

Approche inverse pour la restauration de l'information cristallographique

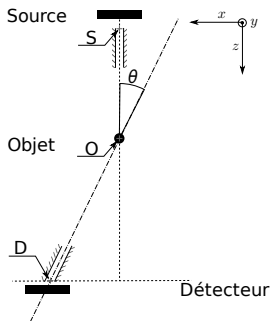
Ferréol Soulez

INSA CNDRI, Centre de Quantimétrie Lyon 1



Principe

Diffraction des rayons X



Diffraction d'une poudre cristalline :

Loi de Bragg

$$2n d_{(hkl)} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \lambda$$

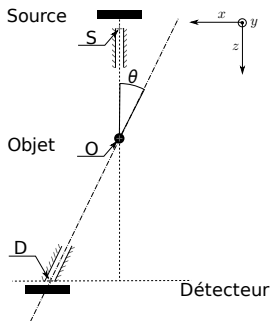
- $d_{(hkl)}$ distance inter-réticulaire (caractéristique du cristal),
- n entier.

En théorie : on observe des photons que pour des couples (λ, θ) correspondant aux caractéristiques du cristal.

Applications : Spectrographie

- Variation de θ (ADXRD), λ fixe, rotation du détecteur.
- Variation de λ (EDXRD), détecteur résolu en énergie.

Diffraction des rayons X



Diffraction d'une poudre cristalline :

Loi de Bragg

$$2n d_{(hkl)} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \lambda$$

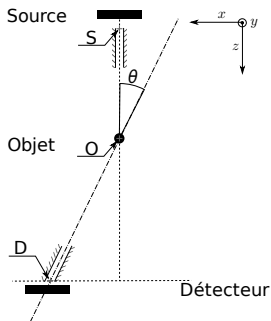
- $d_{(hkl)}$ distance inter-réticulaire (caractéristique du cristal),
- n entier.

En théorie : on observe des photons que pour des couples (λ, θ) correspondant aux caractéristiques du cristal.

Applications : Spectrographie

- Variation de θ (ADXRD), λ fixe, rotation du détecteur.
- Variation de λ (EDXRD), détecteur résolu en énergie.

Diffraction des rayons X



Diffraction d'une poudre cristalline :

Loi de Bragg

$$2n d_{(hkl)} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \lambda$$

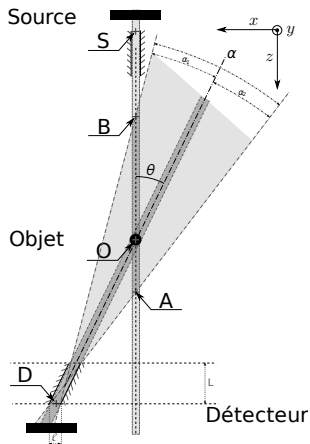
- $d_{(hkl)}$ distance inter-réticulaire (caractéristique du cristal),
- n entier.

En théorie : on observe des photons que pour des couples (λ, θ) correspondant aux caractéristiques du cristal.

Applications : Spectrographie

- Variation de θ (ADXRD), λ fixe, rotation du détecteur.
- Variation de λ (EDXRD), détecteur résolu en énergie.

Energy Dispersive X Ray Diffraction



Ouverture angulaire des collimateurs

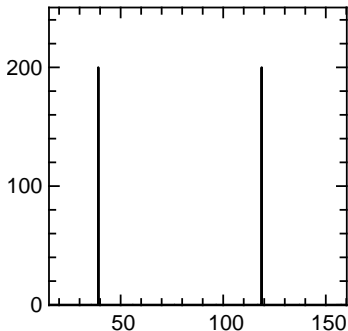
→ brouillage du spectre,
 “Convolution” variant avec E :

$$y(E) = \int h(E, E') x(E') dE'$$

Modèle physique, poudre cristalline

Modèle de formation :

$$z = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f)) + b.$$



\mathbf{x} : Diagramme de poudre de la matière (en keV). *C'est ce que l'on cherche à estimer,*

\mathbf{H} : Réponse du montage (*estimée numériquement*),

f : spectre du fond (*à déterminer*),

s : spectre de la source,

\mathbf{a} : atténuation dans l'objet,

\mathbf{R} : Réponse du détecteur (convolution en énergie),

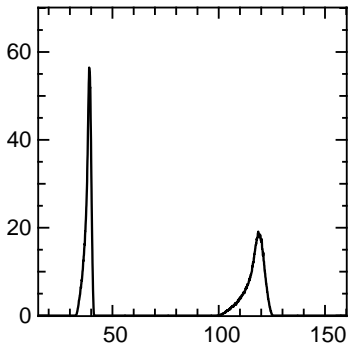
b : Bruit (comptage + bruit détecteur + modèle),

z : Mesures.

Modèle physique, poudre cristalline

Modèle de formation :

$$z = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f)) + b.$$



x : Diagramme de poudre de la matière (en keV). *C'est ce que l'on cherche à estimer,*

H : Réponse du montage (*estimée numériquement*),

f : spectre du fond (*à déterminer*),

s : spectre de la source,

a : atténuation dans l'objet,

R : Réponse du détecteur (convolution en énergie),

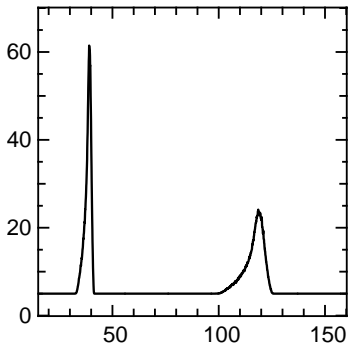
b : Bruit (comptage + bruit détecteur + modèle),

z : Mesures.

Modèle physique, poudre cristalline

Modèle de formation :

$$z = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f)) + b.$$



x : Diagramme de poudre de la matière (en keV). *C'est ce que l'on cherche à estimer,*

H : Réponse du montage (*estimée numériquement*),

f : spectre du fond (*à déterminer*),

s : spectre de la source,

a : atténuation dans l'objet,

R : Réponse du détecteur (convolution en énergie),

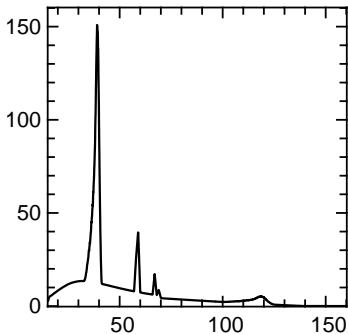
b : Bruit (comptage + bruit détecteur + modèle),

z : Mesures.

Modèle physique, poudre cristalline

Modèle de formation :

$$z = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{s} \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f})) + \mathbf{b}.$$



x : Diagramme de poudre de la matière (en keV). *C'est ce que l'on cherche à estimer,*

H : Réponse du montage (*estimée numériquement*),

f : spectre du fond (*à déterminer*),

s : spectre de la source,

a : atténuation dans l'objet,

R : Réponse du détecteur (*convolution en énergie*),

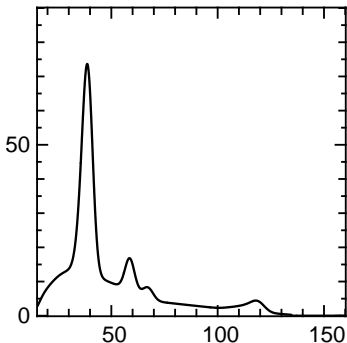
b : Bruit (*comptage + bruit détecteur + modèle*),

z : Mesures.

Modèle physique, poudre cristalline

Modèle de formation :

$$z = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f)) + b.$$



x : Diagramme de poudre de la matière (en keV). *C'est ce que l'on cherche à estimer,*

H : Réponse du montage (*estimée numériquement*),

f : spectre du fond (*à déterminer*),

s : spectre de la source,

a : atténuation dans l'objet,

R : Réponse du détecteur (convolution en énergie),

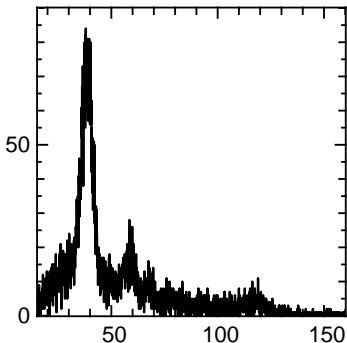
b : Bruit (comptage + bruit détecteur + modèle),

z : Mesures.

Modèle physique, poudre cristalline

Modèle de formation :

$$z = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f)) + b.$$



x : Diagramme de poudre de la matière (en keV). *C'est ce que l'on cherche à estimer,*

H : Réponse du montage (*estimée numériquement*),

f : spectre du fond (*à déterminer*),

s : spectre de la source,

a : atténuation dans l'objet,

R : Réponse du détecteur (convolution en énergie),

b : Bruit (comptage + bruit détecteur + modèle),

z : Mesures.

Estimation du diagramme de poudre

Approche inverse

Modèle de formation :

$$\mathbf{y} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{s} \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f}))$$

2 vecteurs à estimer :

- Diagramme de poudre \mathbf{x} ,
- fond continu \mathbf{f} .

Approche inverse

Modèle de formation :

$$\mathbf{y} = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{s} \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f}))$$

A priori

Diagramme de poudre x

x est composé des quelques pics très importants.

Régularisation

pénalisation par $\|x\|_1$.
(Parcimonie)

Fond f

f est relativement lisse et de moyenne faible.

Régularisation

pénalisation par $\|\nabla f\|_2^2$.

Positivité

Approche inverse

Modèle de formation :

$$y = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f))$$

A priori

Diagramme de poudre x

x est composé des quelques pics très importants.

Régularisation

pénalisation par $\|x\|_1$.
(Parcimonie)

Fond f

f est relativement lisse et de moyenne faible.

Régularisation

pénalisation par $\|\nabla f\|_2^2$.

Positivité

Approche inverse

Modèle de formation :

$$y = \mathbf{R} \cdot (a \times s \times (\mathbf{H} \cdot x + f))$$

A priori

Diagramme de poudre x

x est composé des quelques pics très importants.

Fond f

f est relativement lisse et de moyenne faible.

Régularisation

pénalisation par $\|x\|_1$.
(Parcimonie)

Régularisation

pénalisation par $\|\nabla f\|_2^2$.

Positivité

Approche inverse

Modèle de formation :

$$y = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot x + f))$$

A priori

Diagramme de poudre x

x est composé des quelques pics très importants.

Fond f

f est relativement lisse et de moyenne faible.

Régularisation

pénalisation par $\|x\|_1$.
(Parcimonie)

Régularisation

pénalisation par $\|\nabla f\|_2^2$.

Positivité

Approche inverse

Modèle de formation :

$$y = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot x + f))$$

A priori

Diagramme de poudre x

x est composé des quelques pics très importants.

Fond f

f est relativement lisse et de moyenne faible.



Régularisation

pénalisation par $\|x\|_1$.
(Parcimonie)

Régularisation

pénalisation par $\|\nabla f\|_2^2$.

Positivité

Approche inverse

Modèle de formation :

$$y = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f))$$

A priori

Diagramme de poudre x

x est composé des quelques pics très importants.

Fond f

f est relativement lisse et de moyenne faible.



Régularisation

pénalisation par $\|x\|_1$.
(Parcimonie)

Régularisation

pénalisation par $\|\nabla f\|_2^2$.

Positivité

Approche Maximum A Posteriori (MAP)

Solution $\{x^+, f^+\}$ qui minimise une fonction de coût :

$$\{x^+, f^+\} = \arg \min_{\{x, f\}} \left[\underbrace{\| \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times s \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + f)) - \mathbf{y} \|_{\mathbf{W}}^2}_{\text{attache aux données}} \dots \right. \\ \left. + \underbrace{\mu_1 \|x\|_1 + \mu_2 \|\nabla f\|_2^2}_{\text{a priori}} \right]$$

Bruit de Poisson \approx Bruit gaussien non-stationnaire

$$w_E = \begin{cases} \frac{1}{\gamma \max(z_E, 0) + \sigma_b^2} & \text{si } z_E \text{ est mesuré,} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Approche Maximum A Posteriori (MAP)

Solution $\{\mathbf{x}^+, \mathbf{f}^+\}$ qui minimise une fonction de coût :

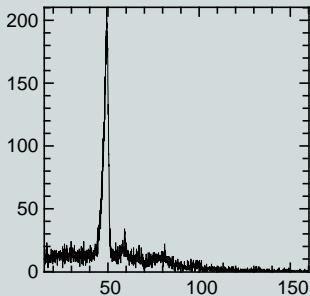
$$\{\mathbf{x}^+, \mathbf{f}^+\} = \arg \min_{\{\mathbf{x}, \mathbf{f}\}} \left[\underbrace{\left\| \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{s} \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f})) - \mathbf{y} \right\|_{\mathbf{W}}^2}_{\text{attache aux données}} \dots \right. \\ \left. + \underbrace{\mu_1 \|\mathbf{x}\|_1 + \mu_2 \|\nabla \mathbf{f}\|_2^2}_{\text{a priori}} \right]$$

Bruit de Poisson \approx Bruit gaussien non-stationnaire

$$w_E = \begin{cases} \frac{1}{\gamma \max(z_E, 0) + \sigma_b^2} & \text{si } z_E \text{ est mesuré,} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Échantillon de graphite, détecteur germanium

Mesures



Restauration

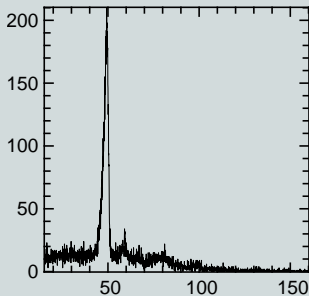
Résultats en transfert de quantité de mouvement : $x = E \frac{\sin(0.5 \theta)}{hc}$

Estimation	1.47	2.33	2.41	ND	2.95	3.14	4.02	ND	4.45
Théorie	1.48	2.34	2.45	2.76	2.96*	3.21	4.05	4.31	4.44*

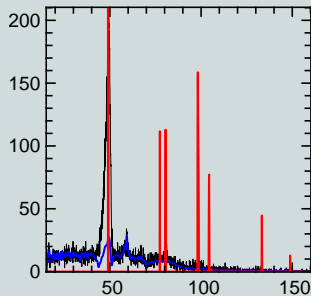
Position théorique et estimée des pics en nm^{-1} . * indique deux harmoniques du pic à 1.48 nm^{-1} .

Échantillon de graphite, détecteur germanium

Mesures



Restauration



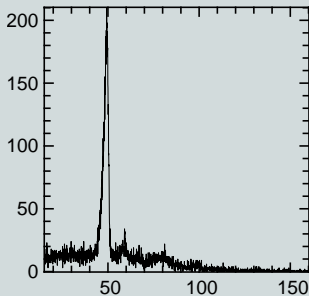
Résultats en transfert de quantité de mouvement : $x = E \frac{\sin(0.5 \theta)}{hc}$

Estimation	1.47	2.33	2.41	ND	2.95	3.14	4.02	ND	4.45
Théorie	1.48	2.34	2.45	2.76	2.96*	3.21	4.05	4.31	4.44*

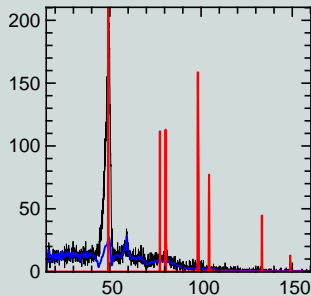
Position théorique et estimée des pics en nm^{-1} . * indique deux harmoniques du pic à 1.48 nm^{-1} .

Échantillon de graphite, détecteur germanium

Mesures



Restauration



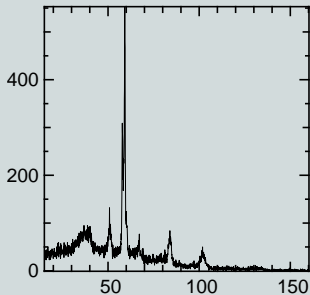
Résultats en transfert de quantité de mouvement : $x = E \frac{\sin(0.5\theta)}{hc}$

Estimation	1.47	2.33	2.41	ND	2.95	3.14	4.02	ND	4.45
Théorie	1.48	2.34	2.45	2.76	2.96*	3.21	4.05	4.31	4.44*

Position théorique et estimée des pics en nm^{-1} . * indique deux harmoniques du pic à 1.48 nm^{-1} .

Échantillon de NaCl, détecteur Germanium

Mesures



Restauration

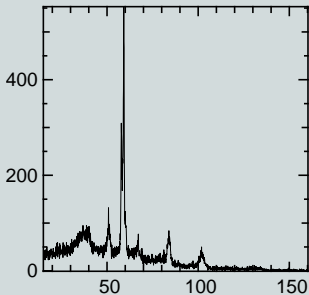
Résultats en transfert de quantité de mouvement : $x = E \frac{\sin(0.5\theta)}{hc}$

Estimation	1.52	1.79	1.92	2.50	3.05	3.07	3.98
Théorie	1.54	1.78	faux	2.51	2.94	3.08	3.87

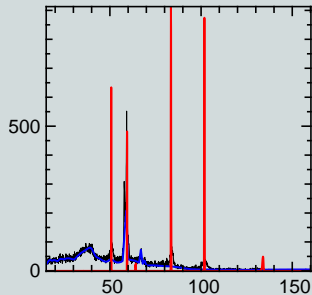
Position théorique et estimée des pics en nm^{-1} . Faux est pour fausse détection.

Échantillon de NaCl, détecteur Germanium

Mesures



Restauration



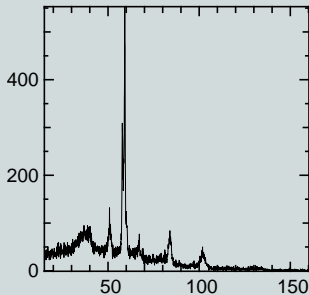
Résultats en transfert de quantité de mouvement : $x = E \frac{\sin(0.5\theta)}{hc}$

Estimation	1.52	1.79	1.92	2.50	3.05	3.07	3.98
Théorie	1.54	1.78	faux	2.51	2.94	3.08	3.87

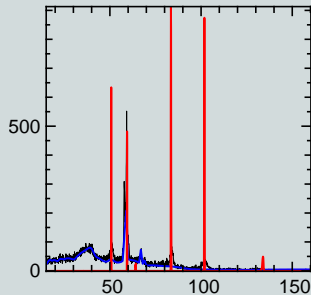
Position théorique et estimée des pics en nm^{-1} . Faux est pour fausse détection.

Échantillon de NaCl, détecteur Germanium

Mesures



Restauration



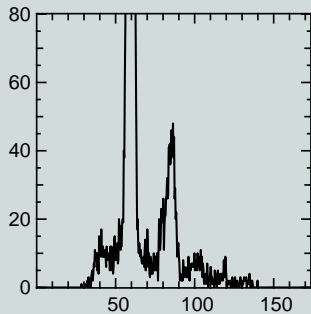
Résultats en transfert de quantité de mouvement : $x = E \frac{\sin(0.5\theta)}{hc}$

Estimation	1.52	1.79	1.92	2.50	3.05	3.07	3.98
Théorie	1.54	1.78	faux	2.51	2.94	3.08	3.87

Position théorique et estimée des pics en nm^{-1} . Faux est pour fausse détection.

Échantillon de NaCl, détecteur CZT

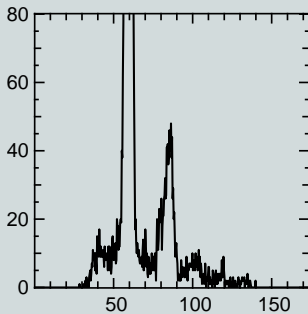
Mesures



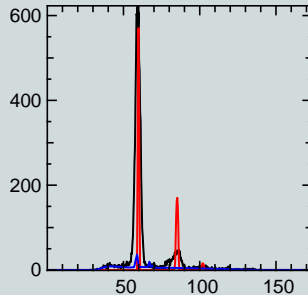
Restauration

Échantillon de NaCl, détecteur CZT

Mesures

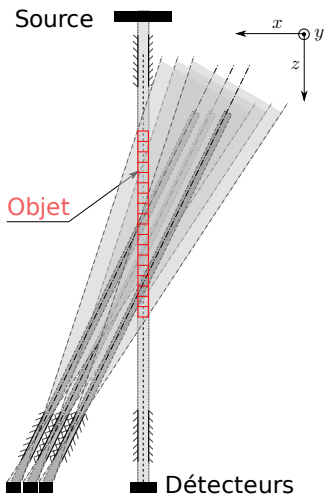


Restauration



Reconstruction d'une ligne de l'objet

Principe



Montage :

Plusieurs détecteurs pointant sur différentes zones illuminées par le pinceau.

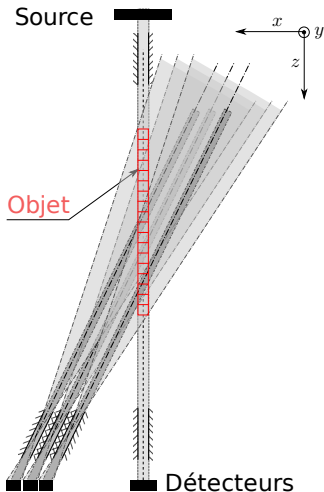
Objectifs :

- Mesurer toute la ligne en une seule acquisition.
- Super-résolution (si les zones se chevauchent).
- Voxels estimés plus petits.

Principe :

Même approche inverse prenant en compte toutes les mesures d'un coup.

Principe



Montage :

Plusieurs détecteurs pointant sur différentes zones illuminées par le pinceau.

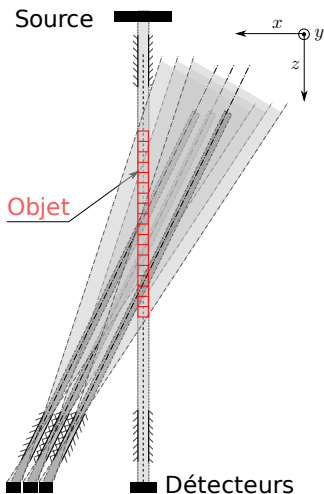
Objectifs :

- Mesurer toute la ligne en une seule acquisition,
- Super-résolution (si les zones se chevauchent),
- Voxels estimés plus petits.

Principe :

Même approche inverse prenant en compte toutes les mesures d'un coup.

Principe



Montage :

Plusieurs détecteurs pointant sur différentes zones illuminées par le pinceau.

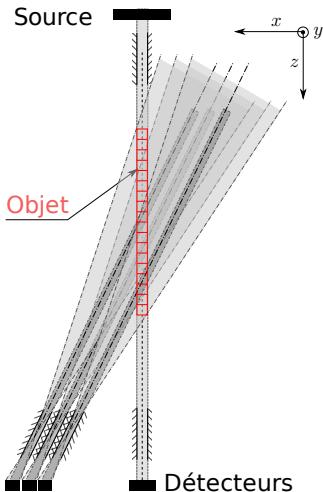
Objectifs :

- Mesurer toute la ligne en une seule acquisition,
- Super-résolution (si les zones se chevauchent),
- Voxels estimés plus petits.

Principe :

Même approche inverse prenant en compte toutes les mesures d'un coup.

Principe



Montage :

Plusieurs détecteurs pointant sur différentes zones illuminées par le pinceau.

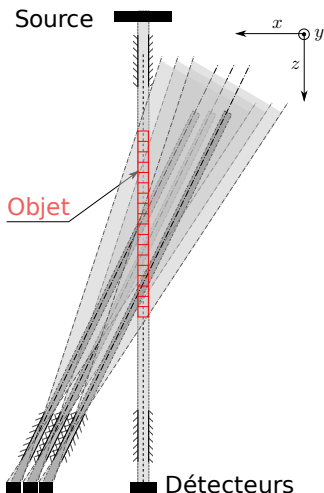
Objectifs :

- Mesurer toute la ligne en une seule acquisition,
- Super-résolution (si les zones se chevauchent),
- Voxels estimés plus petits.

Principe :

Même approche inverse prenant en compte toutes les mesures d'un coup.

Principe



Montage :

Plusieurs détecteurs pointant sur différentes zones illuminées par le pinceau.

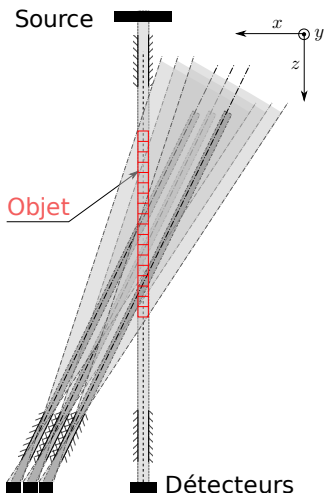
Objectifs :

- Mesurer toute la ligne en une seule acquisition,
- Super-résolution (si les zones se chevauchent),
- Voxels estimés plus petits.

Principe :

Même approche inverse prenant en compte toutes les mesures d'un coup.

Principe



Montage :

Plusieurs détecteurs pointant sur différentes zones illuminées par le pinceau.

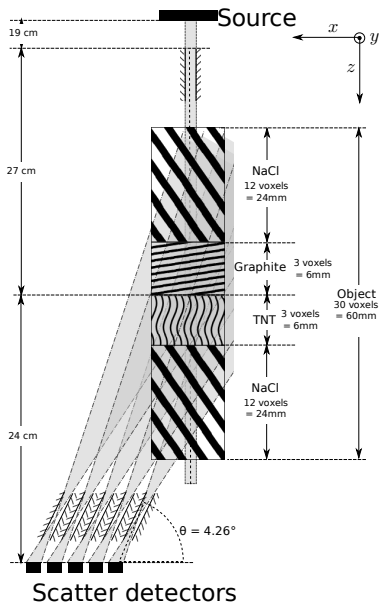
Objectifs :

- Mesurer toute la ligne en une seule acquisition,
- Super-résolution (si les zones se chevauchent),
- Voxels estimés plus petits.

Principe :

Même approche inverse prenant en compte toutes les mesures d'un coup.

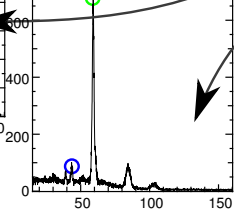
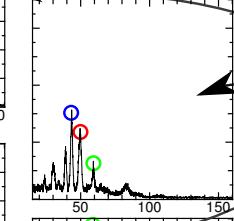
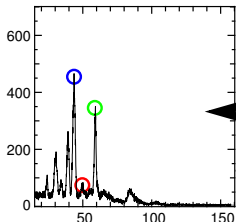
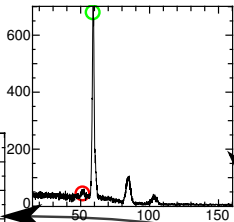
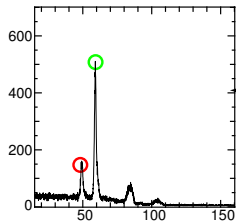
Simulation



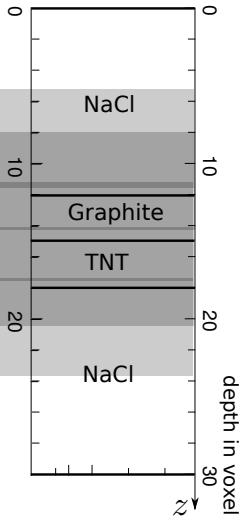
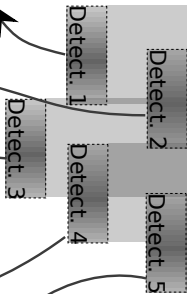
Montage :

- 5 détecteurs,
- 6 sources réparties sur 2mm,
- spectre source plat,
- 7 voxels/détecteur,
- voxels de $2\text{mm} \times 2\text{mm} \times 2\text{mm}$.

- NaCl
- graphite
- TNT



**Champ de vue
détecteurs**



Approche Maximum A Posteriori (MAP)

Solution $\{\mathbf{x}^+, \mathbf{f}^+\}$ qui minimise une fonction de coût :

$$\{\mathbf{x}^+, \mathbf{f}^+\} = \arg \min_{\{\mathbf{x}, \mathbf{f}\}} \left[\underbrace{\left\| \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{s} \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f})) - \mathbf{y} \right\|_{\mathbf{W}}^2}_{\text{attache aux données}} \dots \right. \\ \left. + \underbrace{\mu_1 \|\mathbf{x}\|_1 + \mu_2 \|\nabla \mathbf{f}\|_2^2 + \mu_3 \text{TV}_c(\mathbf{x})}_{\text{a priori}} \right]$$

Vector valued Total Variation [Chan 2001]

$$\text{TV}_c(\mathbf{x}) = \sum_{\text{spatial}} \sqrt{\sum_{\text{spectral}} (\nabla_{\text{spatial}} \mathbf{x})^2}.$$

Approche Maximum A Posteriori (MAP)

Solution $\{\mathbf{x}^+, \mathbf{f}^+\}$ qui minimise une fonction de coût :

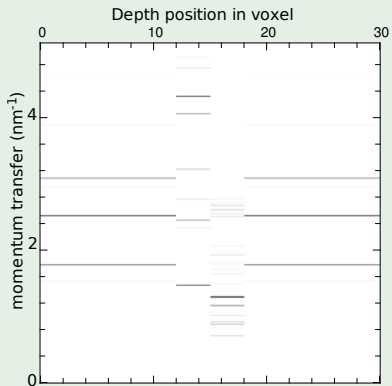
$$\{\mathbf{x}^+, \mathbf{f}^+\} = \arg \min_{\{\mathbf{x}, \mathbf{f}\}} \left[\underbrace{\left\| \mathbf{R} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{s} \times (\mathbf{H} \cdot \mathbf{x} + \mathbf{f})) - \mathbf{y} \right\|_{\mathbf{W}}^2}_{\text{attache aux données}} \dots \right. \\ \left. + \underbrace{\mu_1 \|\mathbf{x}\|_1 + \mu_2 \|\nabla \mathbf{f}\|_2^2 + \mu_3 \text{TV}_c(\mathbf{x})}_{\text{a priori}} \right]$$

Vector valued Total Variation [Chan 2001]

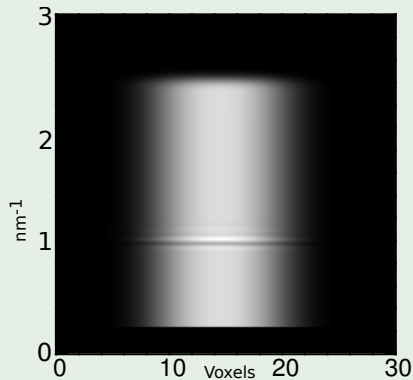
$$\text{TV}_c(\mathbf{x}) = \sum_{\text{spatial}} \sqrt{\sum_{\text{spectral}} (\nabla_{\text{spatial}} \mathbf{x})^2}.$$

Résultats

Mélange simulé

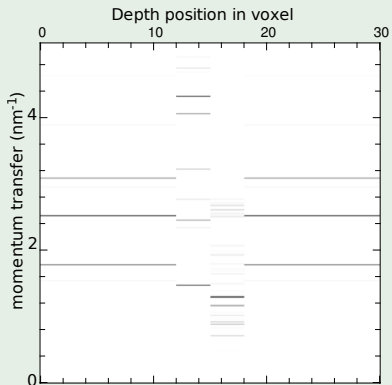


Zone observée

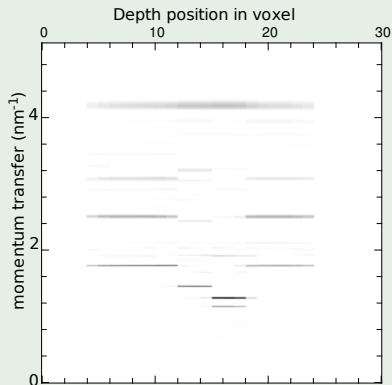


Résultats

Mélange simulé



Mélange reconstruit



Conclusion

Conclusion

Conclusion

- Modèle validé sur des données réelles,
- Bonne estimation des distances inter-réticulaires,
- Robuste aux bruits (bruit de photons, fond continu. . .).

Perspective

- Valider la reconstruction d'une ligne sur des données expérimentales,
- Estimer le produit spectre de la source fois atténuation,
- Utiliser les 16 pixels du détecteur CZT,
- Étendre au cas fan-beam.

Conclusion

Conclusion

- Modèle validé sur des données réelles,
- Bonne estimation des distances inter-réticulaires,
- Robuste aux bruits (bruit de photons, fond continu. . .).

Perspective

- Valider la reconstruction d'une ligne sur des données expérimentales,
- Estimer le produit spectre de la source fois atténuation,
- Utiliser les 16 pixels du détecteur CZT,
- Étendre au cas fan-beam.