

08 avril, 2025

TER - Identification de blobs issue de figures de diffraction

Eliot Morard

Table des matières

I /	Remerciement	3
II /	Introduction	4
III /	Différentes philosophies de segmentation	4
III - 1 /	Méthodes différentielles	4
III - 2 /	Méthodes « watershed » (partage des eaux)	4
III - 3 /	Chaîne de traitement typique	5
IV /	Implémentation de l'algorithme de la LPE	5
IV - 1 /	Génération de blobs synthétiques	5
IV - 2 /	Présentation de l'algorithme de la ligne de partage des eaux (LPE)	6
IV - 3 /	Résultats et visualisation de la segmentation	7
IV - 4 /	Limites et perspectives	9
V /	Introduction	10
V - 1 /	Contexte expérimental	10
V - 2 /	Principe de l'analyse par diffraction X	11
V - 3 /	Enjeux associées à l'analyse des figures	12
VI /	État de l'art	14
VI - 1 /	Méthode par diffusion anisotrope (EDP)	14
VI - 1 . 1 /	Objectif et cadre	15
VI - 1 . 2 /	Formulation mathématique : transport du Laplacien	15
VI - 1 . 3 /	Limites	16
VI - 2 /	Méthode d'Inpainting par patch	16
VI - 2 . 1 /	Principe général	16
VI - 2 . 2 /	Méthode de CRIMINISI ET AL. (2004)	17
VI - 2 . 3 /	Avantages et limites	17
VII /	Formulation de la problématique	18
VIII /	Ma contribution	19
VIII - 1 /	Reconstruction par décomposition POD	19
VIII - 2 /	Principe de la méthode	19
VIII - 3 /	Analyse des modes	20
VIII - 4 /	Mesures de qualité de reconstruction	22
VIII - 5 /	Résultats : cas de blob centré	23
VIII - 6 /	Problème en cas de décentrage	23
VIII - 7 /	Régularisation Ridge	26
VIII - 8 /	Recentrage itératif du blob par centre de masse	27
IX /	Résultat sur image expérimentale	28
IX - 1 /	Constitution de la base d'apprentissage POD	28
IX - 2 /	Reconstruction sur des cas réels masqués	28
IX - 3 /	Premiers résultats de reconstruction	29
IX - 4 /	Masque adaptatif et interpolation douce	30
IX - 5 /	Effet de la régularisation	30
IX - 6 /	Conclusion de la partie expérimentale	31
X /	Bibliographie	32

I / Remerciement

Je tiens à remercier Thomas Rodet pour son accompagnement et ses conseils tout au long de ce travail. Merci également à Mohamed Abbas Turki, qui m'a orienté vers cette thématique.

Je souhaite aussi exprimer ma reconnaissance à Mialitiana Andrianarison, avec qui j'ai collaboré sur ce TER, ainsi qu'à Agnès Dewaele et Nicolas Bruzy du CEA-DAM, pour leur accueil chaleureux au laboratoire, leurs conseils, et l'accès aux données expérimentales qui ont permis d'enrichir ce TER.

PARTIE 1 : DÉTECTION ET IDENTIFICATION DE BLOBS ISSUES D'UNE FIGURE DE DIFFRACTION PAR RAYON X

II / Introduction

La détection de blobs est une étape fondamentale dans de nombreux domaines de l'imagerie scientifique, comme la microscopie, l'astronomie ou l'analyse de diffraction. Identifier précisément ces régions homogènes (les blobs) permet d'extraire des informations clés sur la forme, la taille ou la localisation d'objets d'intérêt. Selon les objectifs et la nature des images, différentes stratégies de segmentation sont utilisées.

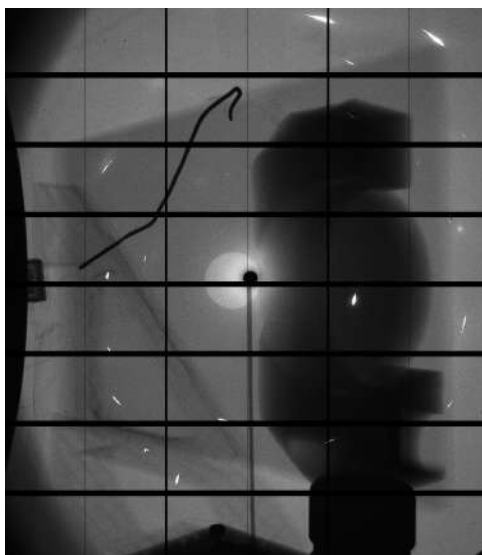


Fig. 2. – Figure de diffraction de la ligne soleil

III / Différentes philosophies de segmentation

III - 1 / Méthodes différentielles

Les approches différentielles reposent sur l'analyse locale des variations d'intensité à l'aide d'opérateurs dérivatifs (gradient, Laplacien, etc.). La méthode du Laplacien du Gaussien (LoG), qui consiste à lisser l'image puis à calculer son Laplacien, permet de détecter efficacement les centres de blobs présentant des transitions nettes d'intensité. Toutefois, ces techniques montrent une forte sensibilité au bruit et dépendent du choix des paramètres de lissage : une mauvaise échelle peut faire disparaître des structures pertinentes ou accentuer le bruit. En pratique, il suffit que deux blobs se recouvrent ou que le contraste soit inférieur à un seuil pour que la détection devienne instable. Cette difficulté se retrouve dans l'exemple de la [Fig. 14](#) plus loin dans le rapport.

III - 2 / Méthodes « watershed » (partage des eaux)

La segmentation « watershed » interprète l'image comme un relief, et identifie les lignes de partage des eaux séparant les différentes régions. Cette approche est bien adaptée pour des images où les objets sont contigus ou partiellement fusionnés, mais elle présente une tendance marquée à la sur-segmentation en présence de bruit ou d'artefacts de faible intensité. L'efficacité de l'algorithme dépend

en pratique de la qualité du prétraitement (filtrage, seuillage), voire d'un marquage initial pour guider la segmentation et limiter la création de régions parasites.

III - 3 / Chaîne de traitement typique

La détection automatisée des blobs repose généralement sur une chaîne composée de trois étapes : prétraitement (réduction du bruit, seuillage adaptatif), extraction des régions d'intérêt (LoG, watershed, etc.), puis post-traitement (suppression des petits objets, fusion ou séparation des régions ambiguës). Cette organisation modulaire permet d'ajuster la segmentation à la nature des images.

La figure suivante (Fig. 3) résume les principales étapes d'une chaîne typique d'analyse de blobs à partir de données expérimentales.

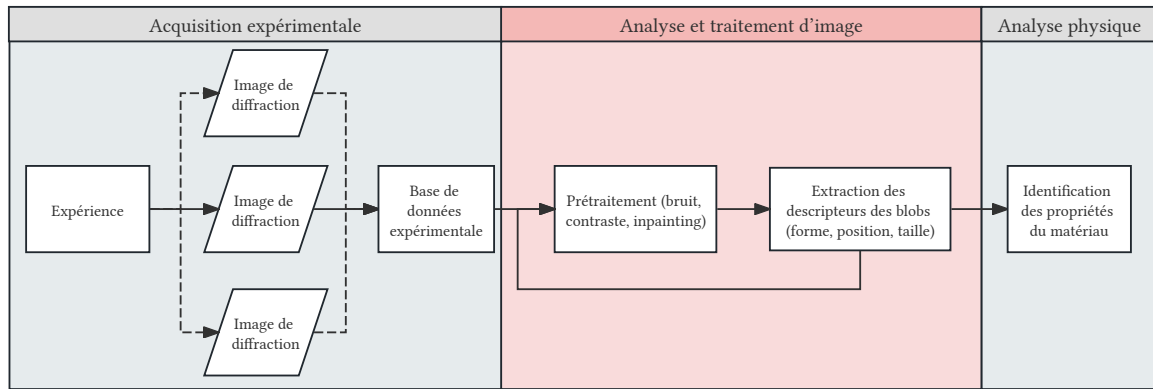


Fig. 3. – Pipeline générale du problème d'identification des blobs

IV / Implémentation de l'algorithme de la LPE

IV - 1 / Génération de blobs synthétiques

Afin de valider la robustesse et les limites des algorithmes de segmentation, des images synthétiques de blobs ont été générées selon différents paramètres : nombre de blobs, variance (σ), taille des fenêtres et densité spatiale.

- Les figures 4 à 6 montrent des exemples avec cinq blobs répartis uniformément dans une image de taille 512×512 pixels.
- Les figures 7 à 9 présentent des configurations plus denses uniforme (30 blobs) pour évaluer la segmentation dans des cas de recouvrement et de proximité.
- Enfin, des images de plus grande taille, contenant jusqu'à 100 blobs de tailles variables (figures 10 à 12), sont générées avec une densité uniforme radialement.

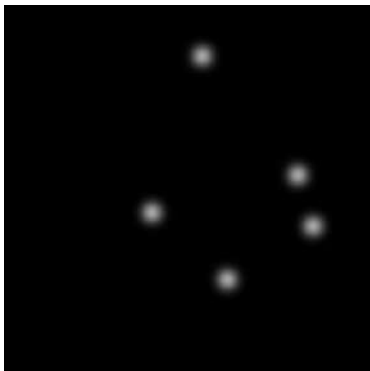


Fig. 4. – (a) $n_{\text{blobs}} = 5$

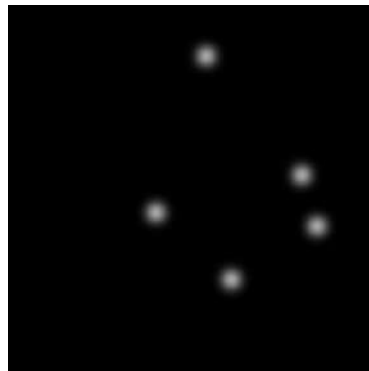


Fig. 5. – (b) $n_{\text{blobs}} = 5$

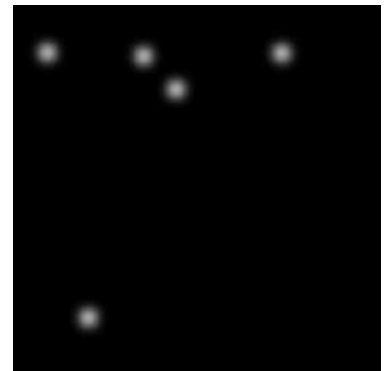
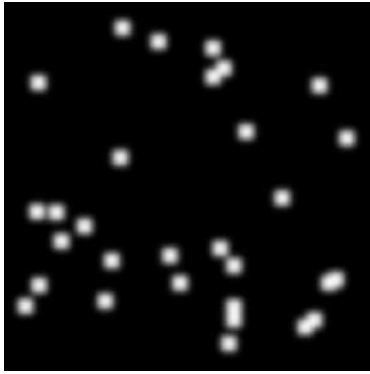
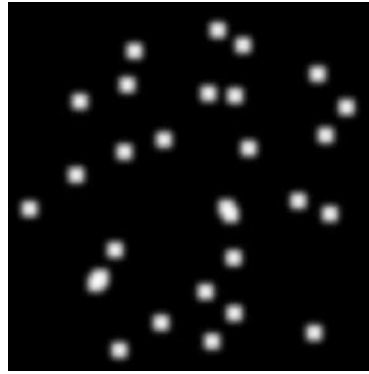
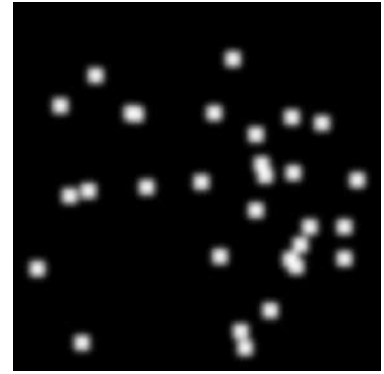
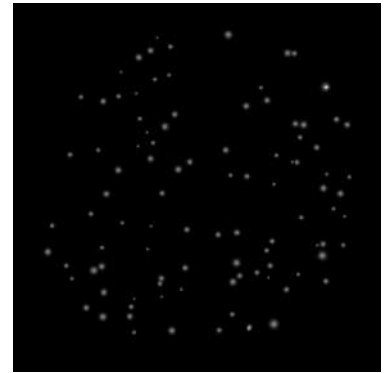


Fig. 6. – (c) $n_{\text{blobs}} = 5$

Fig. 7. - (a) $n_{\text{blobs}} = 30$ Fig. 8. - (b) $n_{\text{blobs}} = 30$ Fig. 9. - (c) $n_{\text{blobs}} = 30$ Fig. 10. - (a) $n_{\text{blobs}} = 30$ Fig. 11. - (b) $n_{\text{blobs}} = 30$ Fig. 12. - (c) $n_{\text{blobs}} = 30$

IV - 2 / Présentation de l'algorithme de la ligne de partage des eaux (LPE)

L'algorithme LPE ("watershed") est couramment utilisé pour la segmentation d'images présentant des régions connexes, comme les blobs. Voici les grandes étapes de la méthode :

1. **Calcul du gradient de l'image** : On applique un filtre différentiel (souvent Sobel) pour obtenir les composantes du gradient selon X et Y, puis la magnitude.
2. **Détection des minima locaux** : Les régions de faible intensité dans l'image de gradient servent de points de départ pour l'inondation.
3. **Région de croissance** : À partir de chaque minimum, l'algorithme "inonde" l'image en rassemblant les pixels voisins jusqu'à ce que les fronts d'inondation se rencontrent : la ligne de séparation forme la "ligne de partage des eaux".
4. **Regroupement éventuel** : Après segmentation, des regroupements peuvent être appliqués pour fusionner les régions très proches ou bruitées (Suppression des non-extremum).

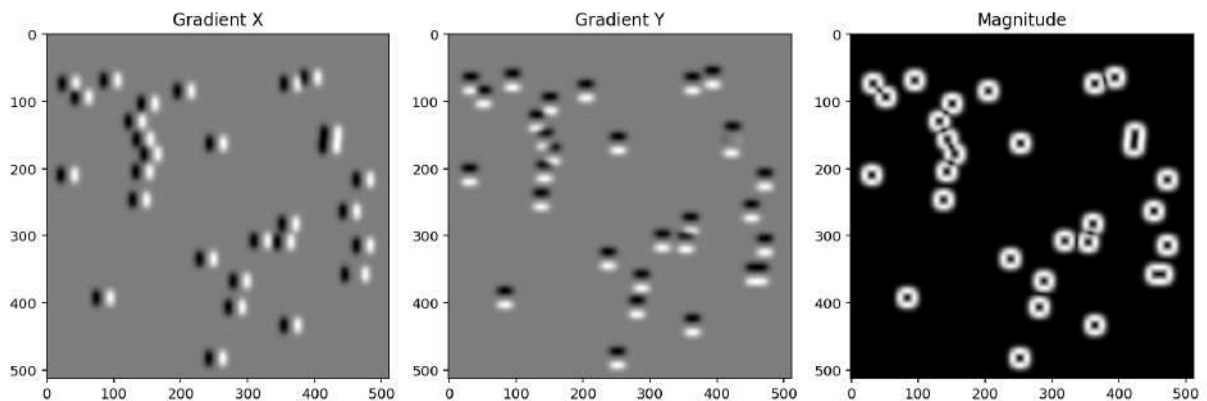


Fig. 13. - Gradient X, Gradient Y, Magnitude

IV - 3 / Résultats et visualisation de la segmentation

Pour un petit nombre de blobs bien séparés, la segmentation par ligne de partage des eaux (LPE) permet généralement d'identifier chaque région individuelle. Cependant, même dans ce cas simple, on observe parfois une sur-segmentation locale lorsque deux blobs sont suffisamment proches ou selon la structure du gradient utilisé (voir [Fig. 14](#)).

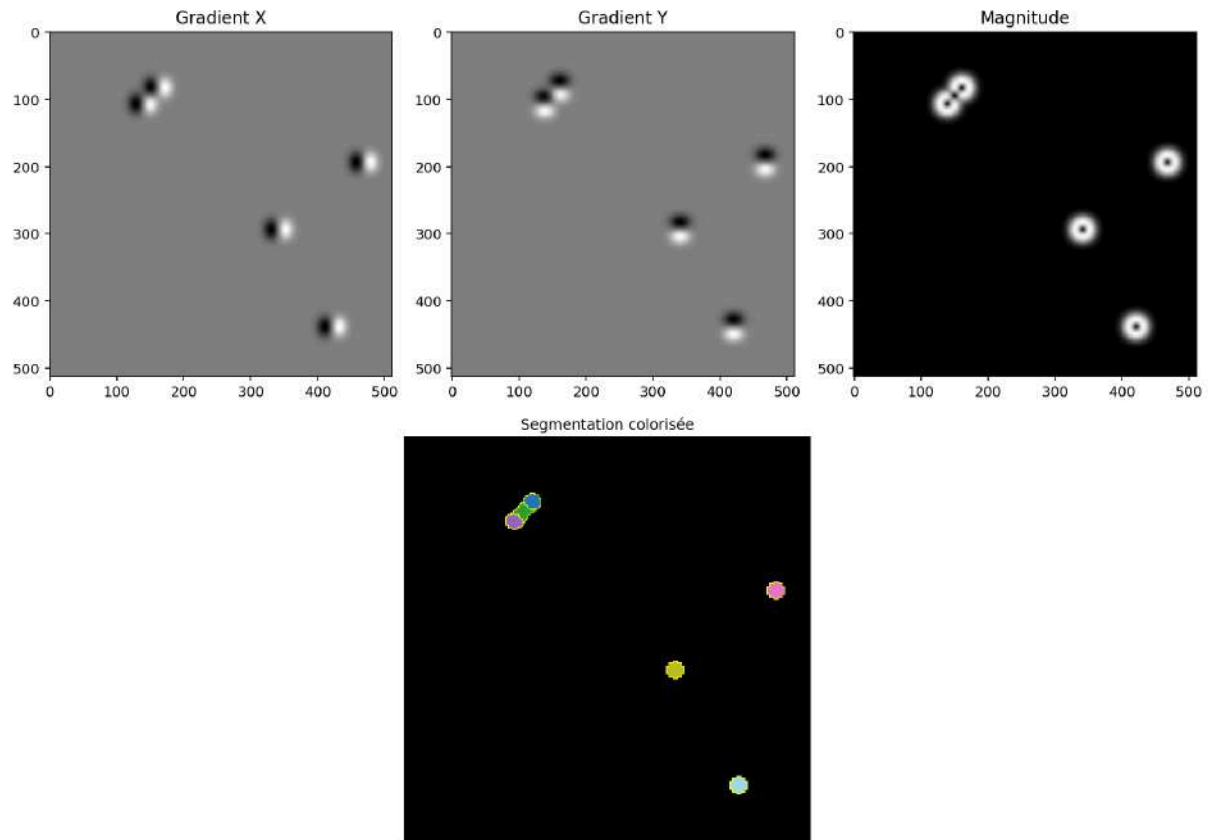


Fig. 14. – Segmentation LPE pour 5 blobs

Lorsque le nombre de blobs augmente, la méthode montre rapidement ses limites. La proximité spatiale accrue entre les blobs peut générer des fusions non souhaitées ou, à l'inverse, une sur-segmentation liée à la complexité du relief de gradient.

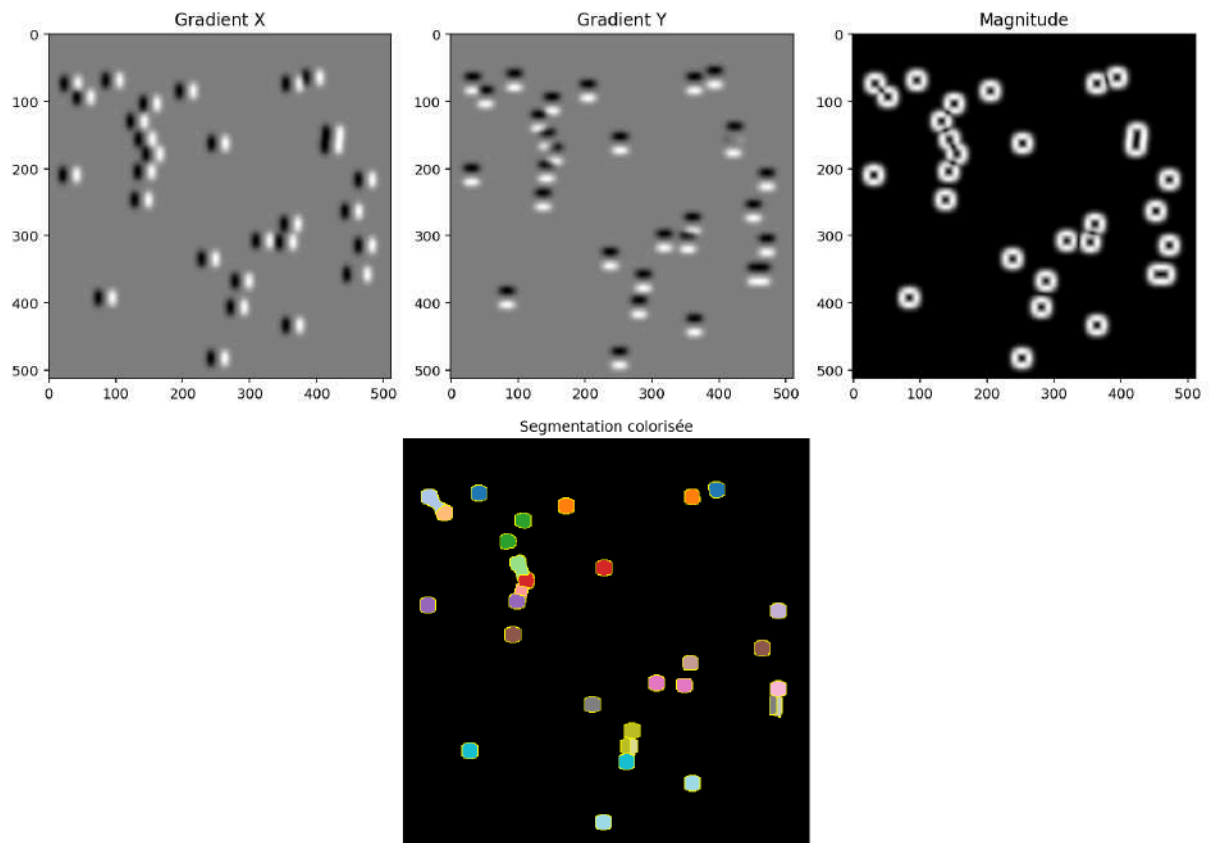


Fig. 15. – Segmentation LPE pour 30 blobs

Dans les cas de forte densité (plus de 100 blobs), la robustesse de la LPE chute : la présence de bruit, de recouvrement et la variabilité des tailles ou intensités des blobs provoquent une multiplication des régions parasites et une fragmentation de la segmentation. Le résultat dépend alors autant du paramétrage du prétraitement que de la méthode elle-même. Un affinage par filtrage morphologique ou par fusion adaptative devient nécessaire pour garantir des résultats exploitables.

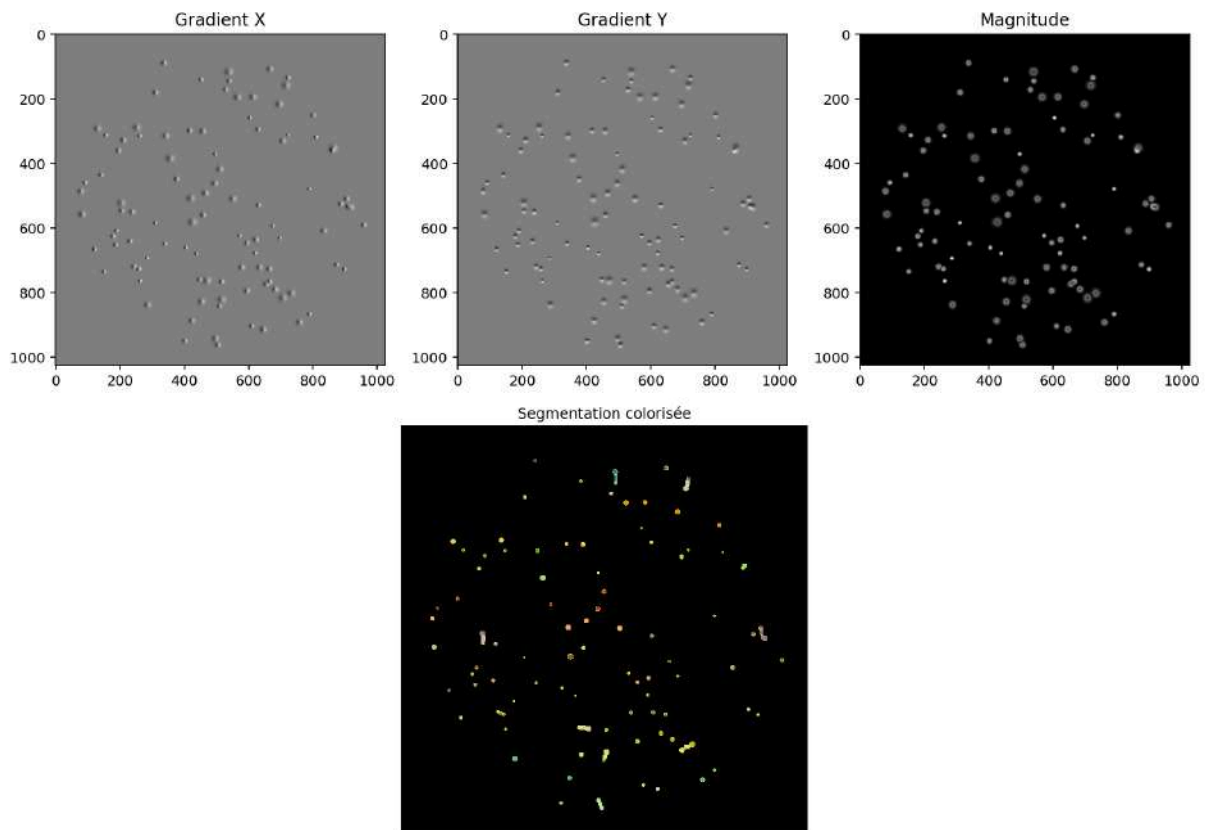


Fig. 16. – Segmentation LPE pour 106 blobs

En résumé, la segmentation par LPE offre de bonnes performances tant que les objets à détecter sont bien séparés et que le bruit reste limité. Dès que la densité, le recouvrement ou le bruit augmentent, l'approche nécessite un ajustement des paramètres ou un couplage avec d'autres méthodes de post-traitement pour conserver une segmentation exploitable.

IV - 4 / Limites et perspectives

La méthode de la ligne de partage des eaux est très efficace pour détecter des régions homogènes et bien séparées. Cependant, elle atteint rapidement ses limites lorsque :

- les blobs sont très proches ou se recouvrent,
- le bruit introduit de faux minima ou fragmente les régions,
- les tailles ou intensités sont trop variables.

Pour des applications réelles, il est donc important de faire des prétraitements spécifique à la nature de l'image analysée.

PARTIE 2 : RECONSTRUCTION D'UN BLOB PARTIEL

V / Introduction

V - 1 / Contexte expérimental

Les presses à enclumes de diamant (DAC) sont aujourd'hui des outils expérimentaux très utilisés en science des matériaux pour explorer les propriétés de la matière sous pressions extrêmes. En reproduisant des conditions atteignant ou dépassant les 100 GPa (soit plus d'un million de fois la pression atmosphérique), elles permettent d'étudier des phénomènes physico-chimiques inaccessibles dans des conditions standards, avec des applications en géophysique, chimie haute pression, physique du solide, ou encore matériaux quantiques.

Le principe de fonctionnement repose sur la compression d'un échantillon micrométrique entre deux pointes de diamant de forme conique (voir [Fig. 18](#)). L'échantillon est inséré dans un joint métallique, souvent un disque de rhenium percé d'un trou central, dans lequel on introduit également un milieu transmetteur de pression (généralement un gaz ou un liquide inerte) ainsi qu'une jauge de pression (souvent un cristal témoin tel que du rubis ou du quartz).

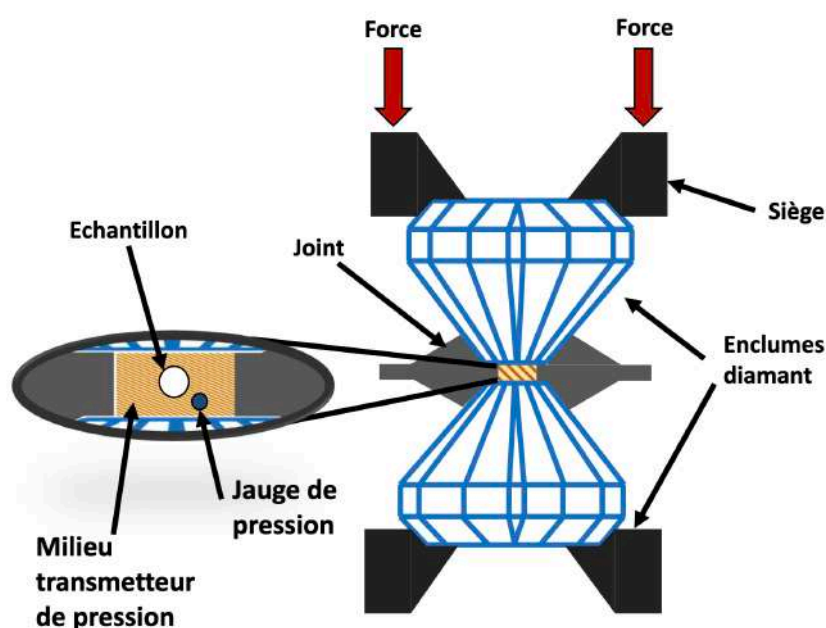


Fig. 18. – Schéma de principe d'une Cellule à Enclumes de Diamant [1]

L'ensemble est ensuite fermé et placé dans une cellule hermétique. L'application de la pression est assurée soit mécaniquement, soit par une membrane gonflable, comme illustré dans la [Fig. 19](#).

Afin de caractériser la structure interne du matériau comprimé, on utilise des techniques d'analyse non destructives basées sur la diffraction de rayons X, qui font l'objet de la section suivante.

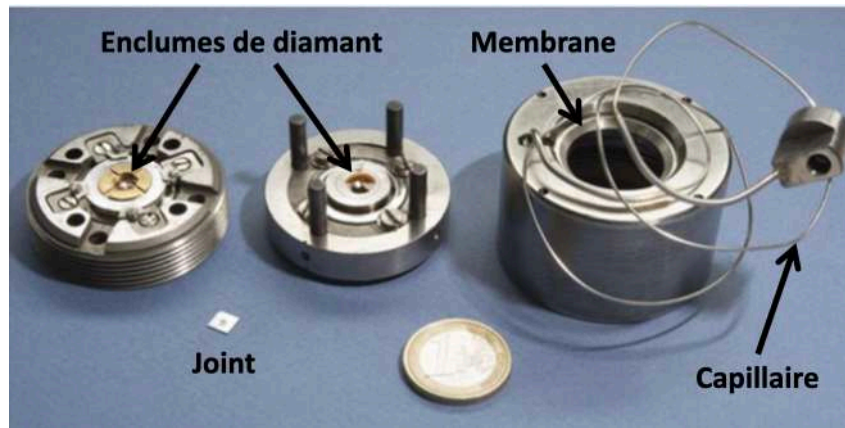


Fig. 19. – Photographie des composants d'une CED à membrane.

De gauche à droite, on peut observer le côté immobile de la cellule (côté cylindre), le joint métallique, le côté mobile de la cellule (côté piston), une pièce de 1 euro pour l'échelle, et le capot de la cellule contenant la membrane et le capillaire utilisé pour gonfler la membrane et appliquer la pression dans la cellule. [1]

V - 2 / Principe de l'analyse par diffraction X

La diffraction des rayons X est une technique non invasive permettant d'accéder à l'organisation atomique d'un matériau cristallin. Elle repose sur le principe de la diffraction de BRAGG, selon lequel un faisceau de rayons X incident est réfléchi de manière constructive par des plans cristallins espacés d'une distance d_{hkl} . La condition de diffraction constructive est donnée par la loi de BRAGG :

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin(\theta) \quad (1)$$

où λ est la longueur d'onde du rayon incident, d_{hkl} la distance interréticulaire correspondant aux plans d'indices de Miller (hkl), et θ l'angle d'incidence (voir Fig. 20).

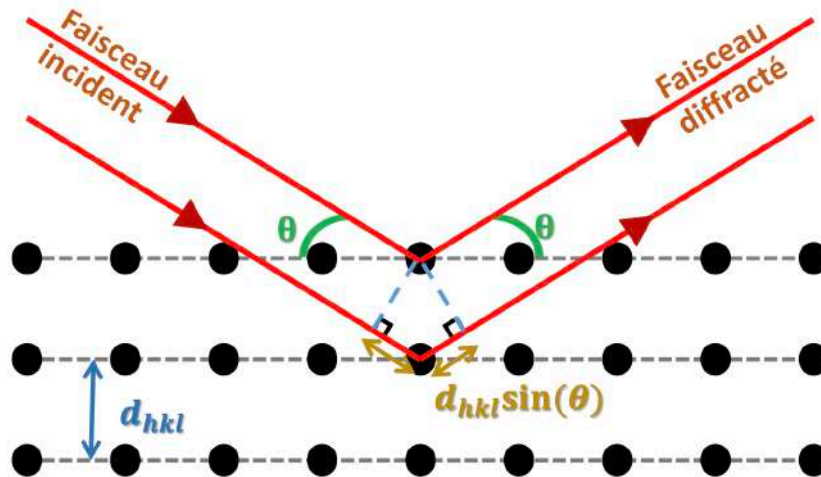


Fig. 20. – Illustration de la diffraction de Bragg pour des plans cristallins d'indice de Miller (hkl) espacés d'une distance interréticulaire d_{hkl} . [1]

Dans le contexte des expériences sous haute pression, le faisceau de rayons X est dirigé à travers la cellule, traverse les diamants, interagit avec l'échantillon comprimé, puis est diffracté selon des angles précis (voir Fig. 21). Le rayonnement diffracté est capté sur un détecteur 2D placé à une distance bien définie, ce qui permet de construire une figure de diffraction.

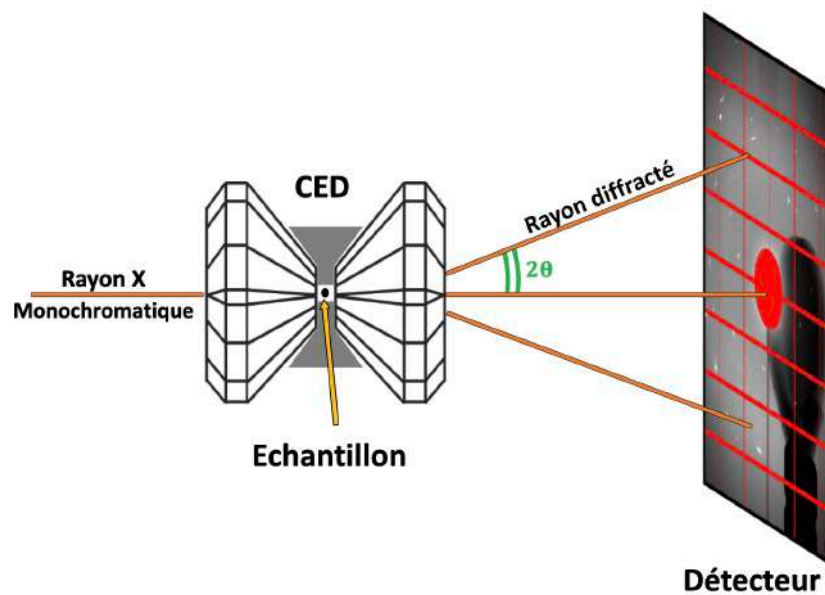


Fig. 21. – Dispositif expérimental de diffraction aux rayons X en dispersion angulaire [1]

Ces figures consistent en une série de taches lumineuses localisées, appelées blobs, chacune correspondant à un pic de diffraction sur un plan cristallin donné (voir [Fig. 22](#)). La position de ces blobs dans l'image est directement liée à l'orientation des plans cristallins, tandis que leur intensité renseigne sur la densité électronique locale et les transitions de phase potentielles.

Ces blobs constituent les éléments qui permettent de caractériser le matériaux et son diagramme de phase. La qualité des images d'observation est déterminante pour une interprétation correcte. Dans la pratique, cependant, leur lecture peut être affectée par des facteurs instrumentaux ou géométriques, comme nous le verrons dans les sections suivantes.

V - 3 / Enjeux associées à l'analyse des figures

Les figures de diffraction obtenues en cellule à enclumes de diamant présentent de nombreux artefacts expérimentaux qui compliquent l'analyse automatique des blobs. Ces taches de diffraction, normalement bien définies, apparaissent souvent altérées, masquées ou déformées, comme l'illustre la [Fig. 22](#).

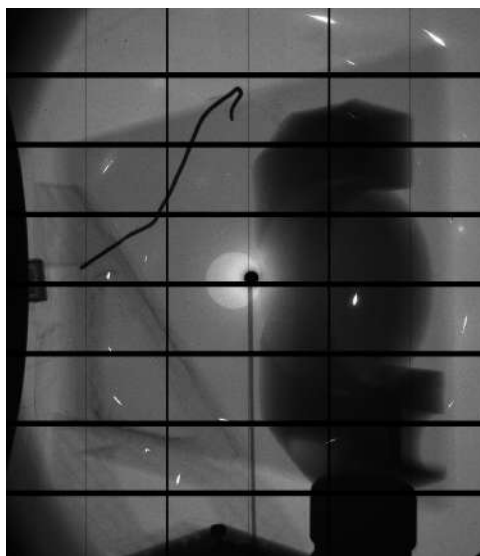


Fig. 22. – Figure de diffraction de la ligne soleil

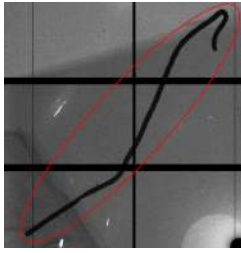


Fig. 23. – Exemple de masque mécanique obstruant les rayons diffractés

Les blobs peuvent également être scindés, c'est-à-dire apparaître partagés en deux lobes ou plus, rendant leur détection et leur centrage difficiles. Ce phénomène est souvent lié à la géométrie du détecteur (plusieurs cellule CMOS assemblée ensemble).

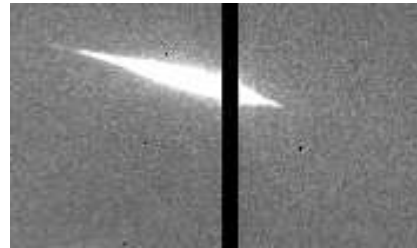


Fig. 24. – Exemple de blob scindé longitudinalement

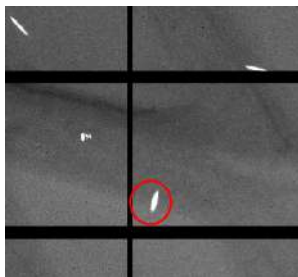


Fig. 25. – Exemple typique de diffraction diamant.

La présence de blobs parasites, issus de la diffraction des diamants eux-mêmes, vient encore compliquer la lecture. Ces taches ont souvent une orientation principale différente, mais peuvent localement interférer avec les taches utiles.

L'intensité des blobs décroît également de manière non uniforme sur l'image. Ce phénomène est lié à l'absorption différentielle du faisceau, qui dépend de l'épaisseur et de la densité du milieu traversé (échantillon, gaz de pression, cellule). Ce comportement suit généralement la loi de BEER-LAMBERT, exprimée par :

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu x} \quad (2)$$

où I est l'intensité transmise, I_0 l'intensité incidente, μ le coefficient d'absorption du matériau, et x la distance traversée. Il en résulte une perte de contraste sur les zones périphériques ou très absorbantes.

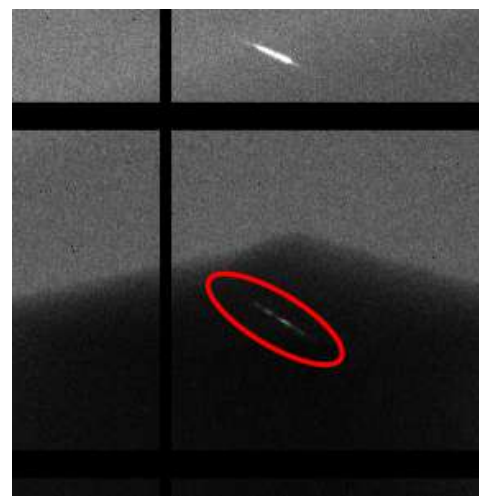


Fig. 26. – Atténuation nette de l'intensité d'un blob.

Enfin, la qualité d'acquisition est limitée par les caractéristiques du capteur CMOS utilisé. On observe notamment un bruit de fond diffus, des zones surexposées, et parfois des blobs trop faibles pour être détectés directement.

Tous ces effets rendent l'extraction directe des descripteurs des blobs (centre, forme, orientation, intensité) difficile, voire imprécise. Une phase de prétraitement robuste est donc indispensable pour exploiter les images. Celle-ci inclut le débruitage, le réhaussement de contraste, mais surtout la reconstruction des zones altérées ou masquées via des méthodes de type inpainting.

La [Fig. 27](#) synthétise le pipeline global du traitement. On y voit que l'image de diffraction brute subit d'abord une phase de débruitage et de restauration, avant l'extraction des paramètres des blobs, puis l'analyse physique du matériau.

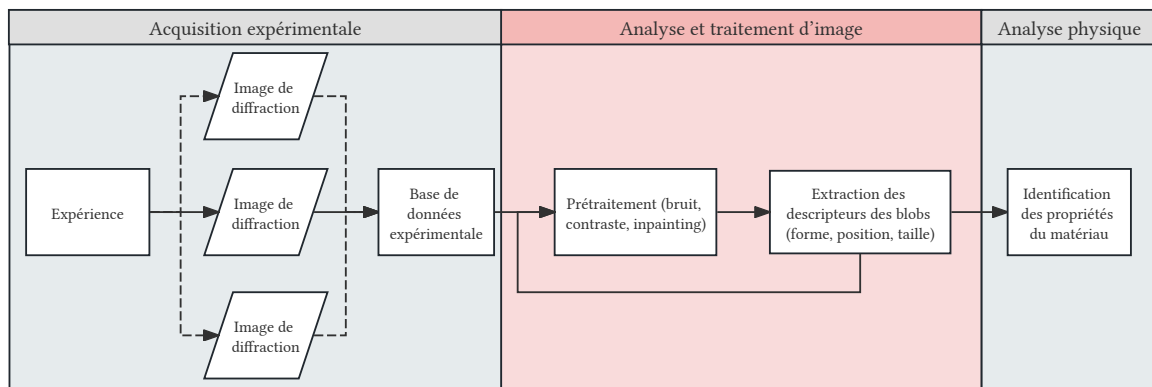


Fig. 27. – Pipeline générale du problème d'identification des blobs

VI / État de l'art

Nous allons voir les différentes méthodes d'état de l'art qui se séparent en méthode variationnelle et en méthode in-painting avec patch. Nous allons voir aussi leurs limites et les enjeux que cela induit.

VI - 1 / Méthode par diffusion anisotrope (EDP)

Les premières approches numériques de restauration d'image (ou inpainting) ont été inspirées des techniques utilisées par les restaurateurs de tableaux, consistant à prolonger les structures géométriques de l'image dans les zones détériorées (voir [Fig. 28](#)). Parmi ces méthodes, l'approche proposée par Bertalmio et al. (2000) est pionnière. Elle repose sur la formulation d'un problème de diffusion dirigée, à l'aide d'équations aux dérivées partielles (EDP).



Fig. 28. – Tableau inpainté à la main, « Cornélie, mère des Gracques » de J.Suvee [2]

VI - 1 . 1 / Objectif et cadre

L'image initiale est modélisée comme une fonction $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, définie sur un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ (donc l'image est un plan réel). La zone abîmée à reconstituer est une sous-région $D \subset \Omega$, tandis que le bord de cette zone, noté ∂D , contient les informations disponibles pour initier la restauration.

L'objectif est donc de prolonger l'information présente sur le bord ∂D à l'intérieur de D , de façon à maintenir la cohérence géométrique et visuelle de l'image. En particulier, on cherche à propager les isophotes (courbes de niveau constant) dans la direction naturelle de leur trajectoire.

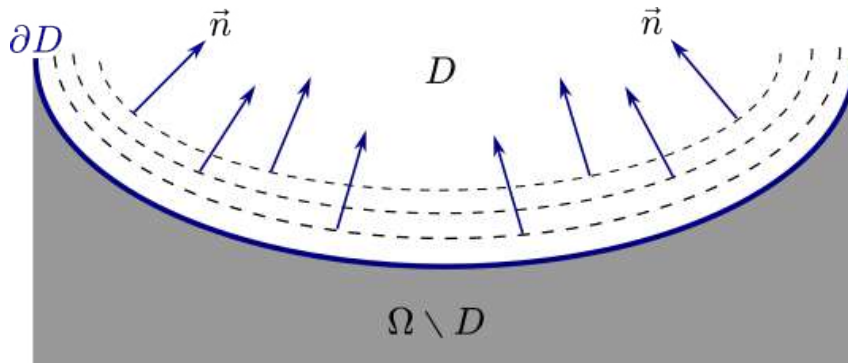


Fig. 29. – Direction de propagation \vec{n} à la frontière ∂D dans D

VI - 1 . 2 / Formulation mathématique : transport du Laplacien

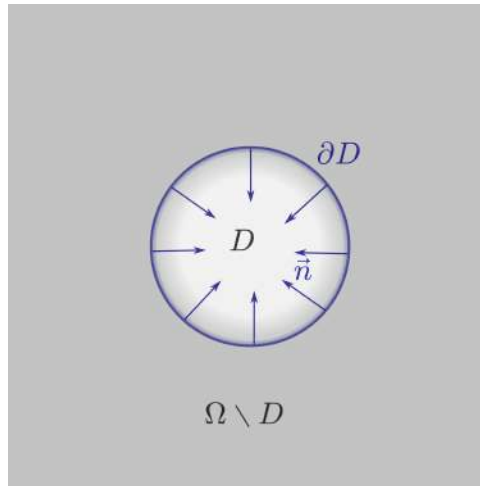
Le cœur de la méthode repose sur le transport du Laplacien de l'image Δu (mesure de la courbure locale) le long des isophotes :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla(\Delta u) \cdot \nabla^\perp u \quad (3)$$

où :

- ∇u est le gradient de l'image (direction de plus forte variation),
- $\nabla^\perp u = (-\partial_y u, -\partial_x u) = (-\partial_y u, -\partial_x u)$ est le vecteur orthogonal à ∇u , donc tangent aux isophotes,
- $\nabla(\Delta u)$ désigne le gradient du Laplacien, c'est-à-dire la direction dans laquelle la courbure varie le plus.

Ce modèle simule donc une évolution temporelle de l'image dans la région D , dans laquelle l'information est transportée selon la géométrie locale de la frontière différentielle D .


 Fig. 30. – Propagation de $\Omega \setminus D$ dans D

VI - 1 . 3 / Limites

Ces méthodes fonctionnent très bien pour des zones fines ou des structures géométriques simples (comme des traits, des bords ou des lignes de texte), mais leurs performances se dégradent dans des zones plus larges ou fortement texturées. Elles tendent alors à produire un lissage excessif et une perte de texture.

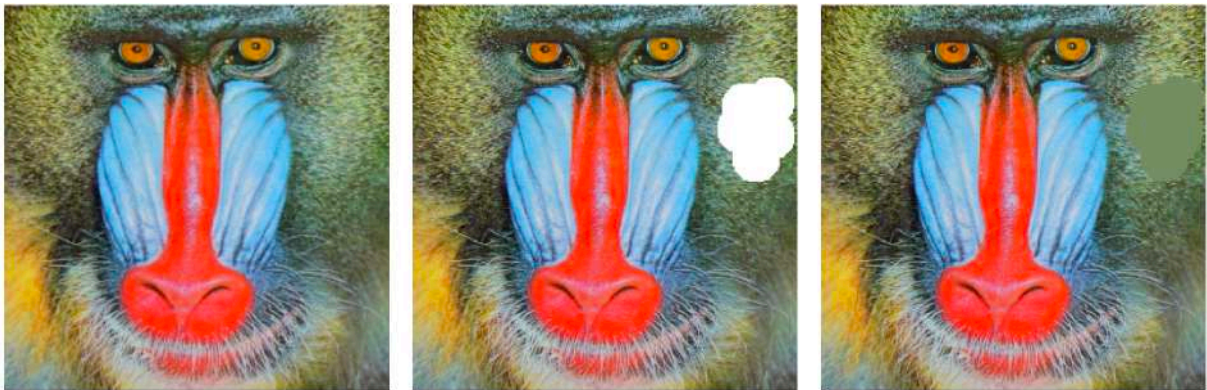


Fig. 31. – Inpainting avec approche EDP : impossibilité de reproduire des textures [2]

VI - 2 / Méthode d'Inpainting par patch

L'approche par patches constitue une avancée importante dans le domaine de l'inpainting. Contrairement aux méthodes locales fondées sur des **EDP**, cette classe de méthodes exploite la redondance des images : elle suppose que, dans une image naturelle, les motifs visuels se répètent à différents endroits. Cette propriété permet alors de remplir la zone abîmée en recopiant des morceaux similaires (patches) extraits des régions intactes.

VI - 2 . 1 / Principe général

On note $D \subset \Omega$ la région à restaurer (ou trou), et $\Omega \setminus D$ la partie connue de l'image. L'image est alors modélisée comme une fonction $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ (ou \mathbb{R}^3 dans le cas d'une image en couleur), et l'idée principale consiste à estimer chaque pixel de D en copiant un petit patch P centré autour d'un pixel connu, et le collant au bord du trou, dans une position jugée cohérente.

Un patch est typiquement une fenêtre carrée de taille $N \times N$, notée P_x lorsqu'elle est centrée au point $x \in \Omega \setminus D$, et P_y lorsqu'elle est partiellement connue au bord du trou $y \in \partial D$. Le but est de trouver,

pour chaque patch partiel P_y , le patch P_x connu le plus proche selon une métrique de similarité, généralement une distance euclidienne :

$$P_x^* = \arg \min_{P_x \in \Omega \setminus D} \|P_y - P_x\|^2 \quad (4)$$

Puis, les valeurs manquantes de P_y sont remplies à partir de celles de P_x^* . L'image est ainsi progressivement complétée, selon une stratégie d'ordre de remplissage (front actif, priorité, etc.).

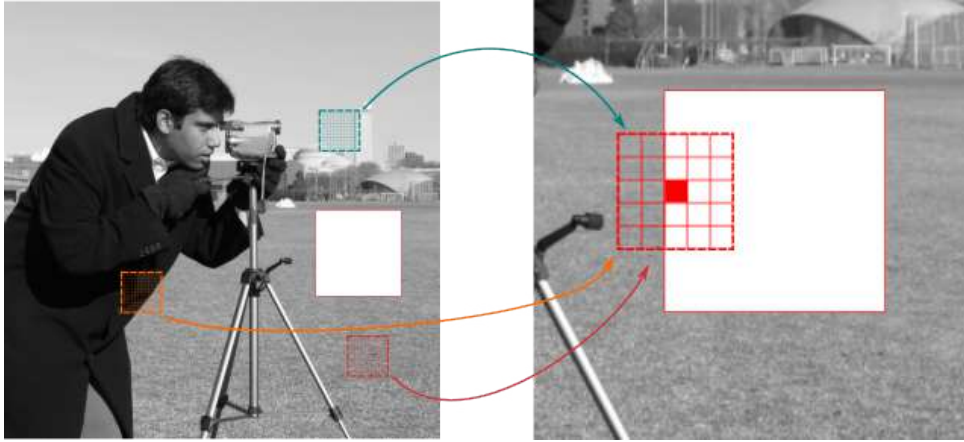


Fig. 32. – Illustration du principe général d'inpainting par patches.

Des zones connues de l'image sont explorées pour rechercher des motifs similaires à la région partiellement visible en bordure du masque. Les meilleurs patches sont utilisés pour reconstruire les zones manquantes par copie des pixels correspondants.

VI - 2 . 2 / Méthode de CRIMINISI ET AL. (2004)

L'article de CRIMINISI ET AL. a profondément marqué cette approche en introduisant un mécanisme de priorité dans le choix des pixels à remplir. L'ordre de remplissage repose sur deux points :

- **Confiance $C(p)$** : mesure la quantité d'informations connues dans le patch centré sur p , initialisée à 1 sur $\Omega \setminus D$ et 0 sur D . Plus un patch contient de pixels connus, plus on peut lui faire confiance.
- **Données $D(p)$** : mesure l'alignement du gradient local avec la normale au bord du trou. Elle favorise les pixels où les structures (contours) sont en cours de propagation.

La priorité totale d'un pixel p est donc définie comme :

$$P(p) = C(p) \cdot D(p) \quad (5)$$

Cette priorité permet de sélectionner en premier les zones à fort contenu structurel, où les isophotes doivent être prolongées, puis de terminer par les textures homogènes. Une fois l'ordre défini, les valeurs manquantes sont remplies par transfert de patch, selon la distance de similarité évoquée plus haut.

VI - 2 . 3 / Avantages et limites

Les méthodes de reconstruction par patches présentent un atout majeur : elles sont capables de préserver les textures complexes et les détails fins de l'image, en allant chercher directement dans les motifs présents ailleurs dans la partie visible. Cela leur permet de reconstituer des zones étendues ou des structures répétitives.

Néanmoins, ces méthodes restent très dépendantes de la richesse de l'image de départ. Si le motif recherché n'existe pas déjà dans la partie non masquée, la reconstruction échoue ou génère des artefacts : on voit alors apparaître des collages visibles, des motifs répétitifs ou un manque de variété

dans la texture. Enfin, ce type de méthode reste assez sensible au bruit, et sa complexité algorithmique augmente fortement avec la taille des zones à compléter.



Fig. 33. – Image à reconstruire



Fig. 34. – Image reconstruite par patch

VII / Formulation de la problématique

Ce travail vise à développer une méthode robuste de reconstruction de blobs partiellement visibles dans des images de diffraction, en se concentrant sur la restitution de leur forme, intensité et position.

Les méthodes classiques de type diffusion, bien que très rapides et peu coûteuses, reposent sur l'hypothèse d'une continuité locale du signal, ce qui les rend peu efficaces dès que les structures à reconstruire sont fortement localisées ou non homogènes.

Pour dépasser ces limites, nous choisissons ici une approche fondée sur la décomposition en modes principaux (POD/PCA). Cette méthode consiste à apprendre une base modale directement à partir d'un ensemble de blobs d'entraînement représentatifs, puis à projeter les observations partielles sur cette base pour reconstruire les parties manquantes.

L'enjeu de ce travail est d'évaluer les performances de cette approche sur des données expérimentales : capacité à reconstruire fidèlement les blobs, robustesse face au bruit et aux artefacts. Le but est d'identifier si cette stratégie constitue un compromis pertinent pour la reconstruction de blobs en conditions réelles.

VIII / Ma contribution

VIII - 1 / Reconstruction par décomposition POD

La décomposition orthogonale propre (POD, *Proper Orthogonal Decomposition*) est une méthode classique de réduction de dimension, permettant d'extraire les structures dominantes d'un ensemble de données corrélées. Dans le cas qui nous intéresse, les données sont des patches contenant des blobs issus de figures de diffraction. L'idée est d'utiliser ces exemples connus pour reconstruire une version complète d'un blob partiellement observé, par projection sur une base modale apprise.

VIII - 2 / Principe de la méthode

La POD consiste à représenter chaque image comme une combinaison linéaire de modes principaux, obtenus par analyse en composantes principales (ACP ou SVD). On note $U \in \mathbb{R}^{d \times N}$ la matrice contenant les N observations u_i vectorisées en colonnes.

En notant \bar{u} la moyenne empirique, la matrice centrée $\tilde{U} = U - \bar{u}$ est factorisée sous forme :

$$\tilde{U} = V \Sigma W^T \quad (6)$$

où V contient les modes POD, Σ les valeurs singulières et W les coefficients projetés. Chaque image vectorisée u_i peut alors être approchée comme une combinaison linéaire des modes :

$$u_i = \bar{u} + \sum_{k=1}^r x_i^{(k)} \phi_k, \quad \text{avec } x_i^{(k)} = \langle u_i - \bar{u}, \phi_k \rangle \quad (7)$$

avec ϕ_k les modes et $x_i^{(k)}$ les coefficients associés.

Cependant, dans notre contexte, les données d'entrée sont partiellement masquées. Cela interdit une projection directe, car certaines composantes de u_i sont inconnues. On reformule donc l'estimation des coefficients comme un problème de moindres carrés restreint aux pixels observés.

Soit $\Omega \subset \{1, 2, \dots, d\}$ l'ensemble des indices des pixels observés. On note alors :

- $u_\Omega \in \mathbb{R}^{|\Omega|}$: le vecteur u restreint aux composantes observées.
- $\Phi_\Omega \in \mathbb{R}^{|\Omega| \times r}$ la matrice des modes restreinte aux lignes de Ω .

On cherche donc x le vecteur des coefficients associés aux différents modes comme :

$$x = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^r} \|\Phi_\Omega x - (u_\Omega - \bar{u}_\Omega)\|_2^2 \quad (8)$$

Cela revient donc à résoudre un problème au moindre carrés de la forme :

$$x^* = \arg \min_x \|Ax - y\|^2 \quad (9)$$

Ce problème admet une solution par moindres carrés classique :

$$x = (A^T A)^{-1} A^T y \quad (10)$$

si $(A^T A)$ est inversible, ce qui est le cas si :

- Les modes sont linéairement indépendants,
- Et $|\Omega| \geq r$, c'est-à-dire qu'on observe au moins autant de pixels que de modes utilisés.

On peut aussi ajouter une régularisation (par exemple Ridge) pour stabiliser la solution :

$$x = (A^T A + \lambda I)^{-1} A^T y \quad (11)$$

Le problème admet donc une solution analytique :

$$\mathbf{x} = (\Phi_{\Omega}^T \Phi_{\Omega})^{-1} \Phi_{\Omega}^T (\mathbf{u}_{\Omega} - \bar{\mathbf{u}}_{\Omega}) \quad (12)$$

$$\mathbf{x} = (\Phi_{\Omega}^T \Phi_{\Omega} + \lambda I)^{-1} \Phi_{\Omega}^T (\mathbf{u}_{\Omega} - \bar{\mathbf{u}}_{\Omega}) \quad (13)$$

Le pipeline de reconstruction est illustré en [Fig. 35](#) : une base de blobs entiers est utilisée pour apprendre les modes, et un patch masqué est reconstruit par projection sur cet espace réduit.

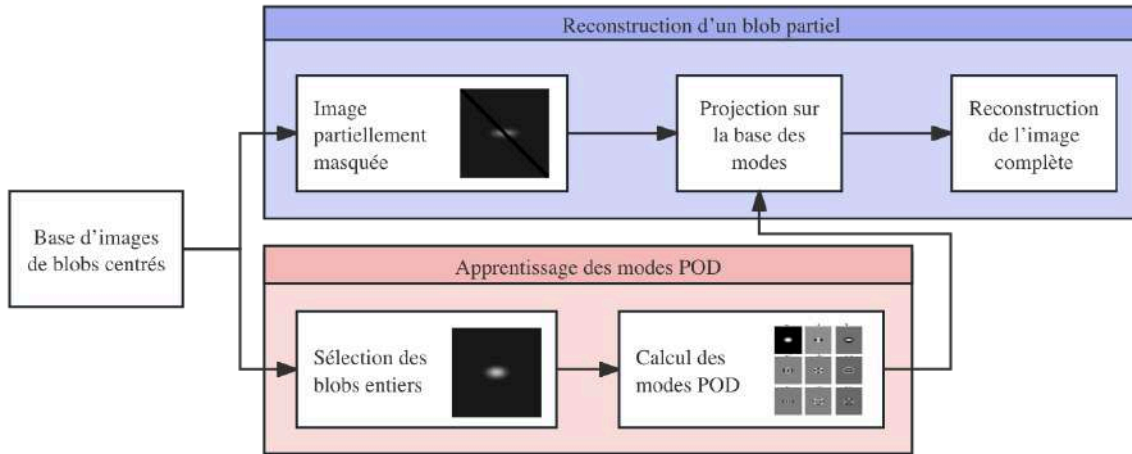


Fig. 35. – Pipeline de la méthode POD / PCA

VIII - 3 / Analyse des modes

Les modes POD extraits à partir de la base d'apprentissage sont représentés en [Fig. 36](#). On observe que les premiers modes capturent la forme globale du blob (elliptique, centré), tandis que les suivants affinent des détails plus fins.

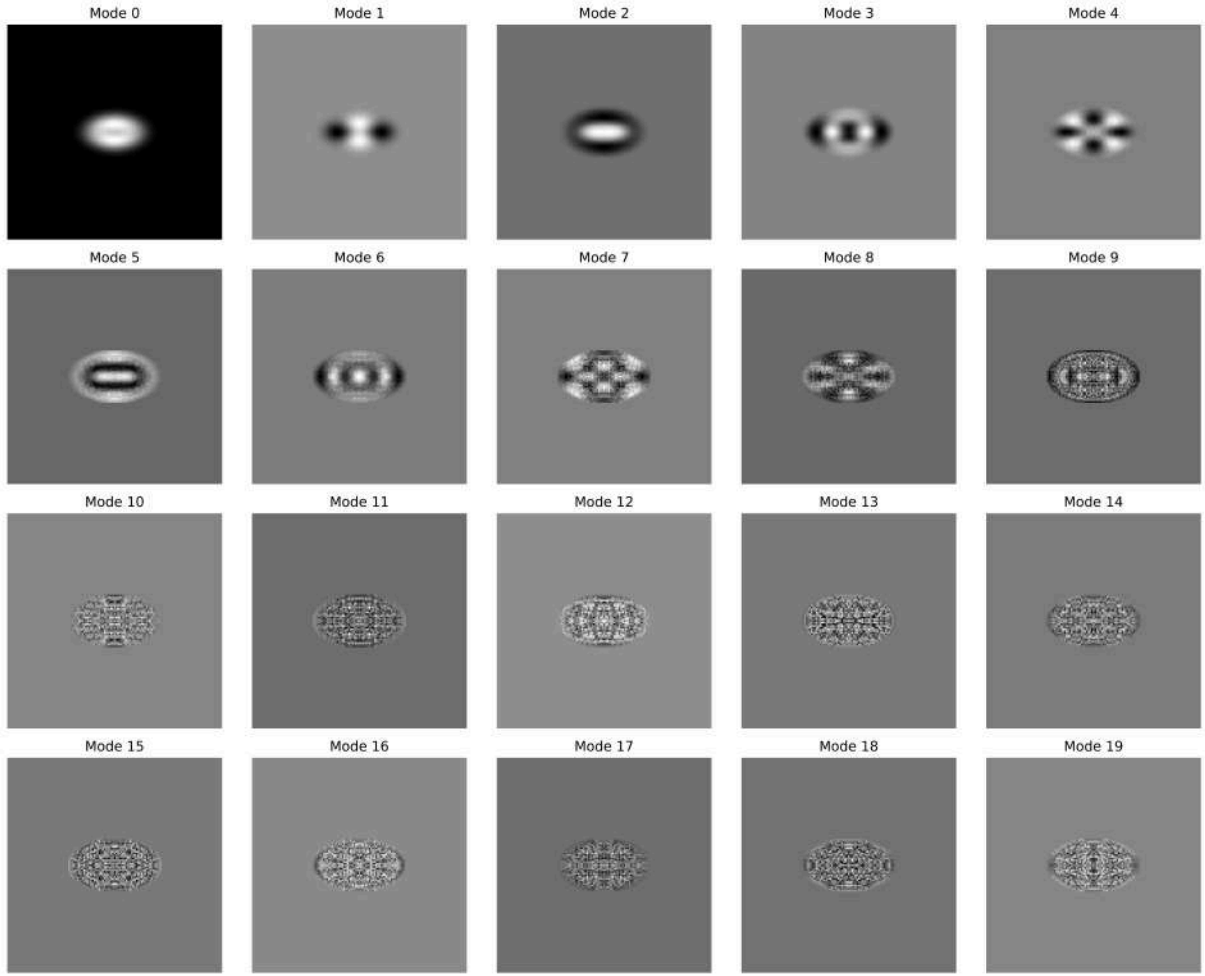


Fig. 36. – Visualisation des différents modes

Les valeurs singulières σ_i (diagonale de Σ) donnent une mesure de l'énergie ou variance portée par chaque mode. L'énergie relative du mode i est donnée par :

$$E_i = \frac{\sigma_i^2}{\sum_j \sigma_j^2} \quad (14)$$

Cela permet d'évaluer la pertinence des modes dominants dans la reconstruction.

La [Fig. 37](#) montre la décroissance rapide de l'énergie contenue dans chaque mode, justifiant l'hypothèse de faible rang.

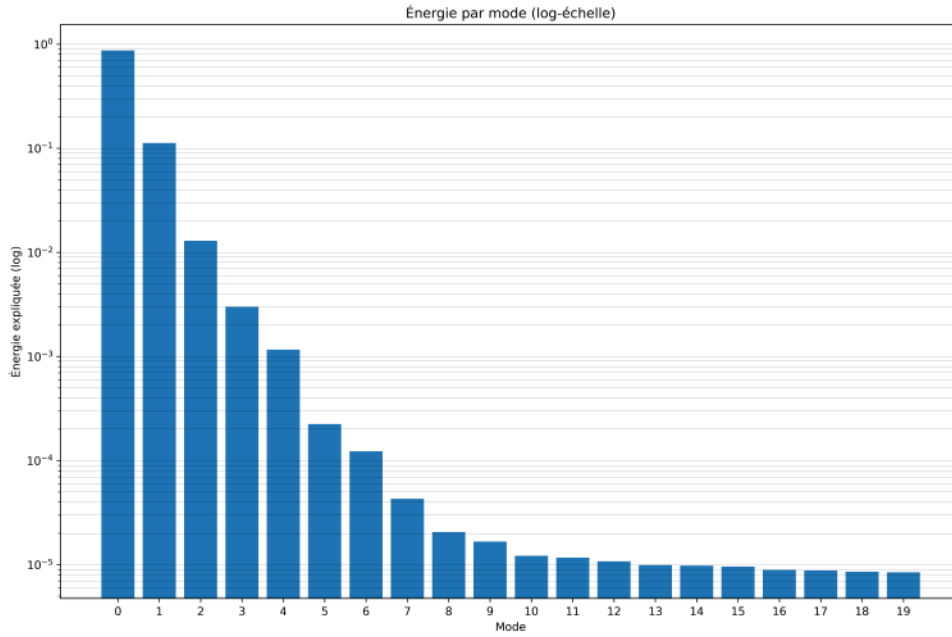


Fig. 37. – Énergie contenue par mode

VIII - 4 / Mesures de qualité de reconstruction

Pour évaluer la qualité des reconstructions obtenues, nous utilisons trois métriques classiques : MSE, PSNR et SSIM.

- **Erreur quadratique moyenne (MSE) :**

L'erreur quadratique moyenne mesure la différence moyenne au carré entre les pixels de l'image originale I et de l'image reconstruite \hat{I} :

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{x,y} (I_{x,y} - \hat{I}_{x,y})^2 \quad (15)$$

Plus la MSE est faible, meilleure est la reconstruction.

- **Rapport signal sur bruit de pic (PSNR) :**

Le PSNR traduit la qualité de la reconstruction en décibels :

$$\text{PSNR} = 10 \cdot \log_{10} \left(\frac{\text{MAX}^2}{\text{MSE}} \right) \quad (16)$$

où MAX est la valeur maximale possible d'un pixel (par exemple 255). Plus le PSNR est élevé, meilleure est la qualité de la reconstruction.

- **Indice de similarité structurelle (SSIM) :**

Le SSIM évalue la similarité locale entre deux images, en tenant compte de la luminance, du contraste et de la structure.

$$\text{SSIM}(I, \hat{I}) = \frac{(2\mu_I\mu_{\hat{I}} + c_1)(2\sigma_{I,\hat{I}} + c_2)}{(\mu_I^2 + \mu_{\hat{I}}^2 + c_1)(\sigma_I^2\sigma_{\hat{I}}^2 + c_2)} \quad (17)$$

où μ , σ^2 , et $\sigma_{I,\hat{I}}$ désignent respectivement la moyenne, la variance et la covariance locale, c_1 , c_2 des constantes de stabilisation. Le SSIM varie de 0 (aucune similarité) à 1 (identité parfaite).

VIII - 5 / Résultats : cas de blob centré

Lorsque le blob est bien centré dans le patch d'entrée, la reconstruction fonctionne de manière satisfaisante, comme le montre la [Fig. 38](#). La méthode permet de restituer la forme et l'intensité du blob malgré un masque transversal. Cette situation valide les hypothèses classiques : données alignées, bruit faible, blob contenu dans la fenêtre.

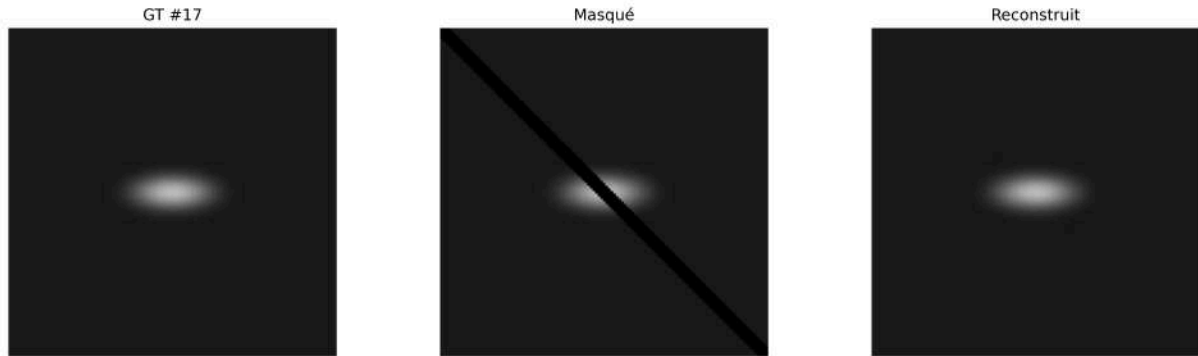


Fig. 38. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué

MSE (full)	PSNR (full) dB	SSIM (full)	MSE (masked)	PSNR (masked) bB	SSIM (masked)
0.001 ± 0.000	78.122 ± 0.796	1.000 ± 0.000	0.019 ± 0.003	65.476 ± 0.796	1.000 ± 0.000

Tableau 1. – Métriques de reconstruction pour le cas de blobs centrés

Ces résultats montrent que dans le cas favorable d'un blob parfaitement centré, le modèle basé sur la POD est capable de reconstituer la forme et l'intensité du blob de manière très fiable, y compris à travers le masque. Cela valide la pertinence de la méthode lorsque les hypothèses de base (alignement, centrage, bruit faible) sont respectées.

VIII - 6 / Problème en cas de décentrage

En pratique, cette hypothèse est rarement vérifiée. Si le blob est partiellement masqué de manière non symétrique, le calcul du centre de masse devient biaisé, ce qui conduit à une fenêtre mal centrée sur la structure à reconstruire. Le modèle POD reconstruit alors une version “moyenne” mal positionnée ou déformée dans certains cas (voir [Fig. 39](#), [Fig. 41](#)).

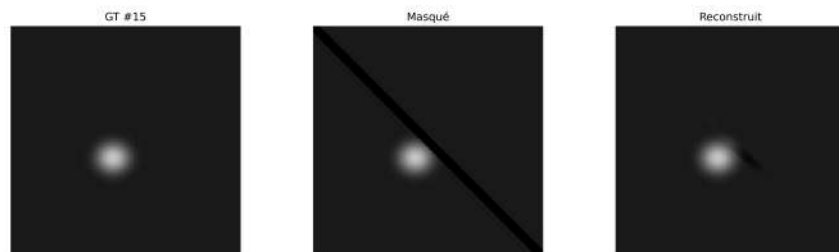


Fig. 39. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué et décentré

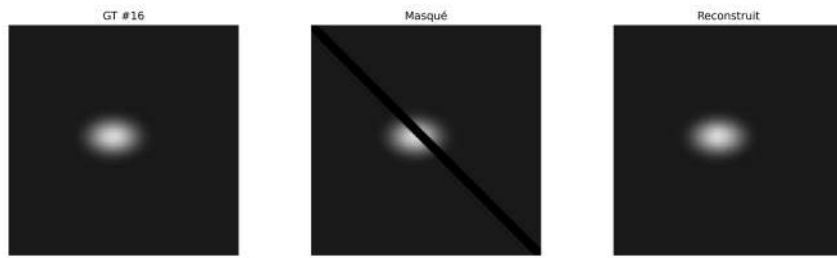


Fig. 40. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué et décentré

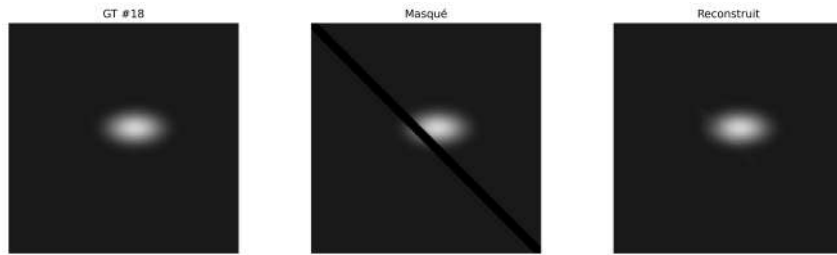


Fig. 41. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué et décentré

Quand les blobs ne sont plus centrés, les modes extraits deviennent nettement moins structurés ([Fig. 42](#)), avec une perte de symétrie et des motifs complexes. Contrairement au cas centré où l'énergie est concentrée sur les premiers modes ([Fig. 37](#)), ici l'énergie décroît plus lentement ([Fig. 43](#)), traduisant une base moins efficace.

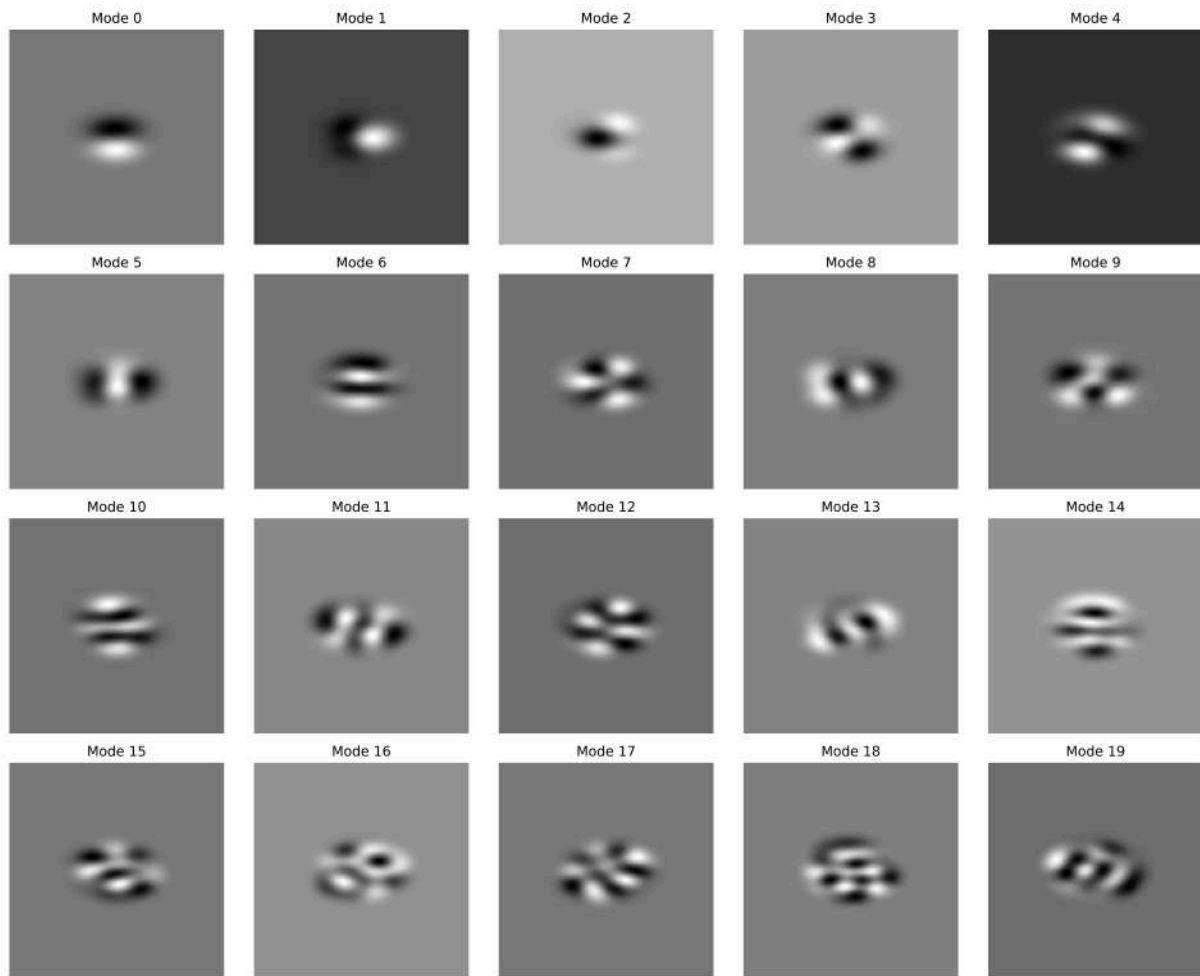


Fig. 42. – Visualisation des différents modes (blobs décentrés)

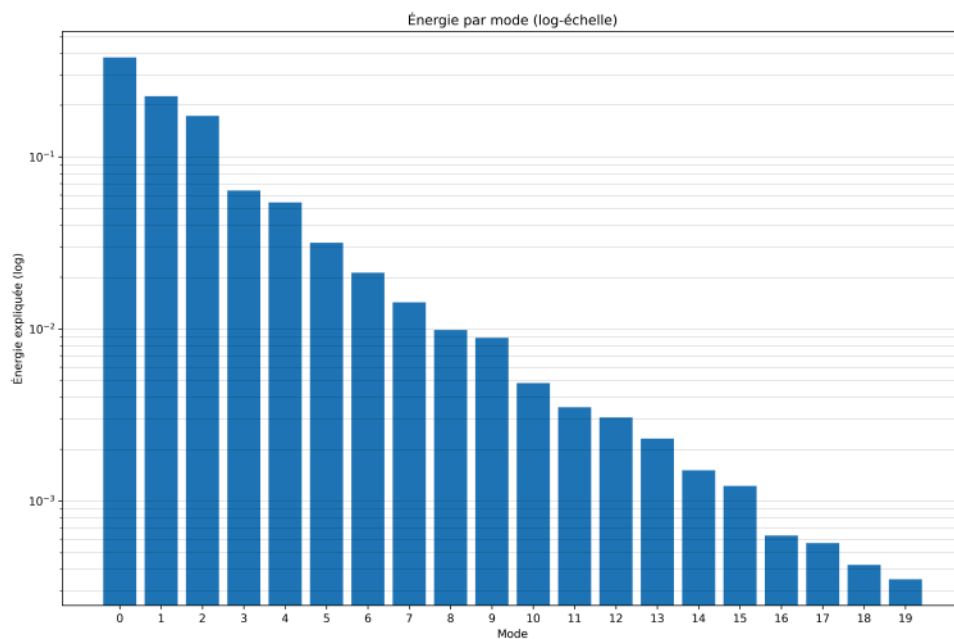


Fig. 43. – Énergie contenue par mode (blobs décentrés)

La reconstruction devient moins fidèle, avec des images plus diffuses ou déformées, et les mesures (PSNR, SSIM) chutent, surtout dans la zone masquée. Cela confirme que le bon centrage des blobs est nécessaire pour l'efficacité de la méthode POD.

MSE (full)	PSNR (full) dB	SSIM (full)	MSE (masked)	PSNR (masked) dB	SSIM (masked)
0.133 ± 0.216	59.600 ± 4.460	1.000 ± 0.001	2.446 ± 3.967	46.954 ± 4.460	1.000 ± 0.001

Tableau 2. – Métriques de reconstruction pour le cas de blobs décentrés

VIII - 7 / Régularisation Ridge

Pour améliorer la reconstruction dans le cas de blobs décentrés et partiellement masqués, nous avons introduit une régularisation Ridge lors de l'estimation des coefficients de projection, en ajoutant un terme de pénalisation $\lambda \|x\|^2$ dans la minimisation. Cette régularisation a pour but de limiter la sur-adaptation aux données manquantes ou bruitées et à stabiliser la solution.

• Cas où $\lambda = 10$

Pour une régularisation forte, la reconstruction devient plus lisse mais moins fidèle (Fig. 44, Fig. 45, Fig. 46), et la performance chute nettement (PSNR, SSIM et MSE se dégradent, en particulier sur les zones masquées). On sur-régularise et donc la solution qui est trop contrainte ne permet plus de restituer les détails du blob.

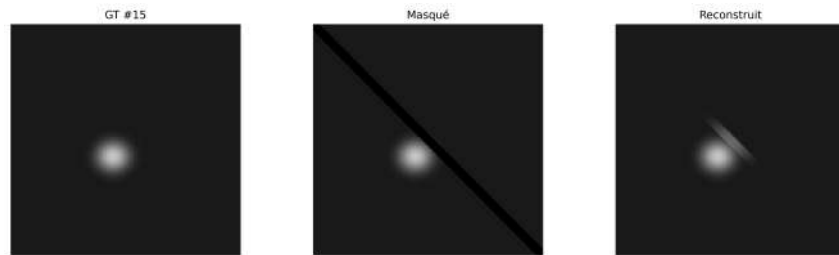


Fig. 44. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué et décentré (avec régularisation Ridge, $\lambda = 10$)

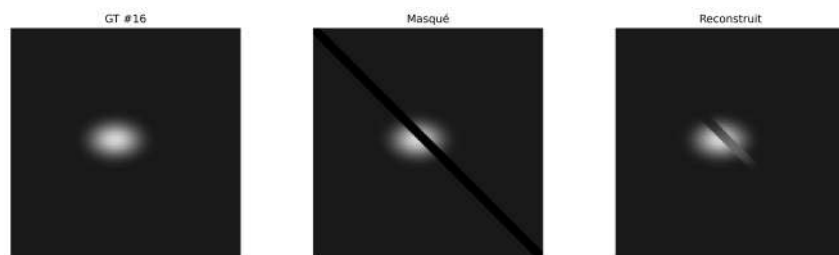


Fig. 45. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué et décentré (avec régularisation Ridge, $\lambda = 10$)

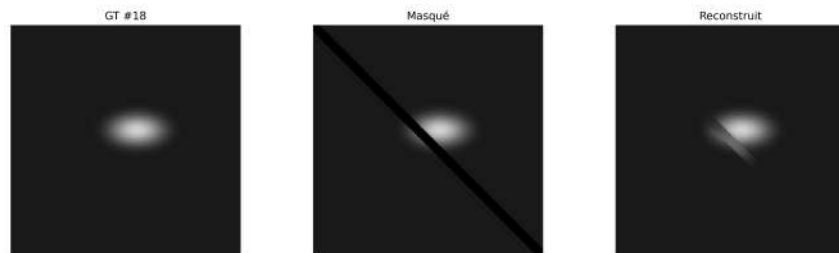


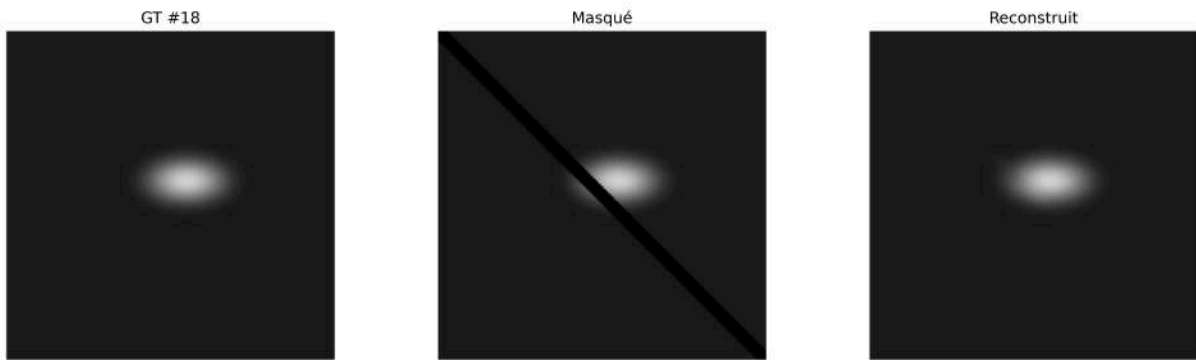
Fig. 46. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué et décentré (avec régularisation Ridge, $\lambda = 10$)

MSE (full)	PSNR (full) dB	SSIM (full)	MSE (masked)	PSNR (masked) dB	SSIM (masked)
21.452 ± 13.972	35.694 ± 2.869	0.986 ± 0.005	394.532 ± 256.960	23.048 ± 2.869	0.987 ± 0.005

Tableau 3. – Métriques de reconstruction pour le cas de blobs décentrés, $\lambda = 10$

• Cas où $\lambda = 0,001$

Pour une régularisation faible, la performance se rapproche du cas sans régularisation, voire s'améliore légèrement. On observe que le PSNR et le SSIM sur les zones masquées augmentent de façon marginale, sans perte de structure sur le blob reconstruit. L'apport est donc limité mais peut permettre de stabiliser la reconstruction en cas de masque complexe ou d'incertitude accrue.

Fig. 47. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué et décentré (avec régularisation Ridge, $\lambda = 0,001$)

MSE (full)	PSNR (full) dB	SSIM (full)	MSE (masked)	PSNR (masked) dB	SSIM (masked)
0.133 ± 0.215	59.628 ± 4.477	1.000 ± 0.001	2.439 ± 3.951	46.982 ± 4.477	1.000 ± 0.001

Tableau 4. – Métriques de reconstruction pour le cas de blobs décentrés, $\lambda = 0,001$

En résumé, une régularisation Ridge modérée permet de légèrement améliorer la reconstruction, mais un λ trop élevé détériore fortement la qualité. Le gain reste faible dans la plupart des cas, ce qui montre que le problème principal est bien le centrage, et non le sur-apprentissage aux données manquantes.

VIII - 8 / Recentrage itératif du blob par centre de masse

Dans les conditions expérimentales usuelles, les blobs ne sont que rarement centrés parfaitement dans les fenêtres d'extraction. Ce décentrage nuit fortement à la reconstruction par POD, qui suppose des entrées alignées dans une base orthogonale fixe. Pour corriger ce biais, nous proposons un centrage itératif basé sur le calcul du centre de masse lumineux du patch.

Soit $I(x, y)$ l'intensité de l'image sur un patch donné. Le centre de masse (x_c, y_c) est défini par :

$$x_c = \frac{\sum_{x,y} x \cdot I(x, y)}{\sum_{x,y} I(x, y)}, \quad y_c = \frac{\sum_{x,y} y \cdot I(x, y)}{\sum_{x,y} I(x, y)} \quad (18)$$

L'idée serait, à chaque itération, de recalculer le patch en utilisant par exemple le centre de masse ou une mesure d'intensité, puis de ré-appliquer la reconstruction POD jusqu'à convergence ou stabilisation du centre estimé (Fig. 48).

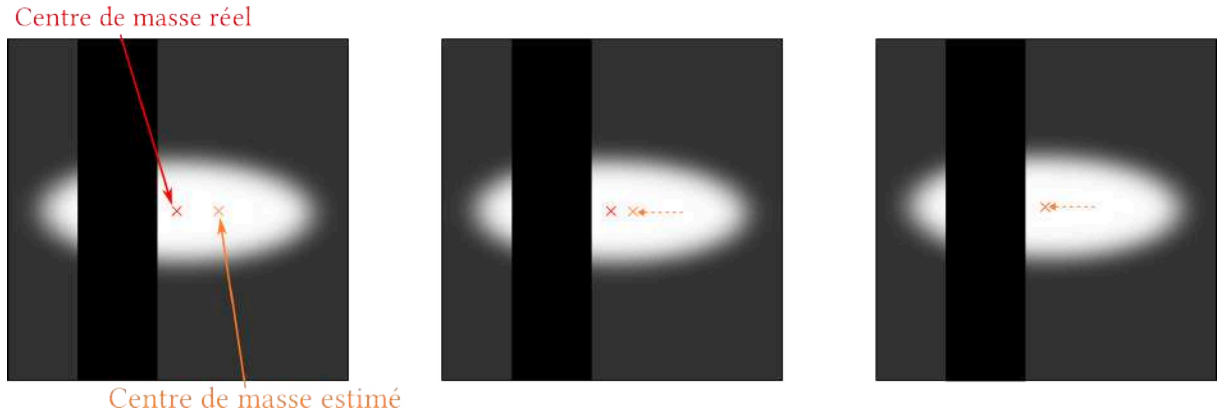


Fig. 48. – Schéma du recentrage itératif (de gauche à droite)

IX / Résultat sur image expérimentale

Dans cette dernière partie, nous testons notre méthode de reconstruction **POD** sur des données expérimentales réelles issues d'une image de diffraction obtenue lors du travail de recherche. Contrairement aux données synthétiques, ces images présentent des artefacts, du bruit, des tailles et orientations de blobs variées, ainsi qu'une qualité parfois inégale due aux conditions expérimentales ([Fig. 49](#)).

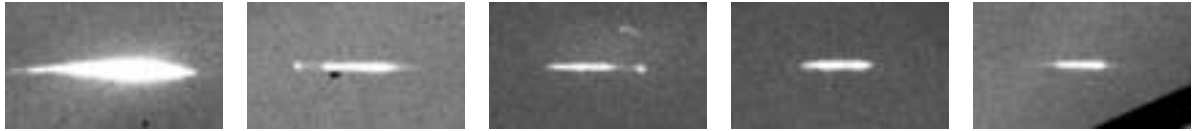


Fig. 49. – Les différents blobs réels

IX - 1 / Constitution de la base d'apprentissage POD

Pour constituer la base POD, nous avons extrait manuellement plusieurs blobs bien visibles et relativement isolés à partir de l'image originale. Afin de garantir la cohérence de la base, chaque blob a été soigneusement recadré, centré, et orienté de façon homogène à l'aide d'un logiciel de traitement d'image (Inkscape), de manière à ce que les variations spatiales principales correspondent aux directions physiques attendues.

IX - 2 / Reconstruction sur des cas réels masqués

Deux blobs partiellement masqués sont sélectionnés comme cas tests pour la reconstruction ([Fig. 50](#)). Pour simuler des défauts ou pertes de données, les zones d'intensité nulle ou très faible, ainsi que les zones masquées par des artefacts, sont considérées comme manquantes.



Fig. 50. – Les différents blobs partiels réels à reconstruire

Nous appliquons notre méthode POD apprise sur la base réelle. D'abord, un masque classique est utilisé, où tous les pixels inférieurs à un certain seuil d'intensité sont considérés comme manquants.

- La visualisation des modes extraits ([Fig. 51](#)) montre que, contrairement aux données simulées, l'information utile est ici répartie sur peu de modes, et la base POD capte la variabilité dominante liée à la forme du blob mais aussi le bruit.

- La distribution d'énergie par mode (Fig. 52) confirme qu'il n'y a que 4-5 modes significatifs, le reste étant dominé par du bruit ou des détails fins.

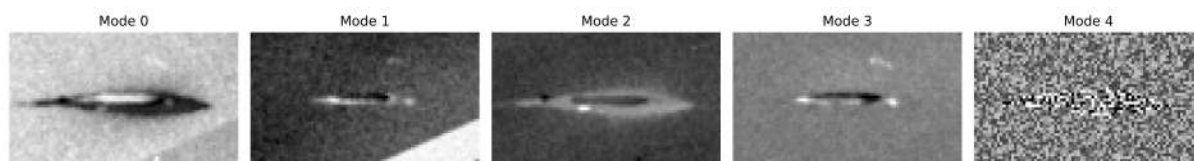


Fig. 51. – Visualisation des différents modes (blobs réels)

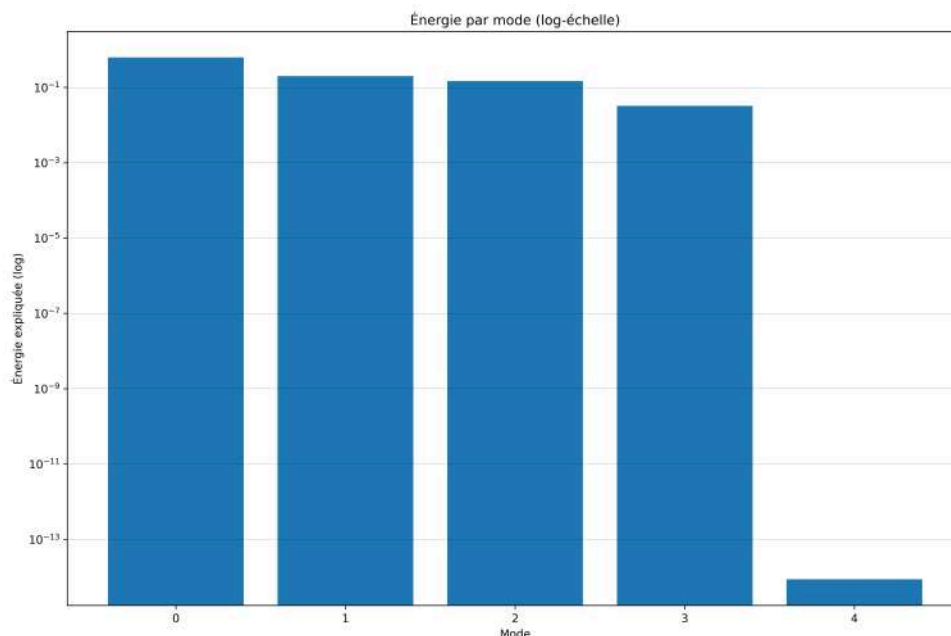


Fig. 52. – Énergie contenue par mode (blobs réels)

IX - 3 / Premiers résultats de reconstruction

Les résultats obtenus (Fig. 53, Fig. 54) montrent que :

- La reconstruction est globalement correcte pour les zones où l'information de la base est présente.
- Cependant, le masque binaire (seuil à 0) est trop brutal : il crée des artefacts à la frontière des zones masquées, avec une interpolation parfois peu réaliste.
- Sur les régions fortement bruitées ou partiellement masquées, la méthode est limitée par la faible diversité de la base POD et par la difficulté d'aligner parfaitement les blobs.

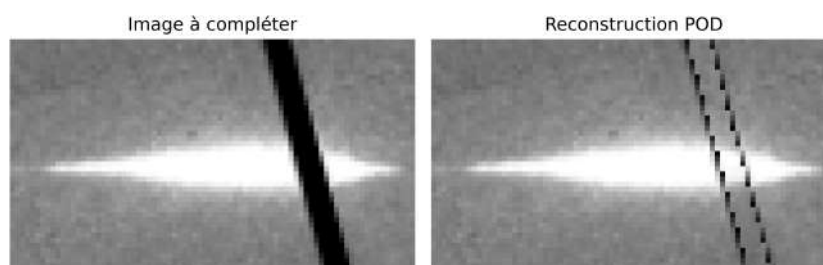


Fig. 53. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué réel

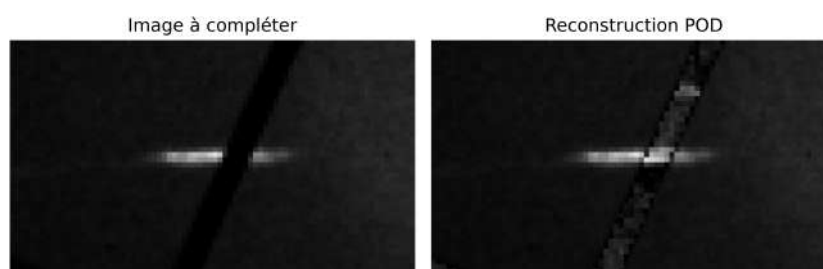


Fig. 54. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué réel

IX - 4 / Masque adaptatif et interpolation douce

Pour améliorer le traitement des zones d'incertitude, nous avons testé un masque adaptatif basé sur les quantiles d'intensité (ici, 40%, [Fig. 55](#) et [Fig. 56](#)). Cette approche permet de mieux gérer la transition entre le bruit de fond et les zones à reconstruire : la frontière du masque est plus floue et la reconstruction plus réaliste, surtout lorsque le signal est faible ou bruité.

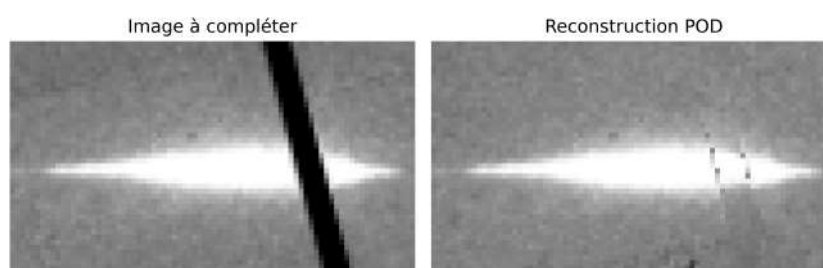


Fig. 55. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué réel (avec quantile de 40%)

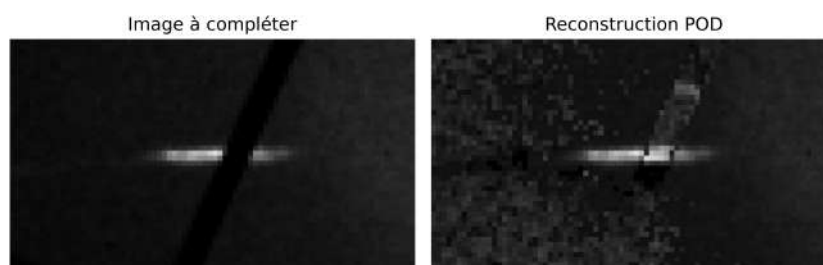


Fig. 56. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué réel (avec quantile de 40%)

IX - 5 / Effet de la régularisation

Enfin, l'effet de la régularisation Ridge est évalué ([Fig. 57](#), [Fig. 58](#)), avec la valeur du paramètre λ obtenue lors de la validation sur données simulées. On observe que la régularisation permet de limiter l'« overfitting » au bruit présent dans les images réelles, et stabilise la reconstruction sur les zones masquées étendues, sans pour autant totalement corriger les défauts liés à l'alignement ou à la taille réduite de la base POD.

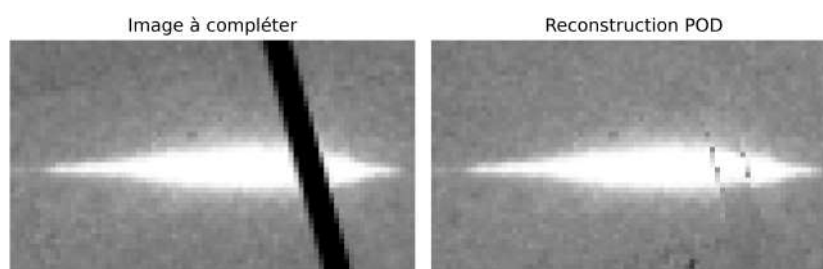


Fig. 57. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué réel (avec régularisation Ridge, $\lambda = 0,001$)

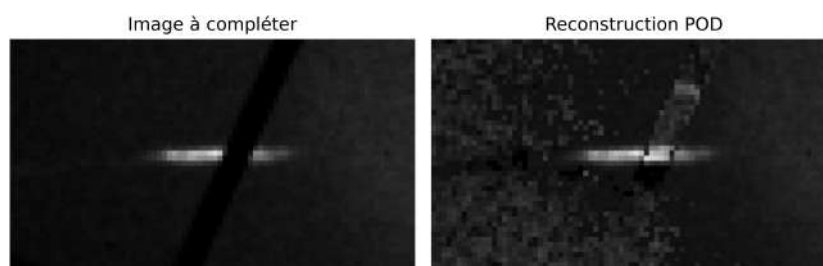


Fig. 58. – Reconstruction d'un blob partiellement masqué réel (avec régularisation Ridge, $\lambda = 0,001$)

IX - 6 / Conclusion de la partie expérimentale

La méthode POD fonctionne correctement pour reconstruire les blobs expérimentaux dès lors que la base contient des structures similaires et bien alignées. Les principaux verrous résident dans l'alignement spatial, la gestion du bruit et la taille réduite de la base d'apprentissage. Un masque adaptatif (par quantile) améliore sensiblement la qualité de la reconstruction par rapport à un masque binaire strict. La régularisation améliore légèrement la robustesse, surtout sur les images bruitées ou partiellement masquées, mais n'a pas d'effet majeur si le nombre de modes utiles est déjà faible.

Une piste naturelle d'amélioration consisterait à automatiser le recentrage et l'alignement des blobs par une procédure itérative, par exemple via une détection automatique du centre de masse et une recentrage avant projection POD. D'autres méthodes de régularisation, ou l'apprentissage de bases non linéaires (autoencodeurs), pourraient également être envisagées pour dépasser les limitations observées sur ces données réelles.

X / Bibliographie

- [1] Robin Fréville. Transitions de phase et microstructures induites dans les métaux en conditions extrêmes : fer et étain. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université Paris-Saclay, 2023. Français. ⟨NNT : 2023UPASP133⟩. ⟨tel-04499904⟩
- [2] Cours Master 2 ATSI, Méthodes par patchs pour la photographie computationnelle :Image and video inpainting, Yann Gousseau.
- [3] A Qualitative Report on Diffusion based Image Inpainting Models, Gamini Sridevi and Srinivas Kumar
- [4] Image Inpainting, Bertalmio et al.
- [5] PatchMatch: A Randomized Correspondence Algorithm for Structural Image Editing, Barnes et al.
- [6] A Generalized Laplacian of Gaussian Filter for Blob Detection and Its Applications, Hui Kong, Hatice Cinar Akakin, and Sanjay E. Sarma
- [7] A fast methodology to determine the characteristics of thousands of grains using three-dimensional X-ray diffraction. I. Overlapping diffraction peaks and parameters of the experimental setup, Hemant Sharma, Richard M. Huizenga and S. Erik Offerman