisées, les valeurs de eMSE sont plus basses avec Rytov. Cela vient du fait que BPM a du mal à capter le support de l'objet dans les cas sous-régularisés (cf. Fig. 6 [19]).

Ensuite, on remarque que dans le cas de BPM, le critère GSURE estime assez bien la pMSE, les minima sont obtenus pour des valeurs de λ du même ordre, tandis que pour Rytov, la pMSE n'est pas bien estimée et il y a un ordre de différence entre les deux arguments minimaux. Les reconstructions obtenues pour chaque minimum sont affichées Fig. 3. On observe que, dans le cas de BPM, les reconstructions sont semblables et visuellement plus proche de la vérité terrain qu'avec Rytov, pour lequel, dans le cas de GSURE, la reconstruction est de plus sous-régularisée (les bords de l'objet ne sont pas francs). On observe donc une meilleure corrélation entre eMSE et estimation de la pMSE via GSURE lorsqu'on utilise un modèle plus précis pour la reconstruction, au sens de la eMSE.

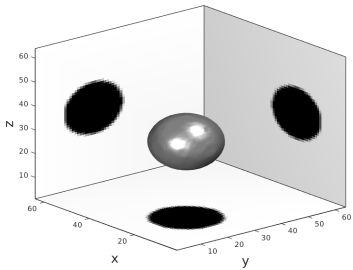


FIGURE 1 – Représentation 3D de la bille de $5\mu\text{m}$ simulée à partir des équations de Lorenz-Mie.

4 Conclusion

Dans ce papier, nous avons étudié l'importance de la précision du modèle de formation des données pour le réglage des hyperparamètres de régularisation par minimisation du critère GSURE, dans le cadre de la reconstruction 3D par approche inverse régularisée en TDM. Nous avons montré que le modèle BPM, plus précis, permettait de trouver un hyperparamètre plus proche de ceux donnant les meilleurs pMSE et eMSE qu'avec Rytov, dont la reconstruction donnant le meilleur GSURE est sous-régularisée. En conclusion, pour régler les hyperparamètres avec GSURE, la précision du modèle est critique. La perspective est de vérifier ces conclusions sur données expérimentales.

Références

- [1] O. Haeberlé, K. Belkebir, H. Giovannini, and A. Sentenac, "Tomographic diffractive microscopy : basics, techniques and perspectives," *J. Mod. Opt.* 57, 686–699 (2010).
- [2] M. Debailleul, B. Simon, V. Georges, O. Haeberlé, and V. Lauer, "Holographic microscopy and diffractive microtomography of transparent samples," *Meas. Sci. Technol.* 19, 074009 (2008).
- [3] B. Simon, M. Debailleul, M. Houkal, C. Ecoffet, J. Bailleul, J. Lambert, A. Spangenberg, H. Liu, O. Soppera, and O. Haeberlé, "Tomographic diffractive microscopy with isotropic resolution," *Optica* 4, 460–463 (2017).
- [4] U. S. Kamilov, I. N. Papadopoulos, M. H. Shoreh, A. Goy, C. Vonesch, M. Unser, and D. Psaltis, "Learning approach to optical tomography," *Optica* 2, 517–522 (2015).

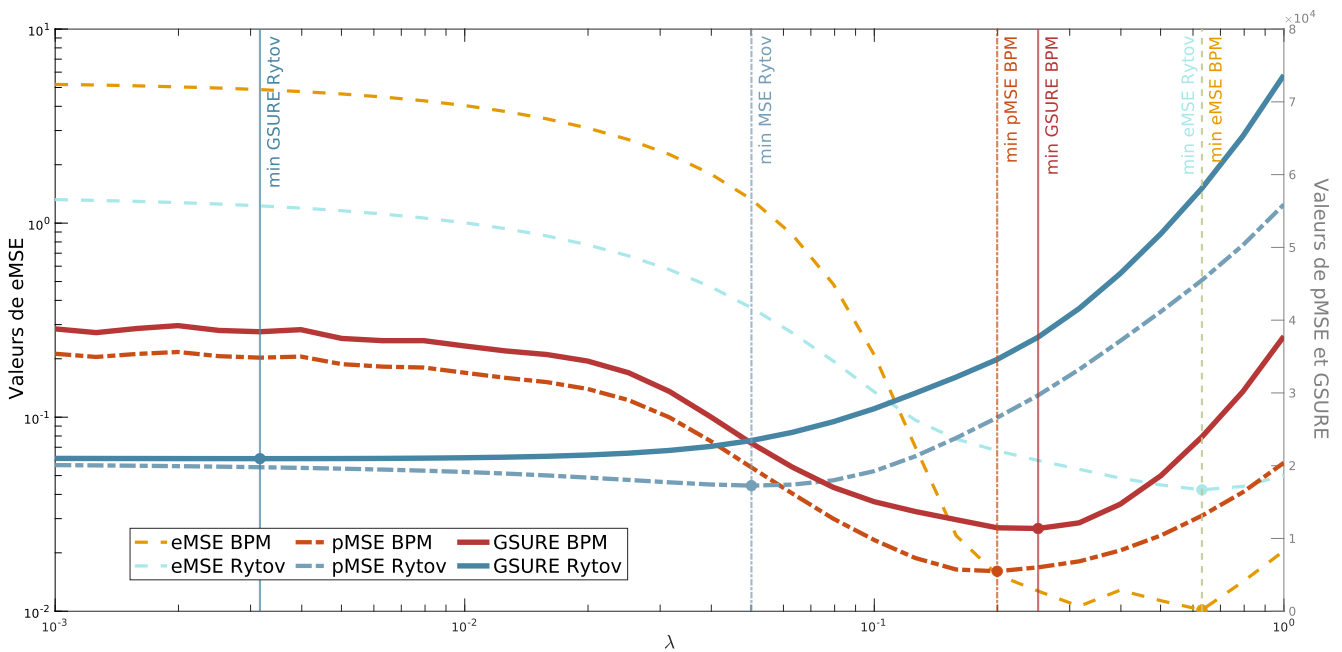


FIGURE 2 – Comparaison des valeurs de eMSE, pMSE et GSURE obtenues pour les reconstructions avec BPM et Rytov, en fonction de λ .

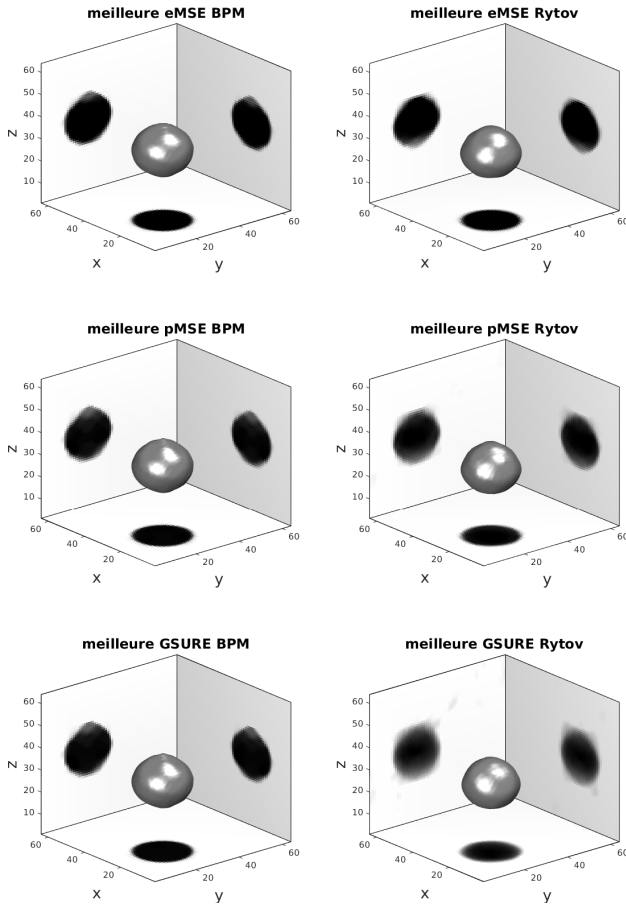


FIGURE 3 – Reconstructions obtenues avec BPM et Rytov, pour les valeurs de λ minimisant la eMSE, la pMSE et le critère GSURE.

- [5] A. Berdeu, F. Momey, B. Laperrousaz, T. Bordy, X. Gidrol, J.-M. Dinten, N. Picollet-D’ahan, and C. Allier, “Comparative study of fully three-dimensional reconstruction algorithms for lens-free microscopy,” *Appl. Opt.* 56, 3939–3951 (2017).
- [6] U. S. Kamilov, I. N. Papadopoulos, M. H. Shoreh, A. Goy, C. Vonesch, M. Unser, and D. Psaltis, “Optical Tomographic Image Reconstruction Based on Beam Propagation and Sparse Regularization,” *IEEE Transactions on Comput. Imaging* 2, 59–70 (2016).
- [7] G. H. Golub, M. Heath, and G. Wahba, “Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter,” *Technometrics* 21, 215–223 (1979).
- [8] P. C. Hansen and D. P. O’Leary, “The use of the l-curve in the regularization of discrete ill-posed problems,” *SISC* 14, 1487–1503 (1993).
- [9] C. M. Stein, “Estimation of the mean of a multivariate normal distribution,” *The annals Stat.* pp. 1135–1151 (1981).
- [10] Y. C. Eldar, “Generalized sure for exponential families : Applications to regularization,” *IEEE Transactions on Signal Process.* 57, 471–481 (2008).
- [11] F. Yang, F. Yang, T.-a. Pham, H. Gupta, M. Unser, and J. Ma, “Deep-learning projector for optical diffraction tomography,” *Opt. Express* 28, 3905–3921 (2020). Publisher : Optical Society of America.
- [12] K. C. Zhou and R. Horstmeyer, “Diffraction tomography with a deep image prior,” *Opt. express* 28, 12872–12896 (2020).
- [13] F. Slimani, G. Grehan, G. Gouesbet, and D. Allano, “Near-field lorentz-mie theory and its application to microholography,” *Appl. Opt.* 23, 4140–4148 (1984).
- [14] E. Wolf, “Three-dimensional structure determination of semi-transparent objects from holographic data,” *Opt. Commun.* 1, 153–156 (1969).
- [15] A. J. Devaney, “Inverse-scattering theory within the Rytov approximation,” *Opt. Lett.* 6, 374 (1981).
- [16] Y. Sung, W. Choi, C. Fang-Yen, K. Badizadegan, R. R. Dasari, and M. S. Feld, “Optical diffraction tomography for high resolution live cell imaging,” *Opt. Express* 17, 266 (2009).
- [17] T.-a. Pham, E. Soubies, A. Ayoub, J. Lim, D. Psaltis, and M. Unser, “Three-Dimensional Optical Diffraction Tomography With Lippmann-Schwinger Model,” *IEEE Transactions on Comput. Imaging* 6, 727–738 (2020). Conference Name : IEEE Transactions on Computational Imaging.
- [18] . S. Ramani, T. Blu, and M. Unser, “Monte-Carlo Sure : A Black-Box Optimization of Regularization Parameters for General Denoising Algorithms,” *IEEE TIP* 17, 1540–1554 (2008).
- [19] L. Denneulin, F. Momey, D. Brault, M. Debailleul, A. M. Taddese, N. Verrier, and O. Haeberlé, “GSURE criterion for unsupervised regularized reconstruction in tomographic diffractive microscopy,” *J. Opt. Soc. Am. A* 39, A52–A61 (2022).
- [20] X. Ma, W. Xiao, and F. Pan, “Optical tomographic reconstruction based on multi-slice wave propagation method,” in *Opt. Express* 25, 22595–22607 (2017).
- [21] L. I. Rudin, S. Osher, and E. Fatemi, “Nonlinear total variation based noise removal algorithms,” *Phys. D : Nonlinear Phenom.* 60, 259–268 (1992).
- [22] L. Condat, “A Primal–Dual Splitting Method for Convex Optimization Involving Lipschitzian, Proximable and Linear Composite Terms,” *Journal of Optimization Theory and Applications* 158, 460–479 (2013).
- [23] B. C. Vũ, “A Splitting Algorithm for Coupled System of Primal–Dual Monotone Inclusions,” *Journal of Optimization Theory and Applications* 164, 993–1025 (2015).
- [24] L. Denneulin, N. Pustelnik, M. Langlois, I. Loris et É. Thiébaud, “Primal-dual splitting scheme with backtracking for handling with epigraphic constraint and sparse analysis regularization,” *iTwist*, Nantes, France, Dec. 2-4 (2020).