

ÉCOLE DOCTORALE Mathématiques, Sciences de l'information et de l'ingénieur

ICube-Laboratoire des sciences de l'ingénieur, de l'informatique et de l'imagerie UMR 7357

THÈSE présentée par :

Minh-Son PHAN

soutenue le : **07 Octobre 2016**

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université de Strasbourg**

Discipline/ Spécialité : Informatique

**Contribution à l'estimation de la similarité
dans un ensemble de projections
tomographiques non-orientées**

THÈSE dirigée par :

M. TAJINE Mohamed

Professeur, université de Strasbourg

RAPPORTEURS :

M. NORMAND Nicolas

M. RITCHIE David

Maître de Conférences HDR, université de Nantes

Directeur de Recherche INRIA, LORIA-université de Lorraine

AUTRES MEMBRES DU JURY :

Mme JONIC Slavica

M. SCHRECK Pascal

M. SCHULTZ Patrick

Chargée de Recherches CNRS HDR, IMPMC-université Pierre et Marie Curie

Professeur, université de Strasbourg

Directeur de Recherches CNRS, IGBMC-université de Strasbourg, **Président du Jury**

Remerciements

Je tiens tout d'abord à adresser mes remerciements les plus sincères à mon directeur de thèse, M. Mohamed Tajine, Professeur à l'Université de Strasbourg, pour m'avoir fait confiance en vue de mener à bien ce travail de recherche. Je lui suis également reconnaissant pour le temps qu'il m'a accordé, ses qualités pédagogiques et scientifiques. J'ai beaucoup appris à ses côtés et je lui adresse ma plus profonde gratitude.

J'exprime ensuite mes profonds remerciements à mes co-encadrants de thèse, M. Étienne Baudrier et M. Loïc Mazo, Maîtres de Conférences à l'Université de Strasbourg, pour leurs soutiens, leur attention de tous les instants sur mon travail, pour leurs conseils, leurs critiques qui ont été très précieux pour améliorer la qualité de mon travail. Leur énergie et leur patience ont toujours été une source d'encouragement pour moi durant mes années de thèse de doctorat.

Je tiens également à remercier les rapporteurs de cette thèse de doctorat, M. David Ritchie, Directeur de Recherche INRIA au LORIA-Université de Lorraine et M. Nicolas Normand, Maître de Conférences H.D.R. à l'Université de Nantes pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. Je voudrais également remercier Mme Slavica Jonic, Chargée de Recherches CNRS H.D.R à l'IMPMC-Université Pierre et Marie Curie, à M. Patrick Schultz, Directeur de Recherches CNRS à l'IGBMC-Université de Strasbourg et à M. Pascal Schreck, Professeur à l'Université de Strasbourg pour avoir accepté d'examiner mon travail.

Mes sincères remerciements à Daniel Khoshnoudirad, Theodosios Gkamas, Hmida Robjani, Ammar Hannachi et Tran-Thanh Ngo pour leur sympathie, leur amitié et pour toutes les discussions intéressantes en mathématique et informatique.

Un grand merci à tous mes collègues de l'équipe MIV du laboratoire ICube, pour leur aide et leur bonne humeur avec une ambiance de travail très agréable. Je désire en outre remercier tous les collègues de l'UFR Math/Info pour leurs soutiens, leur précieuse collaboration en enseignement durant mes deux ans de monitorat, et une année en tant que ATER, spécialement M. Gabriel Frey, Mme. Stella Marc-Zwecker, M. Pascal Mathis, M. Pascal Schreck et M. Jean-Michel Dischler. J'ai pris un grand plaisir à travailler avec eux.

Enfin, je remercie mes parents, ma femme, mes frères et sœur pour leur aide et leur soutien au cours de mes années de thèse de doctorat.

Table des matières

Introduction générale	1
1 État de l’art : tomographie et cryo-microscopie électronique	7
1.1 Introduction générale de la tomographie	9
1.1.1 Tomographie	9
1.1.2 Applications de la tomographie	10
1.1.2.1 Imagerie médicale	10
1.1.2.2 Biologie	12
1.1.2.3 Mécanique des matériaux	14
1.1.2.4 Géométrie convexe	14
1.1.3 Tomographie continue et discrète	15
1.2 Tomographie en cryo-microscopie électronique	18
1.2.1 Modalité d’acquisition	18
1.2.2 Enjeux de la cryo-microscopie électronique	19
1.2.2.1 Dommage dû aux électrons	20
1.2.2.2 Faible contraste	20

1.2.2.3	Projections homogènes et hétérogènes	20
1.2.2.4	Orientations inconnues	21
1.2.2.5	Conformation	21
1.2.3	Techniques d'analyse des particules isolées	21
1.3	Estimation des orientations	23
1.3.1	Random conical tilt	23
1.3.2	Ligne commune	27
1.3.3	Moments	28
1.4	Méthodes de reconstruction tomographique	29
1.4.1	Méthode d'inversion directe de la transformée de Fourier	30
1.4.2	Méthode de rétro-projection	30
1.4.3	Méthodes algébriques	32
1.4.3.1	Méthode ART	33
1.4.3.2	Méthode SIRT	34
1.5	Reconstruction conjointe	35
1.6	Mesures de la similarité/dissimilarité entre deux projections	35
1.6.1	Alignement des projections	35
1.6.2	Classification des projections	36
1.6.3	Raffinement des projections	37
1.6.4	Estimation des orientations	37
1.6.5	Relation entre projections et leurs orientations	37
1.7	Conclusion	38

2 Estimation de la différence angulaire en 2D

2.1	Notions de base	40
2.1.1	Projection	40
2.1.2	Moments et leur relation avec les orientations de projection	42
2.1.3	Différence angulaire entre deux projections	44
2.2	Problème d'estimation de la différence angulaire	46
2.3	Méthode d'estimation de la différence angulaire	47
2.3.1	Recherche des voisins pour chaque projection	47
2.3.2	Formules d'estimation de la différence angulaire	50
2.3.3	Algorithme d'estimation de la différence angulaire	55
2.4	Traitement du bruit	56
2.4.1	Débruitage de l'ensemble des projections	57
2.4.1.1	Analyse en composantes principales	57
2.4.1.2	Filtre de Singer-Wu	58
2.4.2	Estimation des moments extrêmes	61
2.4.3	Débruitage du graphe de voisinage	65
2.5	Estimation de la différence angulaire par l'estimation des angles	66
2.6	Conclusion	68
3	Estimation de la différence angulaire en 3D	69
3.1	Notions de base	71
3.1.1	Rotation en 3D	71
3.1.2	Projection	71
3.1.3	Moment et orientation des projections	72
3.2	Estimation de la différence angulaire	77

3.3	Méthode d'estimation de la différence angulaire	78
3.3.1	Recherche des voisins pour chaque projection	78
3.3.2	Formule d'estimation de la différence angulaire	81
3.3.3	Résumé de la méthode d'estimation de la différence angulaire en 2D et 3D	81
3.4	Estimation de la différence angulaire par l'estimation des orientations des projections	83
3.4.1	Méthode de Singer-Zhao	84
3.4.2	Méthode de Shkolnisky-Singer	84
3.5	Conclusion	86
4	Résultats expérimentaux et discussion	87
4.1	Expérimentations en 2D	88
4.1.1	Cas sans bruit	90
4.1.1.1	Estimation de la différence angulaire entre deux projec- tions voisines	90
4.1.1.2	Estimation de la différence angulaire entre deux projec- tions quelconques	92
4.1.2	Cas bruité	95
4.1.2.1	Estimation des moments extrêmes par le maximum de vraisemblance	95
4.1.3	Comparaison avec la méthode de Singer-Wu	96
4.2	Expérimentations en 3D	99
4.2.1	Cas sans bruit	101
4.2.2	Cas bruité	105

4.2.3	Comparaison avec la méthode de Singer-Zhao et la méthode de Shkolnisky-Singer	105
4.3	Conclusion	107
	Conclusion générale	109
	Liste des figures	116
	Liste des tableaux	118
	A Démonstrations en 2D	118
A.1	Estimation de l'angle par la méthode de Salzman	118
A.2	Rappel de l'inégalité de Berstein	119
A.3	Démonstration de la proposition 1	119
A.4	Démonstration de la proposition 3	121
	B Démonstrations en 3D	124
B.1	Démonstration du corollaire 2	124
B.2	Démonstration de la proposition 4	125
B.3	Démonstration de la proposition 5	126
	C Continuité des moments par rapport aux angles	129
	Bibliographie	144

Introduction générale

Ce travail de thèse a été mené au sein de l'équipe Modèles, Image et Vision (MIV) du laboratoire ICube (UMR 7357). Cette thèse a été dirigée par Mohamed Tajine (Professeur des Universités) et encadrée par Étienne Baudrier (Maître de Conférences) et Loïc Mazo (Maître de Conférences). Ces travaux ont été partiellement réalisés dans le cadre du projet Reconstruction tomographique pour la cryo-microscopie électronique d'objets Déformables (RHODES) en collaboration avec l'Institut de Génétique et de Biologie Moléculaire et Cellulaire (IGBMC). Cette thèse a été financée par une bourse d'allocation du Ministère de la Recherche.

Contexte

La cryo-microscopie électronique est une technique tomographique permettant de reconstituer la structure 3D d'un objet complexe (les protéines, les virus) à partir de ses images obtenues avec le microscope électronique. Ces images de l'objet sont appelées les projections et sont souvent acquises sous orientations inconnues. La reconstruction 3D est un outil important pour la visualisation de structures complexes. Un des avantages de la cryo-microscopie électronique est la possibilité d'obtenir une haute résolution (jusqu'au picomètre). La procédure de reconstruction tomographique en cryo-microscopie électronique fait intervenir plusieurs techniques d'imagerie telles que les techniques de débruitage, d'alignement, de classification, de reconstruction et de raffinement des images.

Ces techniques sont encore développées depuis la première reconstruction 3D qui a été obtenue par Derosier et Klug en 1968 [1]. Plusieurs sujets de recherche complexes sont encore ouverts tels que l'estimation des orientations inconnues des projections, l'estimation des états déformables de l'objet et le débruitage des projections.

Pendant le processus de reconstruction tomographique en cryo-microscopie électronique, la distance entre deux projections est fréquemment mesurée. La projection peut être considérée comme un vecteur et la distance peut être calculée par les différents types de distances définies dans l'espace vectoriel. Parmi ces distances, la distance la plus utilisée est la distance euclidienne. Par exemple, les auteurs dans [2, 3, 4] classifient les projections en calculant les distances euclidiennes entre elles, puis construisent une matrice de distances et l'utilisent avec les techniques de réduction dimensionnelle pour estimer les orientations des projections. Dans [5, 6], après avoir reconstruit le premier modèle de l'objet à partir de projections acquises, ce modèle est reprojété sur une sphère selon des orientations uniformes, puis les distances euclidiennes entre les reprojctions et les projections acquises sont calculées afin de raffiner le modèle. Une alternative à la distance euclidienne dans le processus de raffinement est le coefficient de corrélation croisée [7]. Cependant, les résultats obtenus en utilisant la distance euclidienne ou le coefficient de corrélation croisée ne sont pas différents comme montré dans [8]. La distance euclidienne est aussi utilisée dans [9] pour établir la fonction de coût à minimiser. Le but est d'estimer simultanément les orientations des projections et l'objet.

Les travaux réalisés au cours de cette thèse portent sur les distances entre projections avec comme objectif l'amélioration de la procédure de reconstruction tomographique en cryo-microscopie électronique.

Problématique

La distance euclidienne entre deux projections peut avoir une grande variation, même si les deux projections sont proches. Plus précisément, des différences angulaires d'orientations similaires peuvent générer des couples de projections dont la distance euclidienne est très grande. Ceci implique que la distance euclidienne n'est pas une bonne relation

spatiale entre deux projections et elle peut amener des erreurs si on l'utilise pendant le processus de classification ou de raffinement des projections.

Contributions

Le but de cette thèse est de rechercher une mesure plus fidèle à la différence angulaire entre deux projections. La principale question posée est de savoir si l'on est capable d'estimer la différence angulaire entre deux projections à partir d'un ensemble de projections non orientées. Pour s'attaquer à ce problème, l'approche proposée dans cette thèse est d'estimer la différence angulaire entre deux projections en se basant sur les propriétés des moments de projections et la construction du graphe de voisinage pour les projections. Étant donné que le problème d'estimation de la différence angulaire en 2D est différent de celui en 3D, l'approche proposée est donc séparée en deux cas 2D et 3D.

En 2D, les formules d'estimation de la différence angulaire sont développées en se basant sur la relation entre les moments de l'objet et les moments des projections. Cette relation a été utilisée pour l'estimation des orientations de projection et a été étudiée sous le nom de méthode des moments dans [10, 11, 12]. Cependant, l'objectif de ce travail est différent car il est essentiellement centré sur l'estimation de la différence angulaire entre deux projections sans connaître ni estimer leurs orientations. Les formules développées ne sont robustes que pour les projections proches. Elles sont donc utilisées pour estimer la différence angulaire entre des projections voisines. Afin de trouver les voisins de chaque projection, des seuils adaptatifs sont développés dans l'espace des moments de projections. Ces seuils reposent sur l'hypothèse que les orientations des projections sont distribuées selon une loi quelconque. Après avoir estimé la différence angulaire entre les projections voisines, un graphe de voisinage est construit tel que ses sommets soient les projections, ses arêtes relient des projections voisines et soient pondérées par les différences angulaires estimées par les formules. Finalement, une estimation de la différence entre deux projections quelconques est calculée en utilisant un algorithme du plus court chemin sur le graphe de voisinage. La performance de la méthode proposée est testée sur des données simulées. Les tests ont montré que la dispersion de notre méthode par

rapport à l'orientation de la projection est beaucoup plus petite que celle de la distance euclidienne.

Comme la méthode en 2D donne des bons résultats d'estimation de la différence angulaire et l'utilisation des moments pour l'estimation des orientations en 3D a aussi été étudiée dans [10, 13], nous avons donc étendu notre méthode développée en 2D pour le cas 3D. Bien que les étapes de la méthode en 3D soient presque similaires que celles en 2D, il existe aussi des difficultés spécifiques qui doivent être traitées particulièrement. Les tests en 3D ont montré que la dispersion de notre méthode par rapport à l'orientation de la projection est à nouveau beaucoup plus petite que celle de la distance euclidienne. D'autre part, les orientations des projections peuvent aussi être estimées par d'autres méthodes en 3D. Une famille des méthodes la plus utilisée est les méthodes basées sur la technique de ligne commune [14, 7]. La technique de la ligne commune se base sur le théorème de la coupe centrale selon lequel deux projections partagent une ligne commune dans l'espace de Fourier. Cette ligne commune est orthogonale aux orientations de deux projections. La combinaison des lignes communes entre trois projections différentes permet de trouver leurs orientations. La recherche des lignes communes entre les projections est coûteuse et peut comporter des erreurs cumulatives si les lignes communes ne sont pas correctement identifiées [10]. Contrairement à la ligne commune, l'utilisation de la méthode des moments est plus rapide et n'entraîne pas des erreurs cumulatives.

Organisation du mémoire

Le chapitre 1 introduit un état de l'art sur la tomographie et ses applications, ainsi que sur la cryo-microscopie électronique avec sa modalité d'acquisition, ses problématiques, les techniques d'imagerie et les méthodes de reconstruction tomographique utilisées. Le chapitre 2 décrit les principes de la tomographie en 2D et 3D. Les notions de rotation, de projection, de moment avec leurs propriétés sont présentées dans ce chapitre. Les chapitres 3 et 4 sont consacrés au problème de l'estimation de la différence angulaire en 2D et 3D. Les problématiques, les étapes d'estimation sont présentés. Le chapitre 5 montre la performance de la méthode proposée par des expérimentations sur une base

d'images simulées. La comparaison de notre méthode avec la distance euclidienne et les autres méthodes est aussi réalisée. Le document se termine par une conclusion générale et les perspectives de ces travaux de thèse. Afin de faciliter la lecture de ce mémoire, les listes des figures et des tables figurent à la fin du mémoire. Les démonstrations les plus techniques sont données en annexe.

Ce travail a donné lieu aux publications suivantes :

Article en revue internationale

- M. S. Phan, É. Baudrier, L. Mazo, M. Tajine. Moment-based angular difference estimation between two tomographic projections in 2D and 3D. *Journal of Mathematical Imaging and Vision*. Springer, 2016, pages 1 – 19.
doi : 10.1007/s10851-016-0673-5.

Articles dans des actes de conférences internationales

- M. S. Phan, É. Baudrier, L. Mazo, M. Tajine. Estimation of angular difference between tomographic projections taken at unknown directions in 3D. *International Conference on Image Processing 2015*. IEEE, pages 73 – 74.
doi : 10.1109/ICIP.2015.7350762.
- M. S. Phan, É. Baudrier, L. Mazo, M. Tajine. Angular difference measure between tomographic projections taken at unknown directions in 2D. *International Conference on Image Processing 2014*. IEEE, pages 1738 – 1742.
doi : 10.1109/ICIP.2014.7025348.

État de l'art : tomographie et cryo-microscopie électronique

Sommaire

1.1	Introduction générale de la tomographie	9
1.1.1	Tomographie	9
1.1.2	Applications de la tomographie	10
1.1.2.1	Imagerie médicale	10
1.1.2.2	Biologie	12
1.1.2.3	Mécanique des matériaux	14
1.1.2.4	Géométrie convexe	14
1.1.3	Tomographie continue et discrète	15
1.2	Tomographie en cryo-microscopie électronique	18
1.2.1	Modalité d'acquisition	18
1.2.2	Enjeux de la cryo-microscopie électronique	19
1.2.2.1	Dommage dû aux électrons	20
1.2.2.2	Faible contraste	20
1.2.2.3	Projections homogènes et hétérogènes	20
1.2.2.4	Orientations inconnues	21

1.2.2.5	Conformation	21
1.2.3	Techniques d'analyse des particules isolées	21
1.3	Estimation des orientations	23
1.3.1	Random conical tilt	23
1.3.2	Ligne commune	27
1.3.3	Moments	28
1.4	Méthodes de reconstruction tomographique	29
1.4.1	Méthode d'inversion directe de la transformée de Fourier	30
1.4.2	Méthode de rétro-projection	30
1.4.3	Méthodes algébriques	32
1.4.3.1	Méthode ART	33
1.4.3.2	Méthode SIRT	34
1.5	Reconstruction conjointe	35
1.6	Mesures de la similarité/dissimilarité entre deux pro- jections	35
1.6.1	Alignement des projections	35
1.6.2	Classification des projections	36
1.6.3	Raffinement des projections	37
1.6.4	Estimation des orientations	37
1.6.5	Relation entre projections et leurs orientations	37
1.7	Conclusion	38

Un tour d'horizon de la tomographie et ses applications est présenté dans ce chapitre. En particulier, nous détaillons le cas de la tomographie en cryo-microscopie électronique sur laquelle nous travaillons.

1.1 Introduction générale de la tomographie

1.1.1 Tomographie

La tomographie est une technique qui reconstitue la structure interne d'un objet. Le mot tomographie vient du mot grec « tomos » qui signifie « coupe ». Le principe général de cette technique est le suivant : des rayons traversent l'objet à partir d'une source et engendrent sur un récepteur un signal représentant certaines propriétés de l'intérieur de l'objet. L'ensemble des différents signaux est acquis soit par une rotation de la source, soit par une rotation de l'objet ou bien encore sous forme d'objets identiques mais avec différentes orientations. Ces signaux sont finalement utilisés pour reconstruire le volume de l'objet. Les rayons peuvent être des rayons X, des noyaux atomiques ou des électrons. Ils sont émis par une source ponctuelle (des rayons en éventail) ou non ponctuelle (des rayons parallèles). Il existe une variété de techniques tomographiques dans plusieurs domaines différents. Par exemple, le scanner X, l'IRM (imagerie par résonance magnétique), la TEP (tomographie par émission de positons) en imagerie médicale, la microscopie électronique et cryo-microscopie électronique en biologie structurale ou l'imagerie tomographique radio dans le réseau sans fil. Le détail de ces techniques est présentée dans la partie 1.1.2.

Dans la plupart des cas, l'orientation de la source ou la rotation de l'objet est connue et le volume de l'objet peut être reconstruit par différentes méthodes qui sont classées en trois grandes familles : les méthodes basées sur l'inversion directe de la transformée de Fourier, les méthodes basées sur la rétro-projection et les méthodes algébriques. Ces méthodes sont détaillées dans la partie 1.4. Cependant, il y a aussi certains cas dans lesquels l'orientation de la source ou la rotation de l'objet est inconnue. Par exemple l'étude des particules en cryo-microscopie électronique ou lorsque les objets se déplacent pendant la procédure d'acquisition. L'étape d'estimation des orientations de l'objet doit donc être ajoutée dans la procédure de reconstruction tomographique pour ces cas. Le détail des méthodes d'estimation de l'orientation est présenté dans la partie 1.3. Après avoir obtenu un premier modèle de l'objet, ce dernier est ensuite amélioré par une étape de raffinement durant laquelle le modèle est *re-projeté* selon différentes orientations, puis les données

obtenues sont comparées avec les données originales afin de trouver les meilleures orientations pour les données originales. Les nouvelles orientations sont ensuite utilisées pour reconstruire un deuxième modèle. Cette étape peut être répétée jusqu'à ce que le résultat de reconstruction soit stable. La procédure de reconstruction tomographique pour des orientations inconnues implique des allers-retours entre l'estimation des orientations et la reconstruction de l'objet. Les orientations estimées sont utilisées pour reconstruire l'objet, puis l'objet reconstruit est à son tour utilisé pour raffiner les orientations. L'estimation des orientations avant la reconstruction ou vice-versa peut donc ne pas être optimisée. Il existe aussi des méthodes qui sont développées pour profiter de cette interdépendance en reconstruisant conjointement l'objet avec les orientations (partie 1.5).

1.1.2 Applications de la tomographie

La tomographie est appliquée dans plusieurs domaines que nous détaillons ici.

1.1.2.1 Imagerie médicale

L'imagerie médicale permet la représentation visuelle de l'intérieur du corps pour l'analyse clinique et l'intervention médicale. Elle est aussi utilisée pour la représentation fonctionnelle des organes et des tissus. Le principe général des techniques en imagerie médicale est illustré sur la figure 1.1 dans laquelle l'objet étudié (par exemple le corps humain) est introduit dans le tunnel d'un appareil d'imagerie. Les rayons ou les ondes traversent l'objet et produisent plusieurs images représentant un morceau de l'intérieur de l'objet (une vue en 2D). Ensuite, ces images peuvent être regroupées afin de reconstruire une vue 3D de l'objet. Il existe différentes techniques en imagerie médicale qui sont classées en deux catégories :

a) Imagerie structurelle

Les techniques d'imagerie permettent d'obtenir des informations sur la structure des organes, leurs formes, leurs limites, et dans certains cas leurs contenus (e.g. structures osseuses, calculs vésicaux). Les techniques connues en imagerie structurelle sont décrites

ci-dessous.

- La radiologie standard, dite X. C'est une technique simple et est le plus souvent utilisée en médecine. Un faisceau de rayons X traverse une zone du patient qui est placé entre une source de rayons X et une plaque contenant un capteur radiographie. Les rayons X interagissent avec les différentes structures traversées et produisent des densités différentes sur le capteur.
- La tomodensitométrie X, ou le scanner X. Cette modalité suit le même principe que la radiologie X. La seule différence est que la source n'est pas fixe, elle tourne autour du patient pour obtenir plusieurs coupes transversales de l'organisme.
- L'imagerie par Résonance Magnétique – IRM, utilise un principe différent. Le patient est placé dans un champ magnétique très intense. Les atomes d'hydrogène qui composent l'organisme interagissent plus ou moins avec le champ magnétique suivant leur localisation, créant des coupes différentes de l'organisme.

b) Imagerie fonctionnelle

Les techniques d'imagerie permettent d'étudier le fonctionnement des organes au lieu de leur structure comme en imagerie structurale. Les techniques connues en imagerie fonctionnelle sont décrites ci-dessous.

- L'IRMf, ou IRM fonctionnelle. L'IRMf repose sur le même principe que l'IRM structurale, mais avec la modification de certains paramètres d'acquisition des images. Elle permet d'avoir des images reflétant les variations de l'apport sanguin. Ces variations sont utilisées souvent pour mesurer le fonctionnement du cerveau et sont reliées à l'activité des neurones.
- La TEP ou Tomographie par Émission de Positons. La TEP repose sur l'injection d'un traceur (par exemple fluor 18, oxygène 15 ou azote 13) dans l'organisme. La diffusion du traceur permet de repérer les zones où, par exemple, le métabolisme osseux est anormal. Un scanner particulier est utilisé pour détecter cette émission du traceur.

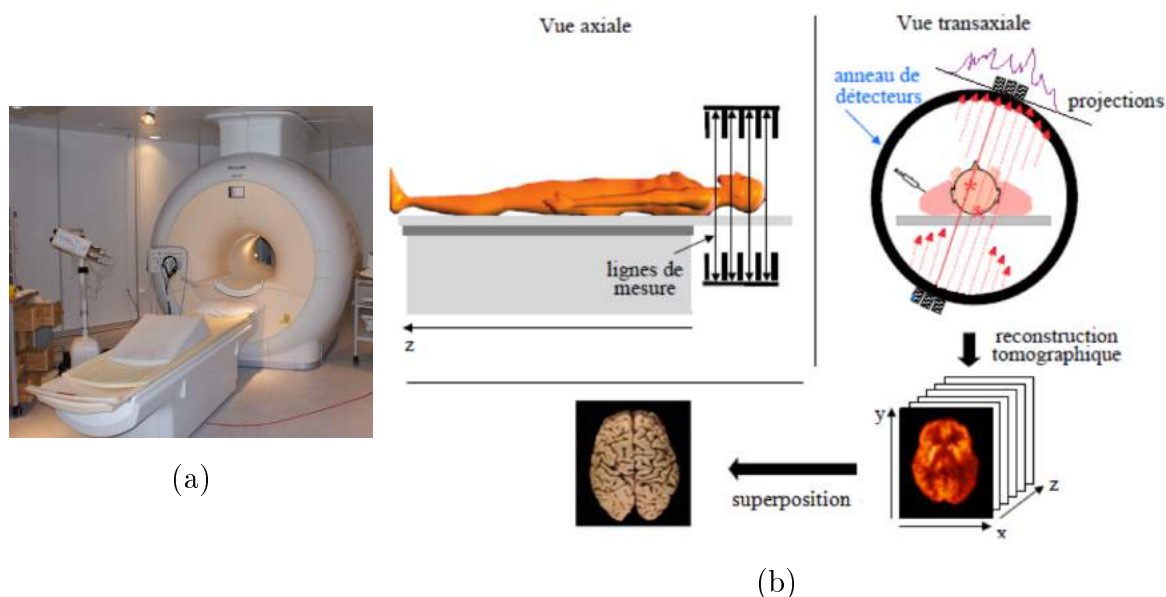


Figure 1.1: a) le scanner d'IRM ; b) le principe d'acquisition des images 2D (projections) en IRM sous différentes orientations. Le volume 3D du cerveau est obtenu par la superposition des coupes [15].

1.1.2.2 Biologie

La tomographie peut être utilisée en biologie pour étudier la structure et l'organisation spatiale des micro-organismes, des cellules ou des macromolécules (e.g. protéines, acides nucléiques). Les techniques tomographiques connues en biologie reposent sur la microscopie électronique. En particulier, la microscopie électronique est utilisée en cristallographie pour étudier la structure des cristaux à l'échelle moléculaire ou atomique.

a) Microscopie électronique

La microscopie électronique est une technique tomographique utilisant un faisceau d'électrons pour illuminer et créer une image très agrandie d'un échantillon. Cette technique permet d'étudier les structures complexes des molécules avec une résolution jusqu'au picomètre. Il existe plusieurs types de microscopie électronique :

- la microscopie électronique en transmission (MET) qui amplifie le comportement du faisceau d'électrons quand il traverse la structure de l'échantillon. Les effets d'in-

teraction entre les électrons et l'échantillon engendrent une image représentant la projection de l'échantillon ;

- la microscopie électronique à balayage (MEB) qui est différente de la MET où l'image observée est la projection de l'échantillon. La MEB reproduit plutôt une image de la surface de l'échantillon avec une grande profondeur de champ dans l'image. Après avoir balayé l'échantillon, les pertes d'énergie du faisceau d'électrons en chaque point de l'échantillon sont enregistrées et utilisées pour créer une image de surface de l'échantillon.

En général, la résolution d'une image en MET est plus élevée que celle en MEB. La MET est donc préférée pour étudier la structure complexe des cellules, des macromolécules en biologie structurale. Au contraire, la MEB est préférée pour étudier les micro-organismes car elle donne une profondeur de champs plus nette que celles des microscopies optiques. Les deux types de microscopie électronique demandent une préparation de l'échantillon très soignée pour pouvoir obtenir une bonne qualité d'image. C'est le cas en particulier pour la MET car les échantillons peuvent être dégradés durant l'acquisition par le faisceau d'électrons ou être difficiles à observer par transmission en raison d'une grande épaisseur de l'échantillon. En biologie, plusieurs étapes sont appliquées pour pouvoir préparer les échantillons propres, minces et avec une structure la plus proche possible de l'état naturel. Les échantillons peuvent aussi être colorés pour rehausser le contraste dans certaines situations.

b) Techniques tomographiques basées sur la microscopie électronique

Tomographie électronique

La tomographie électronique permet d'obtenir un modèle 3D d'une structure complexe en utilisant la MET. Le principe de cette technique est de tourner les échantillons autour d'un axe perpendiculaire au faisceau d'électrons. Un ensemble des projections de différentes orientations est obtenu sous cette technique. Les projections sont ensuite utilisées pour reconstruire un modèle 3D de la structure complexe. Un des inconvénients de la tomographie électronique est la limitation de la rotation des échantillons (entre $\pm 70^\circ$) qui peut conduire à une perte d'information sur la reconstruction.

Cryo-microscopie électronique

La cryo-microscopie électronique (Cryo-ME) est une technique particulière pour préparer les échantillons en MET. Cette technique réduit l'impact du faisceau d'électrons qui cause la dégradation des échantillons et permet de mieux préserver la structure de l'échantillon proche de l'état vivant. Au contraire de la coloration ou du fixateur chimique, le principe de la Cryo-ME consiste à congeler très rapidement des échantillons sous forme hydratée dans l'éthane liquide. Comme le cadre d'étude de cette thèse est relié à cette technique, elle sera plus détaillée dans la partie 1.2.

1.1.2.3 Mécanique des matériaux

La tomographie est utilisée dans la mécanique des matériaux pour évaluer les informations quantitatives sur la densité, la dimension et la constitution des matériaux. Les données observées utilisant la tomographie sont aussi utiles pour déterminer les endroits où les défauts apparaissent dans les matériaux [16].

1.1.2.4 Géométrie convexe

La géométrie convexe étudie le problème de la reconstruction d'un ensemble convexe à partir de ses projections. Elle a bien été étudiée dans [17] où les ensembles convexes de \mathbb{Z}^2 sont reconstruits avec un nombre limité de projections (par exemple seulement sous quatre orientations de projection différentes). Une autre approche est d'extraire directement des propriétés des ensembles convexes à partir de leurs projections sans avoir besoin de reconstruire ces ensembles. L'estimation de l'aire et du périmètre d'un ensemble convexe sont par exemple étudiés dans [18].

La tomographie est aussi appliquée dans les domaines de la compression et de la sécurité des données [19], de la planification de personnel [20] et de l'imagerie tomographique radio [21, 22].

1.1.3 Tomographie continue et discrète

Nous présentons d'abord la transformée de Radon qui est la modélisation mathématique d'une acquisition tomographique. Soit (x,y) les coordonnées cartésiennes d'un point en 2D, f une fonction continue et à support compact des deux variables d'espace x et y . Soit $L_{t,\theta}$ un ensemble de lignes droites parallèles qui sont définies par $t = x \cos \theta + y \sin \theta$. La transformée de Radon $R_f(\theta,t)$ de $f(x,y)$ est définie par l'intégrale de f le long de la ligne $L_{t,\theta}$:

$$R_f(\theta,t) = \int_{L_{t,\theta}} f(x,y) dl, \quad (1.1)$$

où dl est un élément de longueur sur $L_{t,\theta}$. Une projection peut être définie comme la transformée de Radon selon une orientation fixée, notée par $p_\theta : t \mapsto R_f(\theta,t)$. Une illustration de la projection $p_\theta(t)$ est représentée sur la figure 1.2. La tomographie continue consiste à

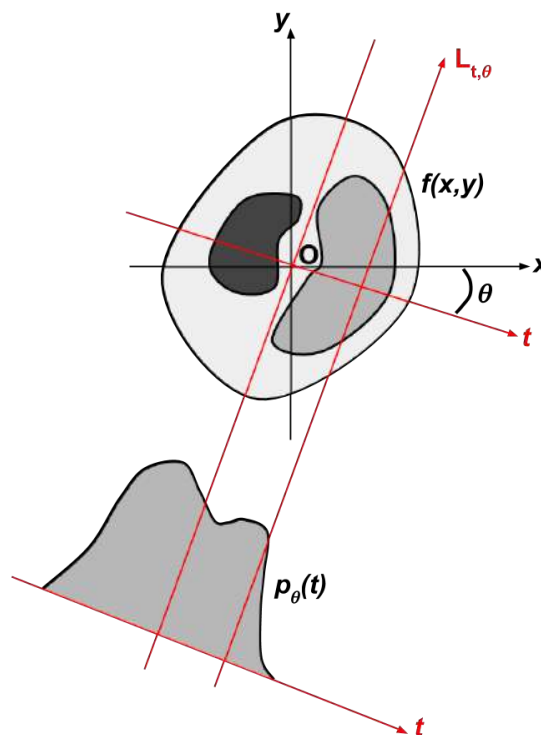


Figure 1.2: Représentation de la transformée de Radon.

reconstruire l'objet dans le cas où l'objet et ses projections sont définis de façon continue, pour tout $\theta \in \mathbb{R}$. Par exemple $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $p_\theta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ et $\theta \in \mathbb{R}$ (figure 1.3). Dans ce cas, l'objet peut être reconstruit à partir de ses projections par l'inversion de la transformée de Radon.

En pratique, il n'y a qu'un nombre limité d'orientations de projections qui sont réalisées, $\theta \in \{\theta_1, \dots, \theta_n\}$, et la projection obtenue est échantillonnée, $t \in \{t_1, \dots, t_m\}$, où $n, m \in \mathbb{Z}$. Cependant, la tomographie continue peut aussi être utilisée si n et m sont suffisamment grands. Plusieurs méthodes analytiques ont été développées et utilisées pour reconstruire l'objet. Par exemple la méthode de rétro-projection filtrée [23] est une méthode qui est utilisée couramment en tomographie continue. Les méthodes analytiques demandent une distribution uniforme de l'orientation de projection pour que le résultat de reconstruction ne soit pas dégradé, mais il y a aussi certains cas où cette condition est difficile à atteindre (par exemple, en tomographie des grands objets en aéronautique). Les méthodes algébriques [24, 25] peuvent être utilisées dans le cas où la distribution n'est pas nécessairement uniforme. L'inconvénient de ces méthodes algébriques est que le temps de calcul est plus long que celui des méthodes analytiques.

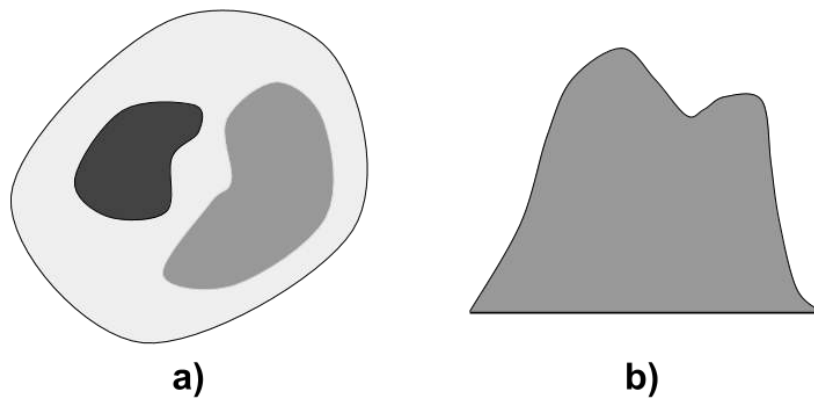


Figure 1.3: Exemple pour la tomographie continue : (a) la fonction $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, (b) la projection $p_\theta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

En revanche, la tomographie continue ne peut pas être utilisée dans le cas où le nombre de projections est très petit (deux ou trois) ou quand il y a une limitation du nombre de rayons de la source de diffraction. La tomographie discrète est utilisée au lieu de la tomographie continue pour ces cas. Contrairement au cas continu où l'image de la fonction à reconstruire et son domaine sont continus, dans le cas discret, l'image de la fonction à reconstruire est un ensemble discret et son domaine peut être discret ou continu [26]. Un problème particulier de la tomographie discrète est la reconstruction d'un objet binaire à partir d'un petit nombre de projections. Par exemple $f : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \{0,1\}$, $p_\theta : \mathbb{Z} \rightarrow \{0,1, \dots, 255\}$ et $\theta \in \{0, \pi/5, \dots, \pi\}$ (figure 1.4). Différentes méthodes basées sur la théorie algébrique, la géométrie convexe et combinatoire ont été étudiées et appliquées pour reconstruire l'objet en tomographie discrète. Il est à noter que les méthodes algébriques utilisées en tomographie discrète sont différentes de celles en tomographie continue en ce qu'elles permettent d'intégrer des connaissances a priori, par exemple la limitation des valeurs de la fonction à reconstruire, permettant ainsi de réduire le temps de calcul et d'améliorer la résolution de reconstruction. Les applications de la tomographie discrète sont par exemple les tests industriels non-destructifs, le contrôle de qualité en industrie des semi-conducteurs ou la sécurité de données, dans lesquels le nombre de projections est limité pour éviter d'endommager les spécimens. Le problème de la reconstruction de la tomographie discrète a été présenté dans les travaux de thèse de A. Daurat [17] et de F. Abdmouleh [18].

La tomographie continue est utilisée pour les applications en imagerie médicale ou en microscopie électronique où la condition sur le nombre de projections peut être amplement validée. Les travaux de cette thèse sont liés à la reconstruction tomographique en Cryo-ME dans laquelle un grand nombre de projections (≥ 1000) peut être obtenu selon des techniques spécifiques. La tomographie continue est donc utilisée dans le cadre de cette thèse.

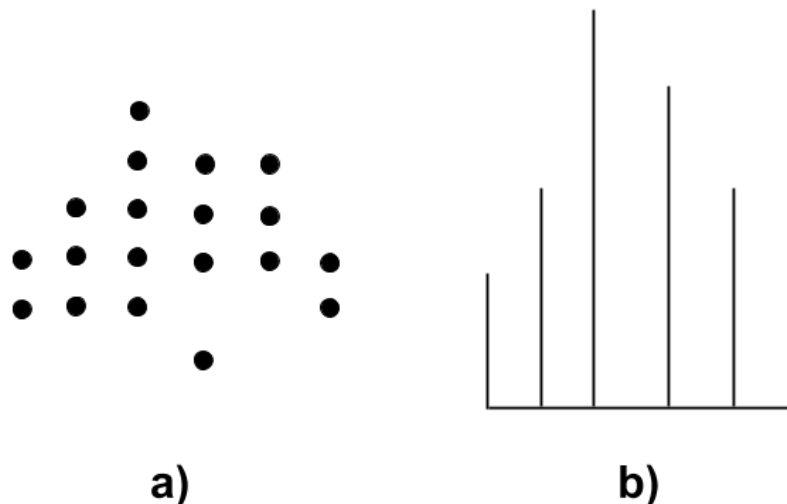


Figure 1.4: Exemple pour la tomographie discrète : (a) la fonction $f : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \{0,1\}$, (b) la projection verticale $p_\theta : \mathbb{Z} \rightarrow \{0,1,\dots,255\}$.

1.2 Tomographie en cryo-microscopie électronique

La Cryo-ME utilise la MET avec une technique de préparation spéciale pour éviter la dégradation de l'échantillon. Le froid est utilisé pendant l'étape de fixation afin de mieux préserver l'état naturel des molécules dans l'échantillon. Une présentation de la Cryo-ME peut être trouvée dans [15, 27, 28, 29, 30, 31].

1.2.1 Modalité d'acquisition

Une grille contenant une solution pure de l'échantillon est plongée dans de l'azote liquide à très basse température (environ -180°C). La solution contient plusieurs copies (quelques milliers ou millions) de la même molécule sous différentes orientations. La diminution rapide de la température empêche la cristallisation en glace de la solution, et ainsi permet d'éviter la détérioration de la molécule. Après l'étape de fixation, la grille d'échantillon est traversée par un faisceau d'électrons diffracté de la source d'électrons. Il est à noter que la source d'électrons, le détecteur et la grille d'échantillons sont fixes tout au long de l'acquisition. Le dispositif en Cryo-ME est illustrée sur la figure 1.5a.

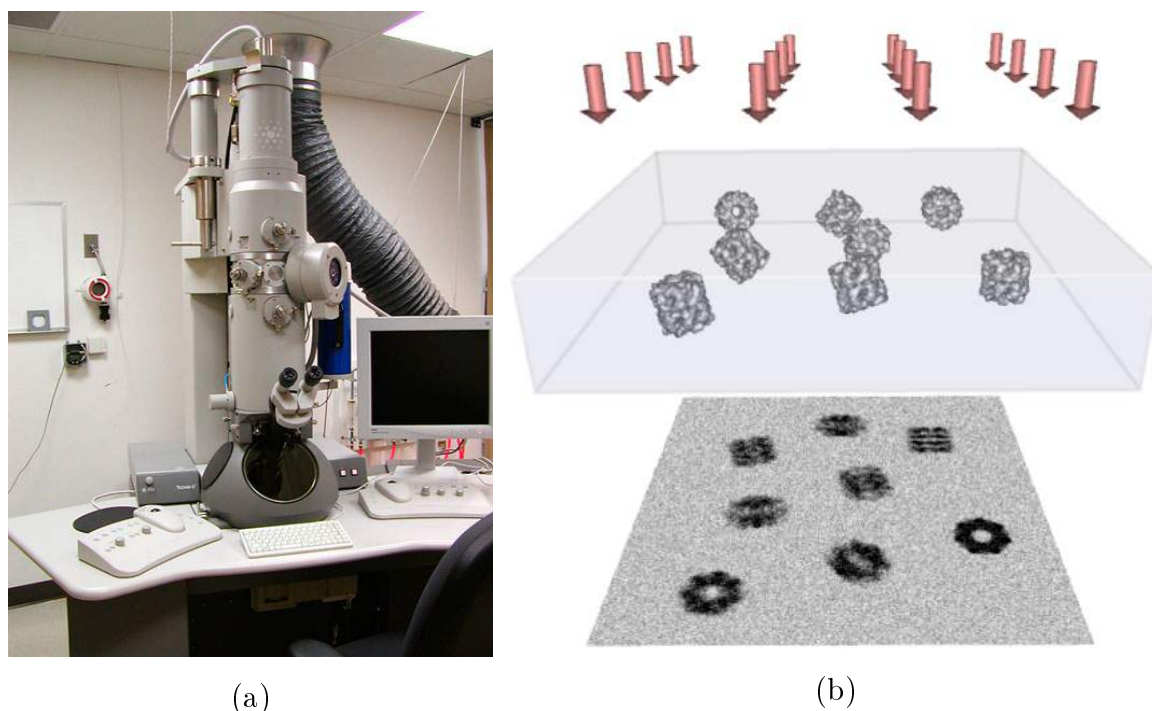


Figure 1.5: a) Le dispositif en Cryo-ME ; b) la modalité d'acquisition des images projetées d'une structure complexe : un faisceau d'électrons d'une source traverse un échantillon contenant plusieurs copies d'une même structure, puis plusieurs projections de cette structure sont obtenues sur le détecteur [31].

Le résultat obtenu sur le détecteur est formé par un plan d'image contenant les projections orthogonales des molécules. Cette technique permet de préserver les molécules dans la grille d'échantillon dans un état proche de leurs état naturel. Cependant, un des problèmes de cette technique est que les molécules sont positionnées selon des orientations inconnues dans la grille d'échantillon (figure 1.5b). Il en résulte donc des projections sans connaissance sur les orientations.

1.2.2 Enjeux de la cryo-microscopie électronique

L'objectif principal de la Cryo-ME est d'étudier la structure 3D d'une complexe chimique à partir de ses projections. Plusieurs macromolécules telles que l'ADN, des protéines ou polysaccharides ont déjà été observées en Cryo-ME sous une très haute résolution. Par

exemple : Böttcher *et al.* [32] ont réussi à obtenir la structure de la protéine nucléocapsidique du virus de l'hépatite B à la résolution 7,4 Å en 1997. Ou plus récemment, une résolution de 2,8 Å a été obtenue par Melody G Campbell *et al.* [33] pour des complexes enzymatiques protéasome 20S en 2015. Bien qu'une haute résolution de la structure de l'objet puisse être obtenue en Cryo-ME, il existe plusieurs inconvénient à cette modalité.

1.2.2.1 Dommage dû aux électrons

En raison d'une haute sensibilité de l'échantillon aux dommages d'irradiation causés par le faisceau d'électrons, l'échantillon doit être observé sous une dose d'électrons très faible afin de préserver les détails en haute résolution. Cependant, ce fait entraîne un très faible rapport signal à bruit (RSB) sur les images obtenues (≈ -20 dB). Toutes les images d'acquisition sont donc perturbées par du bruit très important.

1.2.2.2 Faible contraste

L'impact du faisceau électronique sur l'objet étudié cause une perte d'information principalement dans les hautes fréquences. Pour limiter cette perte d'information, l'intensité du faisceau est réduite. Il en résulte des images de très faible contraste. Le contraste de l'image est lié aux caractéristiques du microscope par la fonction de transfert de contraste (FTC) dont la valeur varie entre -1 (transfert de contraste négatif optimal) et 1 (transfert de contraste positif optimal). Les zones proches de zéro dans la FTC représentent des informations perdues de l'objet. Ces zones de zéro varient selon le paramètre de défocalisation. La configuration de la défocalisation est importante afin d'améliorer le contraste de l'objet.

1.2.2.3 Projections homogènes et hétérogènes

L'information sur les orientations des projections obtenues dans le plan du détecteur est perdue du fait de la technique d'acquisition. Les molécules dans la grille d'échantillon peuvent aussi tourner d'un angle inconnu autour de l'axe de projection. Il en résulte des

projections qui sont issues d'une même orientation (i.e. vue) mais avec différentes rotations dans le plan (figure 1.6b). De plus, il existe une translation inconnue pour chaque projection dans le plan d'image à cause du bruit perturbé durant l'étape de sélection des projections (figure 1.6a). On distingue les projections homogènes qui ont la même orientation des projections hétérogènes dont les orientations sont différentes. L'identification des projections homogènes et hétérogènes est cruciale dans le processus de reconstruction, mais ceci n'est pas toujours simple en raison du bruit important et du faible contraste.

1.2.2.4 Orientations inconnues

Dans la plupart des cas, les méthodes de reconstruction nécessitent de l'information sur les orientations des projections. Comme les orientations des projections sont inconnues en Cryo-ME, l'estimation des orientations est nécessaire afin de reconstruire l'objet. Cependant, l'estimation des orientations n'est pas facile en raison du bruit. Le détail des méthodes d'estimation des orientations est présenté dans la partie 1.3.

1.2.2.5 Conformation

Les images obtenues peuvent représenter différents états d'un même objet déformable. La plupart des méthodes actuelles de reconstruction sont développées pour reconstruire un objet dans un seul état. La qualité de la reconstruction peut donc être dégradée si les images ne sont pas identifiées et classifiées selon les états déformables avant la reconstruction. Nous supposons dans notre étude que les projections sont celles d'un objet avec un seul état.

1.2.3 Techniques d'analyse des particules isolées

L'analyse des particules isolées est un ensemble de techniques d'imagerie utilisées le long de la procédure de reconstruction, et permettant de traiter les problèmes en Cryo-ME ainsi d'améliorer la qualité de la reconstruction. La procédure d'analyse des particules isolées est détaillée dans [29] et est résumée dans le paragraphe suivant.

Un ensemble de données contenant environ mille collections d'images est acquis en Cryo-ME. Chaque collection possède une défocalisation différente et se compose de centaines de sous-collections où chaque sous-collection contient quelques milliers de particules. La première étape d'analyse des particules isolées est d'aligner et de fusionner les sous-collections de chaque collection. Ensuite, la défocalisation est déterminée pour chaque collection et utilisée pour corriger la fonction de transfert de contraste. Les informations perdues à cause de la défocalisation sont restaurées en fusionnant les collections de différentes défocalisations. L'étape suivante consiste à rassembler les images de particules à partir de la collection fusionnée. Ces images sont ensuite alignées, classifiées et moyennées pour augmenter le RSB. Cette étape est illustrée sur la figure 1.6.

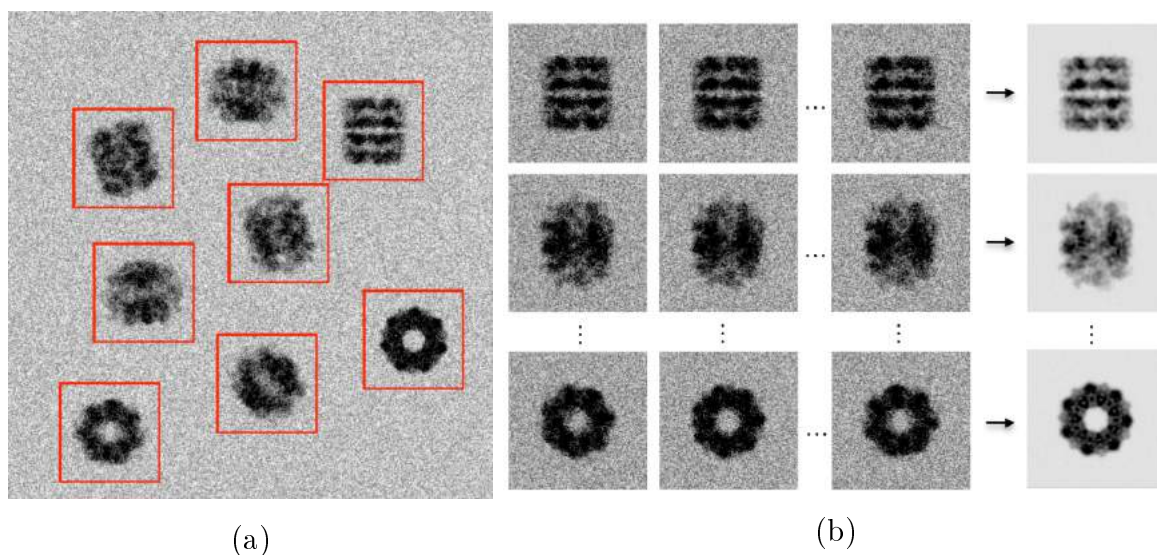


Figure 1.6: a) l'identification des images projetées ; b) l'alignement et la classification des images, puis le moyennage pour augmenter le RSB [31].

Après avoir obtenu un ensemble d'images moyennées et classifiées selon différentes orientations, l'étape suivante consiste à estimer les orientations de ces projections. Plusieurs méthodes différentes peuvent être utilisées telles que la méthode *Random Conical Tilt* [34] ou la méthode *Orthogonal Tilt Reconstruction* [35]. Ce sont des modalités d'ac-

quisition à plusieurs inclinaisons et plusieurs prises de vue qui fournissent un premier volume grossier. Le problème de ces méthodes est que l'objet reconstruit peut perdre certains détails. La méthode basée sur les moments [10] et la famille des méthodes basées sur le théorème de la ligne commune [36, 14, 7, 37] sont aussi utilisées. Le problème de ces méthodes est la sensibilité au bruit. Le détail des méthodes d'estimation d'orientation est présenté dans la partie 1.3. Plusieurs logiciels ont été développés sur ces méthodes et peuvent être trouvés dans [38, 39, 40]. Une fois l'affectation des orientations terminée, la structure initiale de la particule est obtenue en utilisant les méthodes de reconstruction qui seront présentées dans la partie 1.4.

Après avoir obtenu une reconstruction *ab initio* de l'objet, ce premier modèle de l'objet sera utilisé pour raffiner les orientations des projections. Un ensemble de projections sous différentes orientations est engendré à partir du premier modèle et utilisé comme une base de référence. Ensuite, les projections issues de l'acquisition sont comparées avec les projections de référence en utilisant la distance euclidienne ou la corrélation croisée. Les orientations des projections réelles sont remplacées par les orientations des projections de référence qui sont les plus corrélées avec les projections réelles, puis une nouvelle reconstruction de l'objet est faite. Ce cycle est répété plusieurs fois en étendant l'espace de génération des orientations. La procédure de raffinement est détaillée dans [8, 41, 42].

Un schéma général pour la procédure de la reconstruction en Cryo-ME est illustré sur la figure 1.7. Il est à noter que les étapes présentées dans le schéma ne sont pas nécessairement tous appliquées. Il existe aussi des méthodes en Cryo-ME dans lesquelles les projections ne sont pas classifiées (par exemple, le logiciel Relion développé par Scheres [42]).

1.3 Estimation des orientations

1.3.1 Random conical tilt

Les méthodes basées sur la technique Random Conical Tilt (RCT) sont utilisées souvent en microscopie électronique. La technique consiste à acquérir deux fois des images à partir de la grille d'échantillon. La première fois la grille n'est pas inclinée, puis la deuxième fois

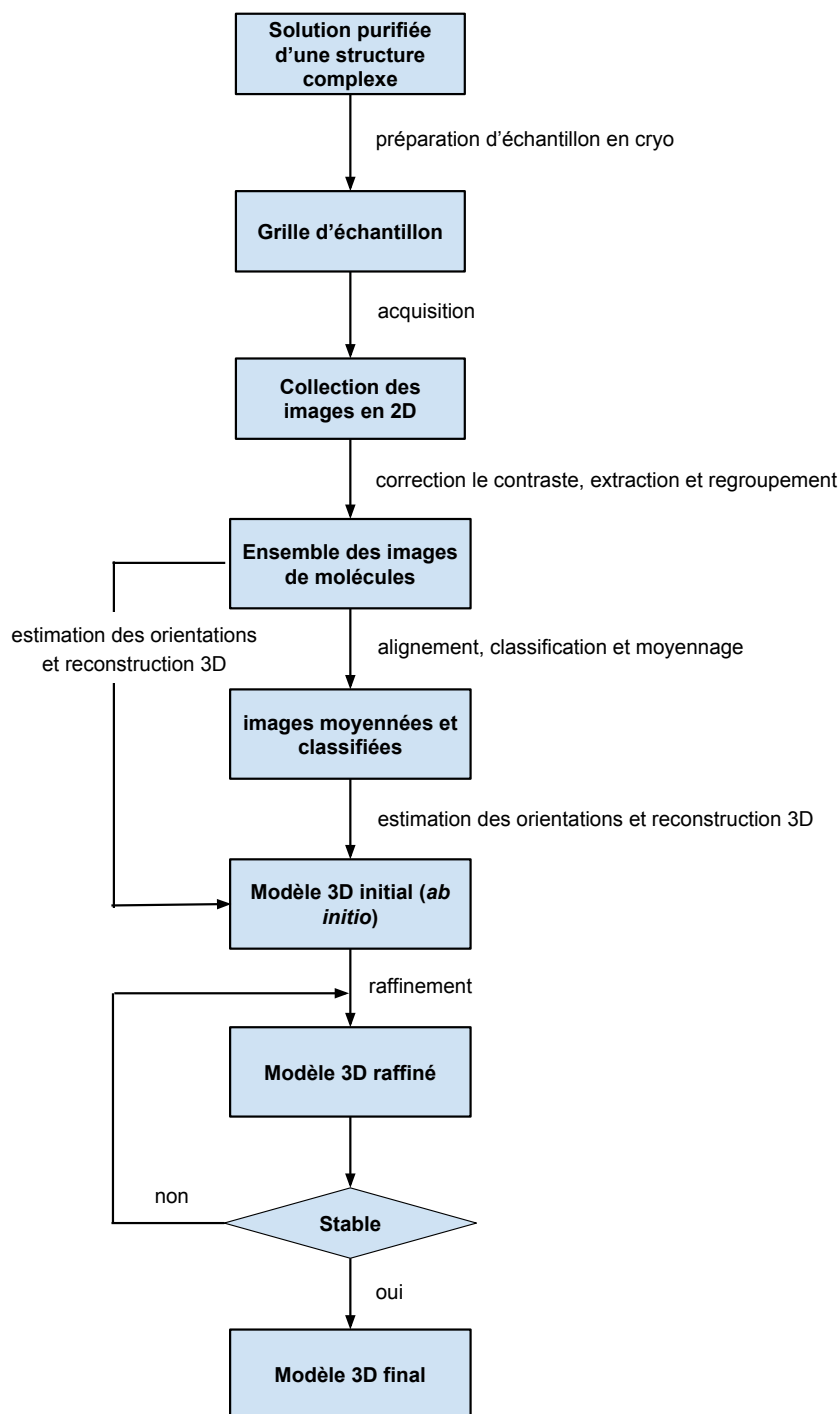


Figure 1.7: Schéma des techniques d'analyse des particules isolées.

la grille est inclinée d'un angle θ . Cette technique est illustrée sur la figure 1.8. Les images obtenues à partir de la grille non-inclinée sont d'abord alignées et classifiées selon des classes de différentes orientations. Les images dans chaque classe représentent une même vue de l'objet mais avec différentes rotations dans le plan. Les rotations des images sont calculées pour chaque classe. Ensuite, les images de la grille inclinée sont reliées aux classes de la grille non inclinée en fonction de leur position sur la grille. Cela permet d'obtenir des jeux de vues disposées suivant un cône comme illustré sur la figure 1.9a. Les orientations des images dans chaque classe de la grille inclinée sont déterminées en se basant sur les rotations calculées des images dans la même classe de la grille non-inclinée. Comme les images de chaque classe de la grille inclinée représentent l'objet selon différentes vues, elles sont donc utilisées pour reconstruire l'objet. Finalement, les reconstructions de différentes vues de l'objet sont obtenues pour chaque classe de la grille inclinée.

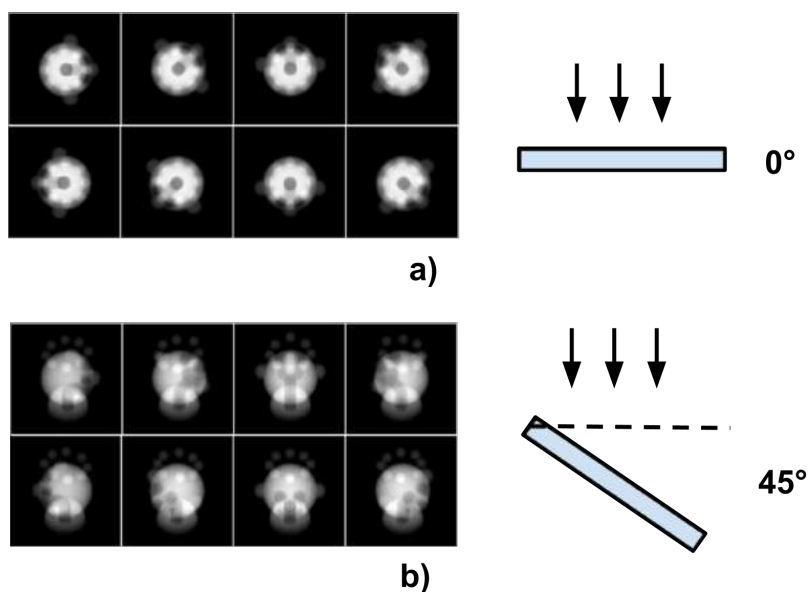


Figure 1.8: Les images obtenues par la technique RCT [43] : a) la grille d'échantillons est non-inclinée ; b) la grille d'échantillons est inclinée d'un angle $\theta = 45^\circ$.

La technique RCT a certaines limitations. Comme l'inclinaison de la grille génère des

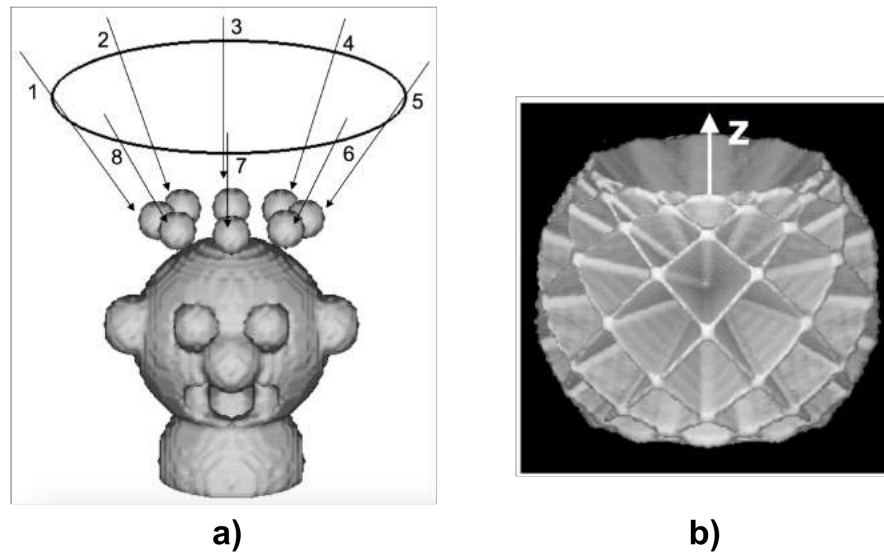


Figure 1.9: Le principe de la technique de RCT [43] : a) la représentation conique des projections dans la grille inclinée ; b) les projections dans l'espace de Fourier.

images sous des orientations d'une forme conique avec un angle θ , il existe des zones coniques dans lesquelles on ne peut pas acquérir d'images. Ceci entraîne des pertes d'information et limite la résolution de la reconstruction. Ce problème peut être illustré dans l'espace de Fourier où les plans de projection ne couvrent pas tout l'espace (figure 1.9b). En outre, dans le cas de la Cryo-ME, la dose d'électrons peut faire fondre la glace des échantillons lorsque la grille n'est pas encore inclinée. Cet effet provoque un déplacement des molécules entre les deux acquisitions. Ceci réduit donc la résolution de l'objet reconstruit.

Une alternative au RCT est la technique d'Orthogonal Tilt Reconstruction (OTR) qui est présentée dans [35]. La différence de l'OTR par rapport à la RCT est que la grille d'échantillons est inclinée deux fois, la première fois d'un angle $\theta = 45^\circ$, puis la deuxième fois d'un angle $\theta = -45^\circ$.

1.3.2 Ligne commune

Cette technique permet d'estimer l'orientation des images directement à partir de données moyennées, classifiées selon différentes vues. Elle se base sur le corollaire suivant (corollaire du théorème 1 présenté dans la partie 1.4) :

Corollaire 1 (Corollaire de la ligne commune). *Dans l'espace de Fourier 3D, deux projections correspondent à deux plans passant par l'origine qui s'intersectent en une ligne perpendiculaire à l'orientation des deux projections.*

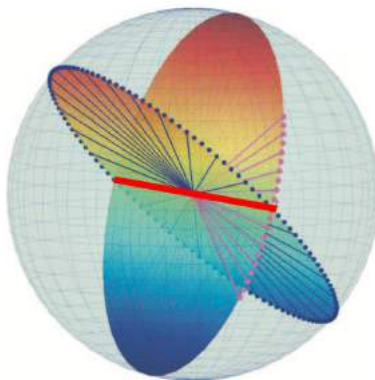


Figure 1.10: La représentation de la ligne commune entre deux projections dans l'espace de Fourier [37].

Le corollaire de la ligne de commune est illustré sur la figure 1.10. Le principe de la technique de la ligne commune est de rechercher deux lignes communes entre trois projections différentes. La recherche de la ligne commune peut être effectuée par l'examen de toutes les lignes qui passent par l'origine du plan de projection dans l'espace de Fourier comme illustré sur la figure 1.11. Cette recherche peut aussi être réalisée dans l'espace de Radon [7]. Une fois déterminées les deux lignes communes, leur relation spatiale est utilisée pour estimer les orientations relatives entre les trois projections. Cette procédure est répétée avec deux des trois premières projections et une autre projection ajoutée. Finalement, les

orientations de toutes les projections sont estimées et utilisées pour reconstruire l'objet en utilisant les méthodes de la partie précédente.

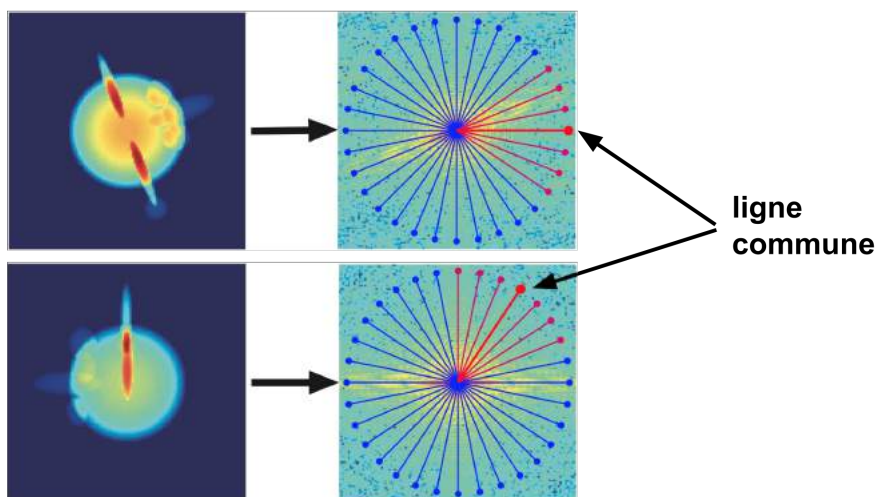


Figure 1.11: La recherche de ligne commune entre deux projections dans l'espace de Fourier [37].

En raison d'une sensibilité au bruit pour la recherche des lignes communes, la technique de la ligne commune ne fonctionne pas bien dans le cas d'un petit RSB. Cependant, le RSB peut être augmenté pendant le processus de classification. Elle est donc utilisée de préférence sur des images moyennées. Une autre limitation de la technique de la ligne commune est l'absence d'information sur la chiralité car deux projections issues de deux orientations inverses peuvent avoir une même ligne commune avec une autre projection.

1.3.3 Moments

Contrairement aux deux techniques précédentes qui fonctionnent uniquement en 3D, les méthodes basées sur les moments peuvent être utilisées en 2D [11] et en 3D [13, 10]. La technique des moments se base sur les relations entre les moments de l'objet et de ses

projections. Le moment d'ordre (c,d) de la fonction f peut être défini par

$$\mu_{c,d}(f) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} x^c y^d f(x,y) dx dy. \quad (1.2)$$

Soit p la projection orthogonale de f sur l'axe x . Le moment d'ordre c de p est défini par

$$\mu_c(p) = \int_{\mathbb{R}} x^c p(x) dx. \quad (1.3)$$

La première propriété importante est que certains moments de la fonction f et de sa projection p sont égaux

$$\mu_{c,0}(f) = \mu_c(p). \quad (1.4)$$

De plus, lorsque l'objet est tourné d'un angle θ , le moment d'ordre 2 de sa projection, noté $\mu_2(p_\theta)$, est tel que

$$\mu_2(p_\theta) = \cos^2 \theta \mu_{2,0}(f) + \sin^2 \theta \mu_{0,2}(f) + 2 \sin \theta \cos \theta \mu_{1,1}(f). \quad (1.5)$$

Pour calculer l'angle θ , les valeurs de $\mu_{2,0}$, $\mu_{0,2}$ et $\mu_{1,1}$ de la fonction f doivent être connues. Si f est centrée à l'origine, alors $\mu_{1,1} = 0$ en raison de la symétrie. En plus, $\mu_{2,0}$ et $\mu_{0,2}$ peuvent être calculés par la méthode présentée dans [10]. Le contenu de cette technique sera plus détaillée dans le chapitre 2.

Comme pour la ligne commune, la sensibilité des moments au bruit conduit à l'utiliser sur des données prétraitées.

1.4 Méthodes de reconstruction tomographique

Les méthodes de reconstruction tomographique pour des angles connus peuvent être classées en trois groupes : les méthodes d'inversion directe de la transformée de Fourier, les méthodes de rétroprojection et les méthodes algébriques [44]. Ces méthodes fonctionnent en 2D ainsi qu'en 3D, mais pour simplifier, toutes les méthodes seront présentées en 2D dans cette partie.

1.4.1 Méthode d'inversion directe de la transformée de Fourier

Les méthodes d'inversion directe de la transformée de Fourier se basent sur le théorème de la coupe centrale :

Théorème 1 (Théorème de la coupe centrale). *Soient $F(u,v)$ la transformée de Fourier de $f(x,y)$ et $S_\theta(w)$ la transformée de Fourier d'une projection $p_\theta(t)$ sous l'orientation θ . Alors*

$$S_\theta(w) = F(w \cos \theta, w \sin \theta). \quad (1.6)$$

Le théorème de la coupe centrale est illustré sur la figure 1.12. Dans l'espace de Fourier, chaque projection correspond à une droite qui est perpendiculaire à l'orientation de projection et qui passe par le centre de l'objet. La combinaison de l'ensemble des projections dans l'espace de Fourier et l'inversion de la transformée de Fourier permet donc de reconstruire l'objet [45].

$$f(x,y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(u,v) e^{j2\pi(ux+vy)} dx dy. \quad (1.7)$$

1.4.2 Méthode de rétro-projection

Les méthodes de rétro-projection permettent de reconstruire l'objet dans l'espace réel à partir des intégrales de projections [46].

$$f(x,y) = \int_0^\pi p_\theta(x \cos \theta + y \sin \theta) d\theta. \quad (1.8)$$

Le principe de la rétro-projection est illustré sur la figure 1.13. On voit que la qualité de reconstruction dépend du nombre de projections considérées. En pratique, le nombre de projection doit être suffisamment grand pour avoir une bonne reconstruction.

Cependant, même lorsqu'on a de nombreuses projections, l'image reconstruite peut être floue en raison de la contribution des projections sur tous les pixels de l'image. Les projections doivent être filtrées avant d'être utilisées pour la reconstruction. Ceci est appelé la rétro-projection filtrée [47] (voir figure 1.14).

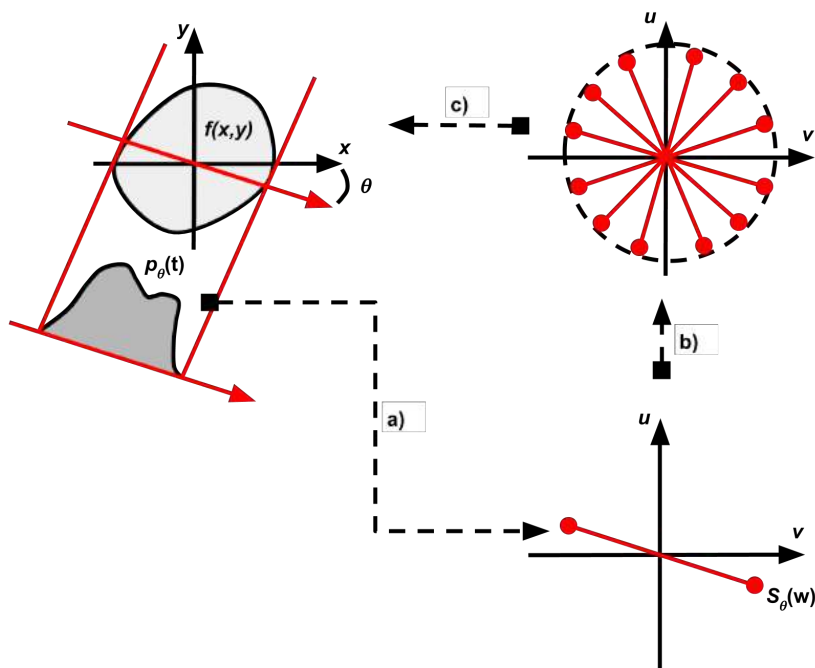


Figure 1.12: Méthode d'inversion de Fourier directe : a) transformée de Fourier de la projection ; b) ensemble des projections dans l'espace de Fourier ; c) transformée de Fourier inverse.

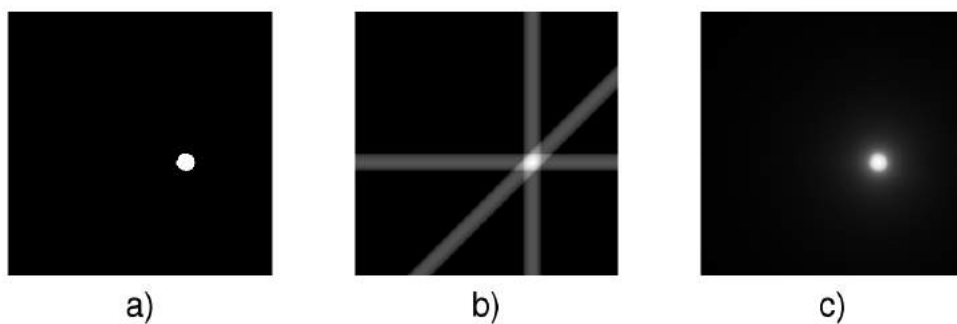


Figure 1.13: Reconstruction par rétro-projections [23] : a) : image initiale ; b) trois projections ; c) nombreuses projections.

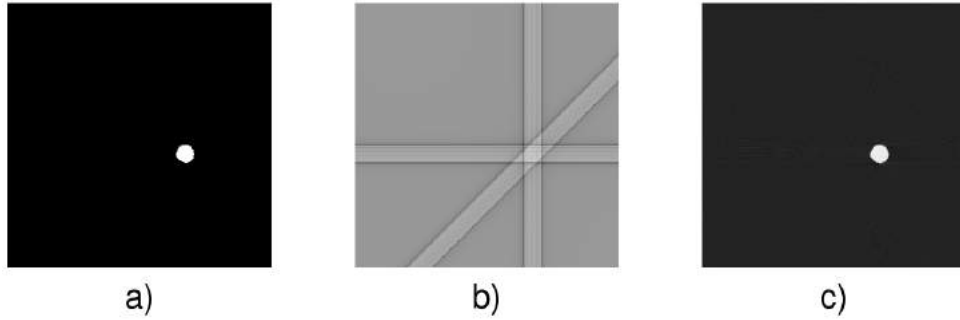


Figure 1.14: Reconstruction par rétro-projections filtrées [23] : a) : image initiale ; b) trois projections filtrées ; c) nombreuse projections.

1.4.3 Méthodes algébriques

Les deux familles de méthodes évoquées ci-dessus reposent sur la formule analytique pour reconstruire l'objet et demandent une infinité de projections, ainsi qu'une distribution uniforme des orientations de projections pour pouvoir converger. Les méthodes algébriques [46] proviennent de la modélisation de l'objet comme un tableau de pixels et de la linéarité de l'opération de projection. Il en résulte un système linéaire à résoudre pour retrouver l'objet. Il peut être inversé directement dans des cas très simples mais en général c'est difficile, ce qui conduit d'une part à une résolution itérative et d'autre part, à se limiter au cas où le nombre de projection n'est pas trop grand.

Le principe des méthodes algébriques est illustré sur la figure 1.15 dans laquelle f_j , $j = 1 \dots M$ est l'ensemble de pixels à reconstruire ; p_i , $i = 1 \dots N$ est l'ensemble des rayons de projection et w_{ij} est la contribution du pixel f_j sur le rayon p_i . Le problème est de résoudre le système d'équations suivant :

$$\sum_{j=1}^M w_{ji} f_j = p_i, \quad i = 1 \dots N. \quad (1.9)$$

Une approche itérative est utilisée pour résoudre le système d'équations ci-dessus comme illustré sur la figure 1.16 pour le cas de deux rayons et deux pixels à reconstruire. Ceci est expliqué comme suit : un point initialisé $f^{(0)}$ est choisi aléatoirement dans l'espace des solutions, puis ce point est projeté sur la droite p_1 pour obtenir une nouvelle solution $f^{(1)}$. Ensuite une nouvelle solution $f^{(2)}$ est obtenue par la projection de $f^{(1)}$ sur p_2 . Ce

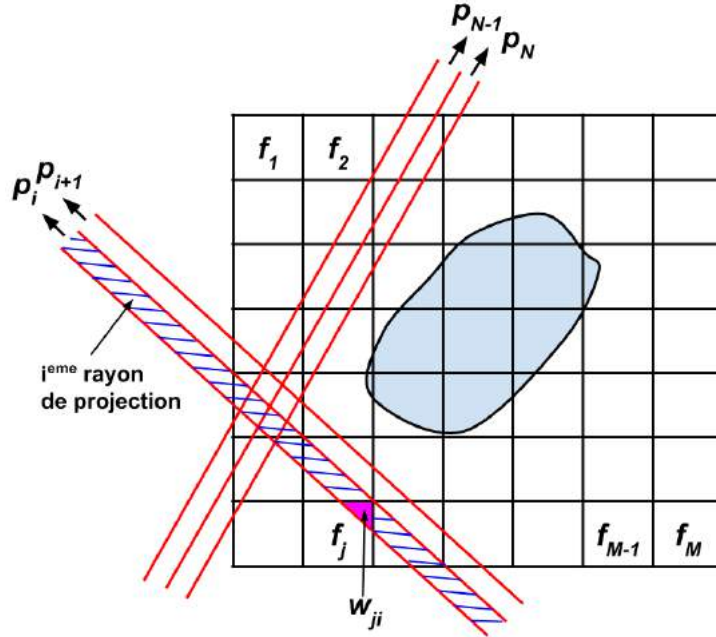


Figure 1.15: Géométrie des méthodes algébriques : la matrice à reconstruire contient M pixels f_j ; les projections sont divisées en N rayons p_i ; les contributions des pixels f_j sur les rayons de projections sont données par une matrice pondérée W , où w_{ji} est la contribution du pixel f_j sur le rayon de projection p_i .

processus est répété jusqu'à la convergence vers la solution optimale. La valeur à ajouter au pixel j à l'itération i peut être calculée par

$$\Delta f_j^{(i)} = \frac{p_i - q_i}{\sum_{k=1}^N w_{ik}} w_{ij}, \quad (1.10)$$

où $q_i = \sum_{k=1}^N f_k^{(i-1)}$ (pour plus de détail voir [46]).

Les méthodes algébriques les plus utilisées sont la méthode ART (*Algebraic Reconstruction Technique*) [24] et la méthode SIRT (*Simultaneous Iterative Reconstruction Technique*) [25]

1.4.3.1 Méthode ART

Pour la méthode ART, la valeur de w_{ik} dans l'équation (1.10) est égale soit à 1 si le centre du pixel k est dans le rayon p_i , soit à 0 sinon. Alors $\Delta f_j^{(i)}$ est égal 0 pour les pixels

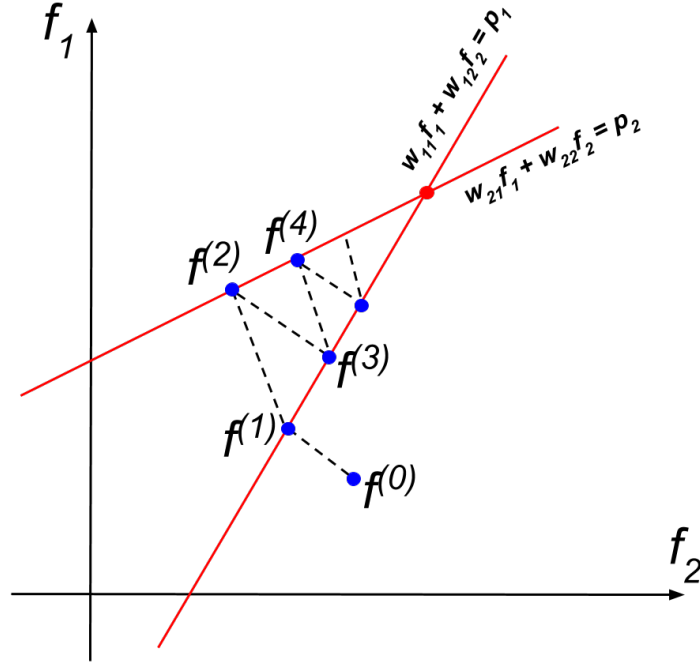


Figure 1.16: Méthode itérative pour résoudre le système d'équations linéaires dans le cas de deux pixels et deux rayons.

dont les centres ne sont pas dans le rayon p_i . Ainsi, $\Delta f_j^{(i)}$ est calculé par

$$\Delta f_j^{(i)} = \frac{p_i - q_i}{N_i}, \quad (1.11)$$

où N_i est le nombre de pixels dont les centres sont dans le rayon p_i .

1.4.3.2 Méthode SIRT

Pour la méthode SIRT, $\Delta f_j^{(i)}$ n'est pas ajouté toute de suite au pixel f_j , les valeurs de $\Delta f_j^{(i)}$ sont stockées pendant le parcours à partir du premier rayon p_1 jusqu'au dernier rayon p_N . Une fois qu'on arrive au dernier rayon p_N , les valeurs de $\Delta f_j^{(i)}$ sont moyennées et ajoutées au pixel f_j .

1.5 Reconstruction conjointe

Il existe des méthodes permettant de reconstruire conjointement l'objet et les orientations comme présenté dans [9, 48]. Soit $f^{(0)}$ la solution initiale de la fonction f à reconstruire. Soit $\Theta^{(0)} = \{\theta_1^{(0)}, \theta_2^{(0)}, \dots, \theta_n^{(0)}\}$ l'ensemble ordonné des angles initiaux qui sont associés à l'ensemble des projections $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$, où $n \in \mathbb{N}$ est le nombre de projections. La reconstruction conjointe consiste en une procédure d'optimisation itérative dans laquelle, à chaque itération, une nouvelle solution $(f^{(i)}, \Theta^{(i)})$ est obtenue à partir de la solution précédente. Ensuite, un nouvel ensemble des projections $P^{(i)} = \{p_1^{(i)}, p_2^{(i)}, \dots, p_n^{(i)}\}$ est calculé et comparé avec l'ensemble des projections originales P , où $p_k^{(i)}$ est la projection obtenue à partir de $f^{(i)}$ et $\theta_k^{(i)}$. La comparaison est réalisée avec la fonction de coût Δ définie par

$$\Delta(f^{(i)}, \Theta^{(i)}) = \sum_{k=1}^n \|p_k - p_k^{(i)}\|_2^2. \quad (1.12)$$

1.6 Mesures de la similarité/dissimilarité entre deux projections

Pendant la procédure de reconstruction tomographique pour les orientations inconnues, il est inévitable de mesurer la similarité ou la dissimilarité entre deux projections à partir de l'ensemble des projections.

1.6.1 Alignement des projections

Le processus d'alignement des projections peut être trouvé dans [8]. Deux projections sont alignées pour prendre en compte toutes les positions relatives des deux projections (générées par la rotation et le décalage d'une projection par rapport à l'autre), puis trouver la position qui minimise la dissimilarité ou maximise la similarité entre ces deux projections. La mesure de la dissimilarité la plus utilisée est la distance euclidienne. Étant donnée qu'une projection en 2D peut être considérée comme une image de k pixels. Soient

p_1, p_2 deux projections en 2D. L'alignement entre deux projections p_1 et p_2 est la détermination d'une rotation $R_\alpha \in \text{SO}(2)$ et d'une translation $r \in \mathbb{R}^2$ telles que

$$(R_\alpha, r) = \underset{R_\alpha \in \text{SO}(2), r \in \mathbb{R}^2}{\operatorname{argmin}} \text{DE}_{1,2}^2(R_\alpha, r), \quad (1.13)$$

où $\text{DE}_{1,2}(R_\alpha, r) = \left(\sum_{i=1}^k (p_1(x_i) - p_2(R_\alpha x_i + r))^2 \right)^{1/2}$ qui est la distance euclidienne entre p_1 et la transformation de p_2 .

Ensuite, si on ré-écrit $\text{DE}_{1,2}^2$ par

$$\text{DE}_{1,2}^2(R_\alpha, r) = \sum_{i=1}^k p_1(x_i)^2 + \sum_{i=1}^k p_2(x_i)^2 - 2 \sum_{i=1}^k (p_1(x_i) p_2(R_\alpha x_i + r)), \quad (1.14)$$

les deux premiers termes dans (1.14) sont invariants par la transformation $x_i \rightarrow R_\alpha x_i + r$. Alors, le problème de minimisation dans (1.13) devient le problème de maximisation comme suit

$$(R_\alpha, r) = \underset{R_\alpha \in \text{SO}(2), r \in \mathbb{R}^2}{\operatorname{argmax}} \omega_{1,2}(R_\alpha, r), \quad (1.15)$$

où $\omega_{1,2}(R_\alpha, r) = \sum_{i=1}^k p_1(x_i) p_2(R_\alpha x_i + r)$ qui est appelé la fonction de corrélation croisée. Une version normalisée de $\omega_{1,2}(R_\alpha, r)$, appelée le coefficient de corrélation croisée, est présentée dans [8]. On constate que l'alignement des projections utilisant la distance euclidienne ou le coefficient de corrélation croisée sont des deux procédures équivalentes.

1.6.2 Classification des projections

Les projections peuvent être classifiées selon leurs orientations. Plus précisément, les projections dont les orientations sont proches doivent être regroupées dans une même classe. Chaque classe représente donc une vue différente de l'objet. Plusieurs techniques ont été utilisées pour classifier les projections telles que le partitionnement en k -moyennes [49], le regroupement hiérarchique [50], ou une approche hybride par la combinaison des deux dernières [51]. Dans ces techniques, la construction de la matrice de dissimilarité ou

de similarité entre les projections est cruciale et la distance euclidienne ou le coefficient de corrélation croisée est couramment utilisé.

1.6.3 Raffinement des projections

La distance euclidienne et le coefficient de corrélation sont aussi utilisés pendant l'étape de raffinement des projections. Comme nous l'avons présenté dans la partie 1.2.3, le premier volume reconstruit est considéré comme un modèle de référence. Il est utilisé pour générer un ensemble de projections de référence selon des orientations données. Ensuite, la dissimilarité ou la similarité entre chaque projection de l'objet et chaque projection du modèle est mesurée en utilisant la distance euclidienne ou le coefficient de corrélation croisée. L'orientation des projections de l'objet est ensuite raffinée selon l'orientation de la projection du modèle qui minimise/maximise leur dissimilarité/similarité. Cette itération est répétée jusqu'à ce que la variation entre deux modèles consécutifs devient négligeable.

1.6.4 Estimation des orientations

Les orientations des projections peuvent être estimées par la construction d'un graphe de voisinage dont les sommets sont des projections, les arêtes relient les projections voisines. Les projections voisines sont définies comme les projections dont les orientations sont proches. Afin de déterminer les voisins de chaque projection, la distance euclidienne est calculée entre n'importe quel couple de projections, puis les voisins de chaque projection sont choisis par seuillage ou l'approche des k -plus proches voisins. Ensuite, plusieurs techniques de réduction dimensionnelle non-linéaire peuvent être utilisées pour estimer les orientations des projections à partir du graphe de voisinage construit.

1.6.5 Relation entre projections et leurs orientations

La distance euclidienne (resp. le coefficient de corrélation croisée) calculée entre deux projections est considérée comme ayant une relation avec les orientations des deux projections, par exemple dans les étapes de classification, de raffinement des projections, ou

bien pour l'estimation des orientations des projections présentées ci-dessus. Plus précisément, deux projections dont la différence angulaire entre les orientations est petite devraient aussi être séparées par une petite distance euclidienne et vice-versa. Cependant, la relation entre la distance euclidienne et la différence angulaire de deux projections est non-monotone, même pour deux projections proches. Nous montrons dans la partie expérimentale que la dispersion de la distance euclidienne par rapport à la différence angulaire entre deux projections est grande même pour des projections voisines. L'utilisation d'une telle mesure non-monotone peut donc conduire à des erreurs pendant les étapes de classification ou de raffinement des projections. L'étude d'une mesure qui représente mieux la relation spatiale entre deux projections est l'objet principal de ce travail.

1.7 Conclusion

Nous avons introduit dans ce chapitre les notions principales de la tomographie et ses applications dans plusieurs domaines. La différence entre la tomographie discrète et la tomographie continue est présentée. La tomographie continue est utilisée dans le cadre de cette thèse car il est adapté aux données de la cryo-microscopie électronique sur lequel nous travaillons. L'objectif principal de la tomographie en cryo-microscopie électronique est la reconstruction du volume 3D de l'objet à partir de l'ensemble de ses projections dont les orientations sont inconnues. Les techniques d'acquisitions des projections, les méthodes d'analyse des images, d'estimation des orientations et de reconstruction de l'objet ont été expliquées. Durant la procédure de la reconstruction tomographique, la mesure de la dissimilarité ou la similarité entre deux projections est une étape importante et inévitable. Les deux mesures de dissimilarité et de similarité les plus souvent utilisées sont la distance euclidienne et le coefficient de corrélation croisée. Dans la suite du mémoire, nous proposons une autre mesure qui permet d'estimer la différence angulaire entre deux projections lorsque leurs orientations sont inconnues. Comme la caractérisation des projections et leurs orientations en 2D est différente avec celle en 3D, le problème d'étude de la différence angulaire entre deux projections est présenté séparément dans le chapitre 2 pour le cas 2D et dans le chapitre 3 pour le cas 3D.

Estimation de la différence angulaire en 2D

Sommaire

2.1	Notions de base	40
2.1.1	Projection	40
2.1.2	Moments et leur relation avec les orientations de projection	42
2.1.3	Différence angulaire entre deux projections	44
2.2	Problème d'estimation de la différence angulaire	46
2.3	Méthode d'estimation de la différence angulaire	47
2.3.1	Recherche des voisins pour chaque projection	47
2.3.2	Formules d'estimation de la différence angulaire	50
2.3.3	Algorithme d'estimation de la différence angulaire	55
2.4	Traitement du bruit	56
2.4.1	Débruitage de l'ensemble des projections	57
2.4.1.1	Analyse en composantes principales	57
2.4.1.2	Filtre de Singer-Wu	58
2.4.2	Estimation des moments extrêmes	61
2.4.3	Débruitage du graphe de voisinage	65

2.5	Estimation de la différence angulaire par l'estimation des angles	66
2.6	Conclusion	68

L'estimation de la différence angulaire entre deux projections en 2D est présentée dans ce chapitre. Nous appelons objet dans \mathbb{R}^2 une fonction intégrable au sens de la mesure de Lebesgue $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow [0,1]$ telle que le support \mathcal{S}_f de f soit un ensemble compact de \mathbb{R}^2 où \mathcal{S}_f est l'adhérence de l'ensemble $\{x \in \mathbb{R}^2 | f(x) \neq 0\}$. Nous définissons aussi le barycentre $C : (x_C, y_C)$ de f — centre de gravité de l'objet — comme suit :

$$x_C = \frac{\int \int x f(x,y) dx dy}{\int \int f(x,y) dx dy}, \tag{2.1}$$

$$y_C = \frac{\int \int y f(x,y) dx dy}{\int \int f(x,y) dx dy}.$$

Les notions de base utilisées dans ce chapitre sont introduites dans le paragraphe suivant.

2.1 Notions de base

2.1.1 Projection

On écrit $SO(2)$ pour le groupe de toutes les rotations autour de l'origine dans \mathbb{R}^2 . La rotation d'un point dans \mathbb{R}^2 d'un angle $\theta \in \mathbb{R}$ autour de l'origine est représentée par la matrice $R_\theta \in SO(2)$

$$R_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \tag{2.2}$$

La définition des projections a été présentée dans le chapitre précédent. La projection peut aussi être définie de la manière suivante :

Étant donné un objet de \mathbb{R}^2 , sa projection sur l'axe x suivant un angle $\theta \in \mathbb{R}$ peut être obtenue par la rotation d'angle $-\theta$ du système de coordonnées, puis par la projection de l'objet sur le *nouvel* axe x (figure 2.1). La définition de la projection en 2D est alors la suivante :

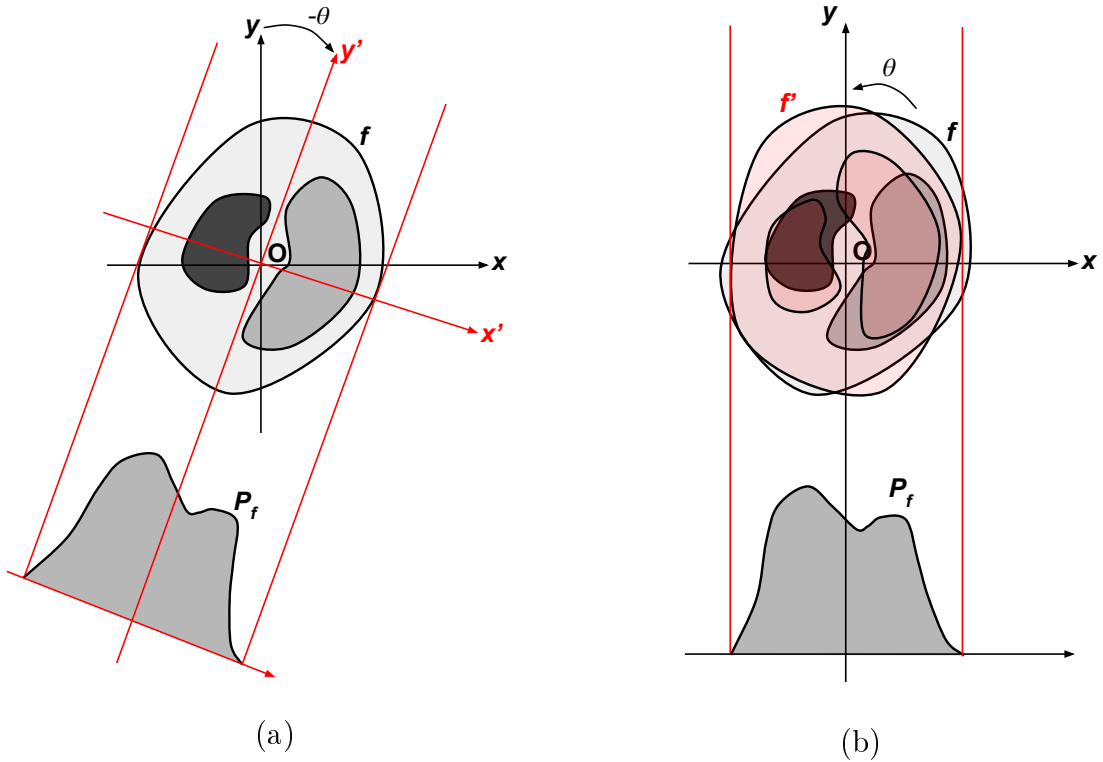


Figure 2.1: En 2D, la projection \mathcal{P}_f est obtenue de deux manières alternatives : soit (a) en tournant xOy d'un angle $-\theta$ et projetant orthogonalement f sur l'axe Ox' , soit (b) en tournant f d'un angle θ et projetant orthogonalement f' sur l'axe Ox .

Définition 1 (Projection 2D). Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow [0,1]$ un objet 2D et soit $\theta \in \mathbb{R}$. La projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ de f selon l'angle θ est définie par

$$\mathcal{P}_f(\theta)(x) = \int_{\mathbb{R}} f_{\theta}(x,y) dy, \quad (2.3)$$

où $f_{\theta}(x,y) = f(\rho_{\theta}(x,y))$ est la rotation de f suivant l'angle θ et $(\rho_{\theta}(x,y))^T = R_{\theta}(x,y)^T$ avec $R_{\theta} \in \text{SO}(2)$.

Il est à noter que $\mathcal{P}_f(\theta)(x) = \mathcal{P}_f(\theta + \pi)(-x)$. Ceci représente une propriété de symétrie pour les couples de projections dont les angles diffèrent de π (figure 2.2b et c).

Lorsque les projections sont représentées en fonction des angles θ , on obtient un *sino-gramme* comme illustré sur la figure 2.2a où chaque colonne correspond à une projection

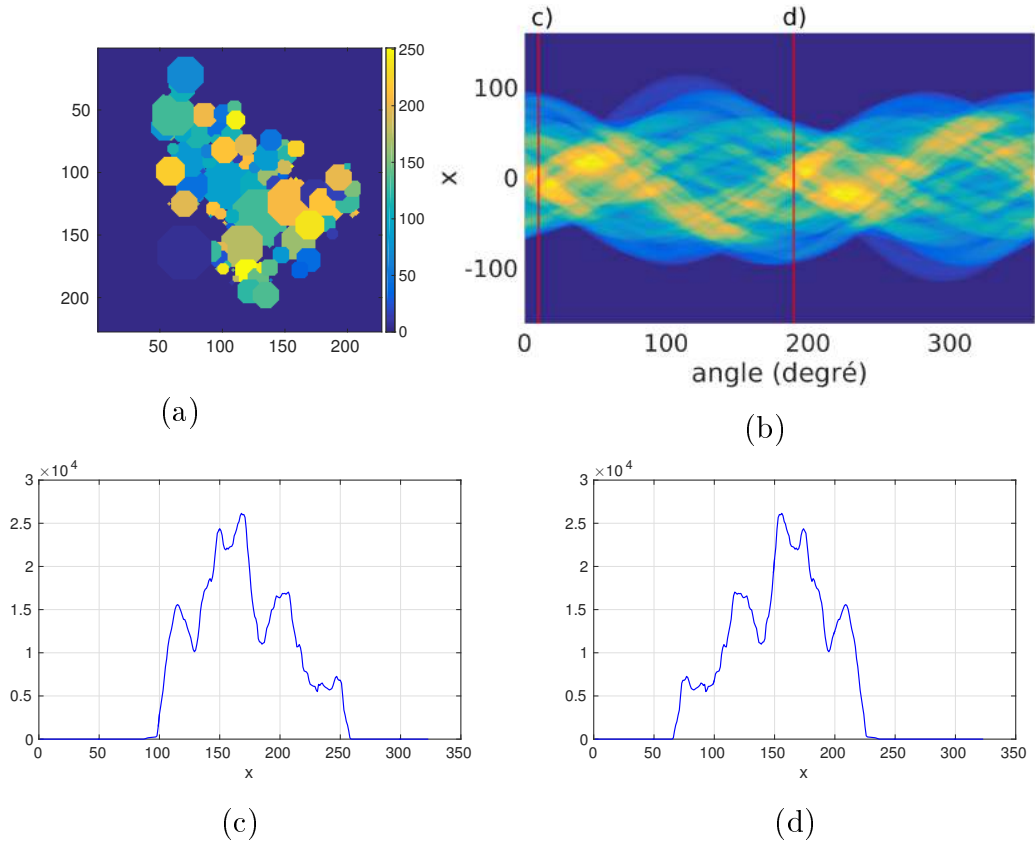


Figure 2.2: a) objet 2D, b) sinogramme de l'objet : chaque colonne correspond à une projection à un angle θ spécifié, c) projection à l'angle 10° , d) projection suivant l'angle $190^\circ = 10^\circ + 180^\circ$. Ces deux projections sont symétriques.

selon un angle θ spécifié. Le sinogramme se compose de plusieurs sinusoïdes en fonction de θ . Dans le cas où les angles de projection sont inconnus, on obtient un sinogramme dans lequel les colonnes sont permutées comme illustré sur la figure 2.3.

2.1.2 Moments et leur relation avec les orientations de projection

Le moment d'ordre $(c,d) \in \mathbb{N}$ de la fonction f est donné par

$$\mu_{c,d}(f) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} x^c y^d f(x,y) dx dy. \quad (2.4)$$

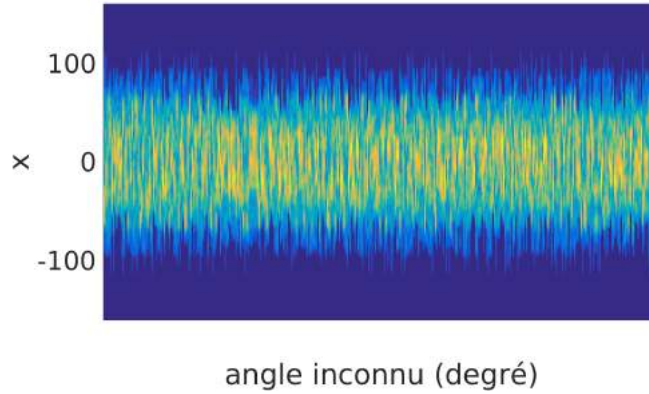


Figure 2.3: Le sinogramme pour des angles inconnus. Les colonnes du sinogramme sont permutées.

On rappelle aussi le moment d'ordre $q \in \mathbb{N}$ d'une fonction mesurable $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$

$$\mu_d(g) = \int_{\mathbb{R}} x^q g(x) dx. \quad (2.5)$$

Lorsque f_θ est projeté sur l'axe x , certains moments de f_θ sont préservés sur les moments de projection $\mathcal{P}_f(\theta)$.

Propriété 1 (Conservation des moments, [10]). Soit $c \in \mathbb{N}$. Le moment d'ordre $(c,0)$ de la fonction f_θ est égal au moment d'ordre c de la projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ de f_θ

$$\mu_{c,0}(f_\theta) = \mu_c(\mathcal{P}_f(\theta)). \quad (2.6)$$

Si le barycentre de f_θ est à l'origine, le barycentre de $\mathcal{P}_f(\theta)$ est aussi à l'origine. Ceci donne $\mu_{1,0}(f_\theta)$, $\mu_{0,1}(f_\theta)$, $\mu_{1,1}(f_\theta)$ et $\mu_1(\mathcal{P}_f(\theta)) = 0$. En outre pour le moment d'ordre 2, on a la propriété suivante :

Propriété 2 (Somme invariante, [52]). Soit $\mu_{2,0}(f_\theta)$ et $\mu_{0,2}(f_\theta)$ les moments d'ordres $(2,0)$ et $(0,2)$ de la fonction f_θ . Il existe une constante $C \in \mathbb{R}$ telle que

$$\mu_{2,0}(f_\theta) + \mu_{0,2}(f_\theta) = C, \quad \forall \theta \in \mathbb{R}. \quad (2.7)$$

Par ailleurs, le moment $\mu_d(\mathcal{P}_f(\theta))$ de la projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ est un polynôme trigonométrique de degré d en fonction de $\phi = (\cos \theta, \sin \theta) \in \text{SO}(2)$ [53]. L'expression de $\mu_d(\mathcal{P}_f(\theta))$ est donnée dans la propriété suivant [53].

Propriété 3 ([53]). Soit $d \in \mathbb{N}$. Le moment d'ordre d de la projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ est donné par

$$\mu_d(\mathcal{P}_f(\theta)) = \sum_{\substack{0 \leq k \leq d \\ k \equiv d \pmod{2}}} a_k \cos(k\theta) + b_k \sin(k\theta). \quad (2.8)$$

On peut obtenir à partir de la propriété 3 que $\mu_d(\mathcal{P}_f(\theta)) = (-1)^d \mu_d(\mathcal{P}_f(\theta + \pi))$. Ceci montre qu'il n'y a que les moments d'ordre pair qui sont π -périodiques. Un exemple de moments d'ordre d pour différentes valeurs de d est présenté sur la figure 2.4.

En particulier, l'utilisation de la propriété 3 pour le moment d'ordre 2 nous donne la propriété suivante :

Propriété 4 ([10]). Soit $\mu_{f,2}^{max}, \mu_{f,2}^{min}$ le moment maximal et minimal de la projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ pour $\theta \in \mathbb{R}$. Si l'origine des angles est choisie de telle façon que $\mu_2(\mathcal{P}_f(\theta = 0)) = \mu_{f,2}^{max}$, alors le moment d'ordre 2 de $\mathcal{P}_f(\theta)$ est donné par

$$\mu_2(\mathcal{P}_f(\theta)) = \mu_{f,2}^{max} - (\mu_{f,2}^{max} - \mu_{f,2}^{min}) \sin^2 \theta, \quad (2.9)$$

où $\mu_{f,2}^{max} = \max_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_2(\mathcal{P}_f(\theta))$, $\mu_{f,2}^{min} = \min_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_2(\mathcal{P}_f(\theta))$.

La propriété 4 montre une relation importante entre les angles θ et les moments d'ordre 2 qui sera utilisée dans la suite pour le problème de l'estimation de la différence angulaire. Le détail de la propriété 4 est donné dans l'annexe A.1.

Désormais, pour alléger les notations, on note $\mu_{f,d}(\theta) = \mu_d(\mathcal{P}_f(\theta))$ le moment d'ordre d de la projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ de f .

2.1.3 Différence angulaire entre deux projections

Nous définissons la différence angulaire entre deux projections $\mathcal{P}_f(\theta_i)$ et $\mathcal{P}_f(\theta_j)$ comme l'angle minimal entre deux droites passant par l'origine et faisant un angle θ_i et θ_j avec l'axe des abscisses. Elle est définie par

$$d_{\text{ang}}(\mathcal{P}_f(\theta_i), \mathcal{P}_f(\theta_j)) = \min(|\theta_i - \theta_j|, \pi - |\theta_i - \theta_j|), \quad (2.10)$$

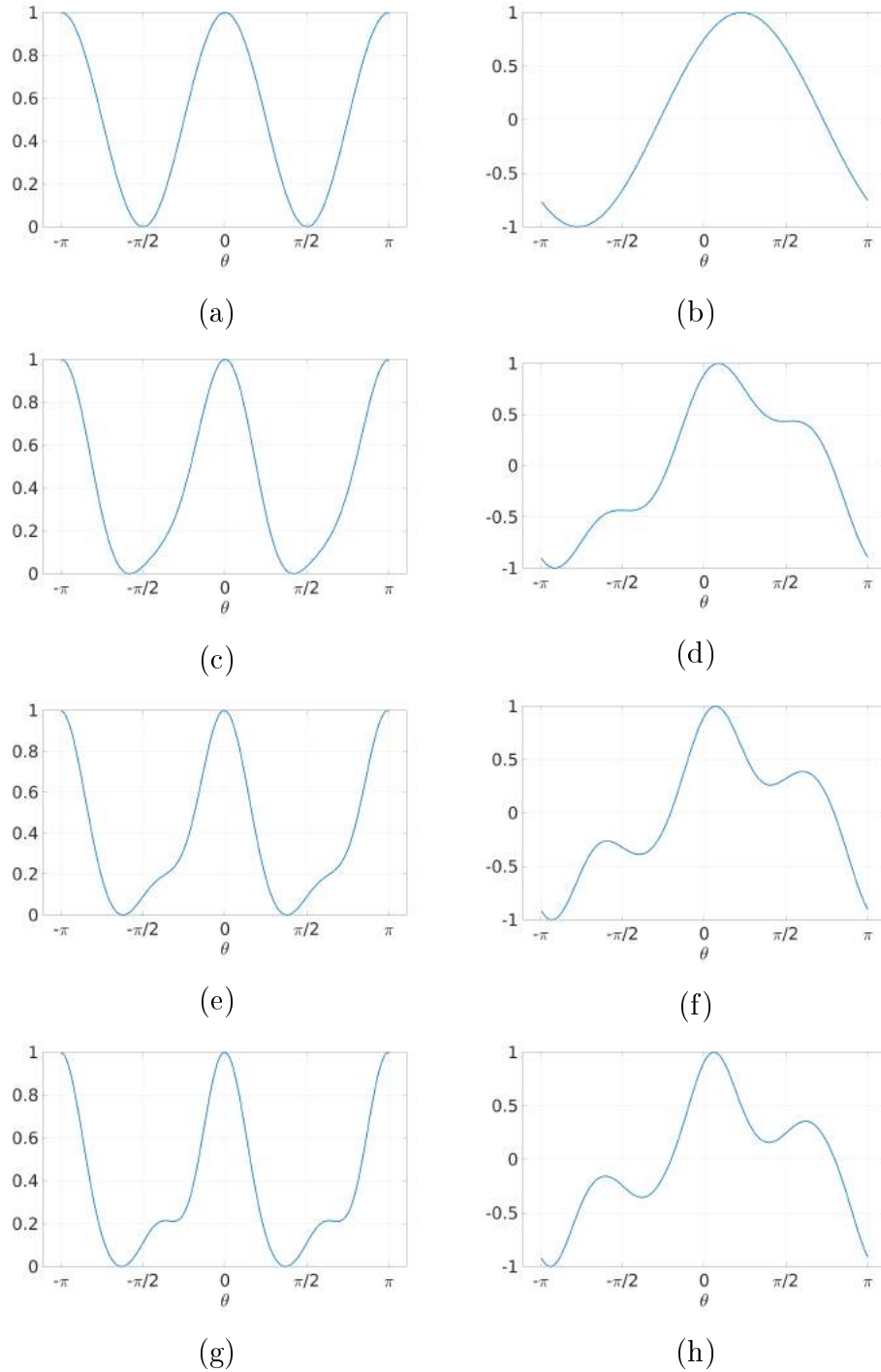


Figure 2.4: Moment $\mu_d(\mathcal{P}_f(\theta))$ de la projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ en 2D, $\theta \in [-\pi, \pi]$: les cas de a), c), e) et g) sont des moments d'ordres pairs pour $d = 2, 4, 6, 8$. Les cas de b), d), f) et h) sont des moments d'ordres impairs pour $d = 1, 3, 5, 7$.

On déduit de (2.10) que $d_{\text{ang}}(\mathcal{P}_f(\theta_i), \mathcal{P}_f(\theta_j)) = d_{\text{ang}}(\mathcal{P}_f(\theta_i), \mathcal{P}_f(\theta_j + \pi))$. En effet, notre méthode d'estimation de la différence angulaire est basée sur les valeurs absolues des moments. Or

$$|\mu_{f,d}(\theta)| = |(-1)^d \mu_{f,d}(\theta + \pi)| = |\mu_{f,d}(\theta + \pi)|, \quad (2.11)$$

et on constate que pour un intervalle $[a, a + \pi[$ quelconque sur le cercle $\mathbb{R}/\pi\mathbb{Z}$, et pour un angle θ quelconque dans $\mathbb{R}/\pi\mathbb{Z}$, soit θ , soit $\theta + \pi$, est dans $[a, a + \pi[$. Ceci permet de supposer que $\theta \in [-\pi/2, \pi/2[$.

Dans le reste du manuscrit, on écrira \mathcal{P} , μ_d au lieu de \mathcal{P}_f et $\mu_{f,d}$ lorsqu'il n'y a pas d'ambigüité.

2.2 Problème d'estimation de la différence angulaire

Soit f une fonction dont le barycentre est à l'origine, $n \in \mathbb{N}$ et $\Theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n\} \subseteq [-\pi/2, \pi/2[$ un ensemble d'angles inconnus. On note $\Pi = \{\mathcal{P}(\theta_i) | 1 \leq i \leq n\}$ l'ensemble des projections associées aux angles de Θ . L'objectif est d'estimer la différence angulaire d_{ang} entre deux projections quelconques à partir de l'ensemble Π .

Pour cela, l'équation (2.9) est ré-écrite de la manière suivante :

$$\sin^2(\theta) = \frac{|\mu_2(\theta) - \mu_2^m|}{\mu_2^{max} - \mu_2^{min}}, \quad (2.12)$$

où

$$\mu_2^m = \begin{cases} \mu_2^{max} & \text{si } \mu_2(\theta = 0) = \mu_2^{max} \\ \mu_2^{min} & \text{si } \mu_2(\theta = 0) = \mu_2^{min}. \end{cases}$$

L'équation (2.12) a été utilisée dans l'article de Salzman [10] pour estimer l'angle θ de la projection $\mathcal{P}(\theta)$. Il est à noter qu'il y a deux valeurs possibles de $\theta \in [-\pi/2, \pi/2[$ dans (2.12). Ceci correspond à la symétrie par rapport à l'axe des y du moment d'ordre 2 dans $[-\pi/2, \pi/2[$ comme illustrée sur la figure 2.4a. Cette ambigüité a été résolue par Salzman en utilisant les moments d'ordres impairs en raison d'une forte variation de ces moments dans $[-\pi/2, \pi/2[$ (figure 2.4b, d, f et h).

Une solution simple pour estimer la différence angulaire entre deux projections peut être obtenue en faisant une soustraction entre deux arcsinus de l'équation (2.12). Cependant, comme la fonction $x \mapsto \arcsin(\sqrt{x})$ a une pente élevée pour x à proximité de 0 et 1, ceci peut amener des erreurs dans le calcul de la différence angulaire lorsque le moment d'ordre 2 de l'une des deux projections est proche de μ_2^{min} ou μ_2^{max} dans le cas où les projections sont bruitées. La figure 2.5 montre la fonction $\arcsin(\sqrt{x})$ dans le cas bruité, nous voyons qu'un petit changement de x proche de 0 ou 1 peut conduire à un grand écart sur la fonction $\arcsin(\sqrt{x})$.

Nous proposons donc une autre approche plus adaptée à ce problème : au lieu d'estimer directement la différence angulaire entre deux projections, on estime la différence angulaire entre deux projections associées à deux angles proches sans regarder leurs angles. Une formule d'estimation basée sur la linéarisation de (2.12) est donc développée pour des projections voisines¹. Ensuite, on construit un graphe de voisinage $G = (V, E)$ dont les sommets V sont les projections, les arêtes E relient les projections voisines et sont pondérées par la différence angulaire calculée avec la formule développée. La recherche des projections voisines est réalisée dans l'espace des moments et sera présentée dans la partie suivante. Enfin, un algorithme du plus court chemin est appliqué sur le graphe G afin d'estimer la différence angulaire entre deux projections quelconques sur le graphe G .

2.3 Méthode d'estimation de la différence angulaire

2.3.1 Recherche des voisins pour chaque projection

L'objectif de cette partie est de chercher à partir de l'ensemble des projections Π , les plus proches voisins de chaque projection. Puisque le moment d'ordre d de la projection est un polynôme trigonométrique de degré d en fonction de l'angle de la projection (cf. propriété 3), nous avons montré dans l'Annexe C que deux angles proches donnent deux moments proches pour n'importe quel ordre en raison de la continuité des moments par

1. Dans cette thèse, nous appelons projections voisines des projections dont les angles sont proches.

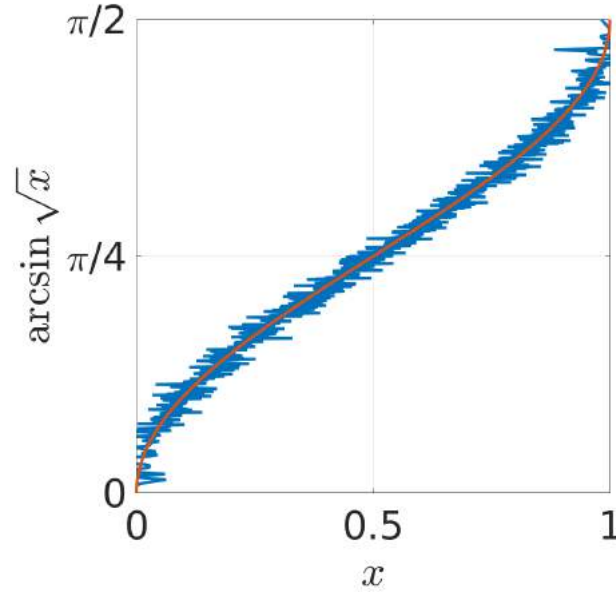


Figure 2.5: La pente élevée de la fonction $\arcsin \sqrt{x}$ pour x proche de 0 ou 1. La courbe rouge est pour le cas sans bruit, la courbe bleue est pour le cas de bruit.

rapport aux angles. Par contre, si deux moments d'ordre d sont proches, cela n'implique pas nécessairement que les deux projections sont proches car les moments ne sont pas monotones. Ceci nous impose d'effectuer une recherche des voisins en utilisant plusieurs ordres. La figure 2.6 présente un exemple de distribution des projections dans l'espace de moments d'ordres 2 et 3 selon différents angles. On voit que l'utilisation de moments d'ordres différents permet de distinguer toutes les projections. Ceci nous permet de rechercher des voisins dans cet espace. L'algorithme des k -plus proches voisins peut être utilisé pour ce problème. Le choix du nombre de voisins k est délicat car si k est trop petit, moins de voisins sont trouvés et le graphe du voisinage construit peut perdre la connexion entre certains sommets proches (voir la figure 2.7a). Au contraire, si k est grand, plus de faux voisins sont trouvés et le graphe du voisinage construit peut générer des plus courts chemins erronés (voir la figure 2.7c).

Au lieu des k plus proches voisins, une approche alternative basée sur le seuillage est proposée : pour chaque moment $\mu_d(\theta)$ d'ordre d d'une projection $\mathcal{P}(\theta)$ donnée, un intervalle de taille $2\varepsilon_d$, centré sur $|\mu_d(\theta)|$, est établi pour trouver au moins un moment

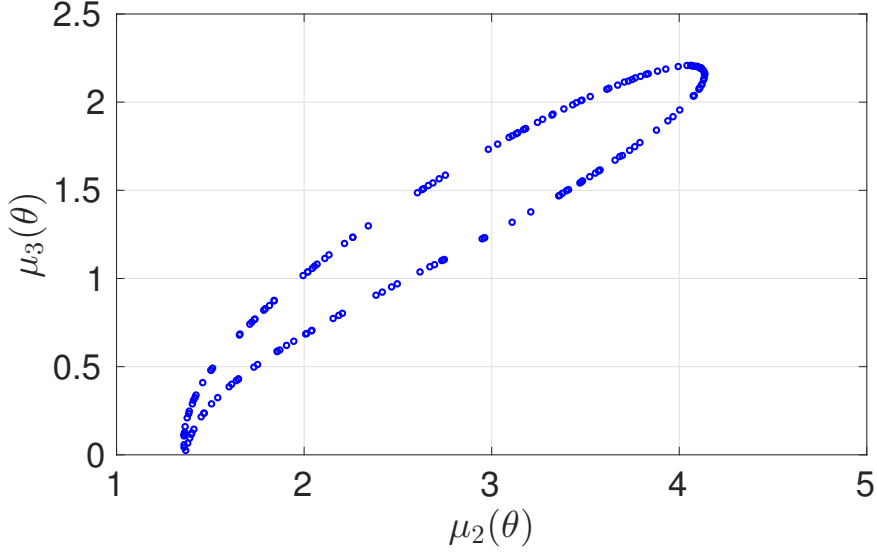


Figure 2.6: Distribution des projections de l'image sur la figure 2.2a en fonction des angles dans l'espace des moments. Les angles sont distribués uniformément.

$\mu_d(\theta')$, $\theta' \neq \theta$, correspondant à une projection $\mathcal{P}(\theta')$ tel que θ' et θ soient proches. La formule de ε_d est donnée dans la proposition suivante. Sa démonstration est détaillée dans l'annexe A.3.

Proposition 1 (Seuillage adaptatif en 2D). *Soit $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow [0,1]$ un objet 2D, soit $p \in [0,1]$. On suppose que la distribution des angles θ est uniforme dans $[-\pi/2, \pi/2[$. Pour chaque moment $\mu_d(\theta)$ d'ordre d , il existe un intervalle centré en $|\mu_d(\theta)|$ et de taille $2\varepsilon_d$ dans lequel nous pouvons trouver, avec une probabilité p , au moins un moment $\mu_d(\theta')$, tel que $\theta' \neq \theta$ et θ' est un voisin de θ dans Θ . La demi-taille ε_d est calculée par*

$$\varepsilon_d = \frac{\pi}{2} \left(1 - (1 - p)^{\frac{1}{n-1}} \right) \times d \max_{\theta \in \mathbb{R}} (|\mu_d(\theta)|). \quad (2.13)$$

Remarque 1. ε_d est indépendant de θ .

Remarque 2. Quand la densité de probabilité des angles est connue —notée λ — l'équation (2.13) de la proposition 1 peut être modifiée comme suit

$$\varepsilon_d = \pi k \times d \max_{\theta \in \mathbb{R}} (|\mu_d(\theta)|), \quad (2.14)$$

avec $k \in \Lambda^{-1}\left(\frac{1}{2}(1-p)^{\frac{1}{n-1}}\right)$ où Λ est la fonction croissante $\delta \mapsto \int_{\delta}^{1-\delta} \lambda \star (\lambda \circ (-\text{id}))(t) dt$, id l'identité et \star la convolution.

La formule (2.13) permet d'obtenir un seuillage adaptatif en fonction du nombre n de projections et de la distribution des projections. Sur un exemple nous comparons la technique des k plus proches voisins et notre technique de seuillage adaptatif sur la figure 2.7. Nous voyons que le choix du nombre de plus proches voisins pour établir un bon graphe de voisinage G n'est pas facile, en particulier quand le nombre de projections n'est pas assez grand. Notre méthode de seuillage fonctionne mieux que celle des k plus proches voisins sur cet exemple.

Le problème avec l'équation (2.13) est que la valeur exacte de $\max_{\theta \in \mathbb{R}}(|\mu_d(\theta)|)$ est inconnue. Elle n'est estimée qu'à partir de l'ensemble fini des projections Π par $\max_{\theta \in \Theta}(|\mu_d(\theta)|)$. Cependant, nous montrons dans la proposition 2 (présentée dans la partie suivante) que les erreurs portant sur l'estimation des valeurs extrêmes de $|\mu_d(\theta)|$ dans (2.13) convergent quadratiquement vers 0 quand le nombre de projections tend vers l'infini. Les erreurs dues aux valeurs extrêmes induisent donc des erreurs négligeables sur le calcul de ε_d .

En conclusion, étant donnée une projection \mathcal{P}_i , l'expression (2.13) nous permet de chercher des ensembles J_d^i contenant des voisins de \mathcal{P}_i pour différents ordres d . Le résultat final est un ensemble J^i qui est l'intersection des ensembles J_d^i . Une arête qui relie \mathcal{P}_i avec chaque projection dans J^i est alors ajoutée dans le graphe de voisinage G .

2.3.2 Formules d'estimation de la différence angulaire

Dans la suite de ce chapitre, nous utilisons les notations et hypothèses suivantes :

Notations et hypothèses

- $\Theta = \{\theta_1, \dots, \theta_n\} \subset [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$: ensemble d'angles tel que $\theta_1 < \dots < \theta_n$, en outre nous posons $\theta_0 = \theta_n - \pi$ (donc, $\theta_0 < \theta_1$).
- $\Delta(\Theta) = \max_{1 \leq i \leq n} (\theta_i - \theta_{i-1})$: différence angulaire maximale entre deux angles successifs.
- $M = \{\mu_2(\theta_i) \mid \theta_i \in \Theta\}$,
- $\tilde{\mu}_2^{\max} = \max(M)$ et $\tilde{\mu}_2^{\min} = \min(M)$.

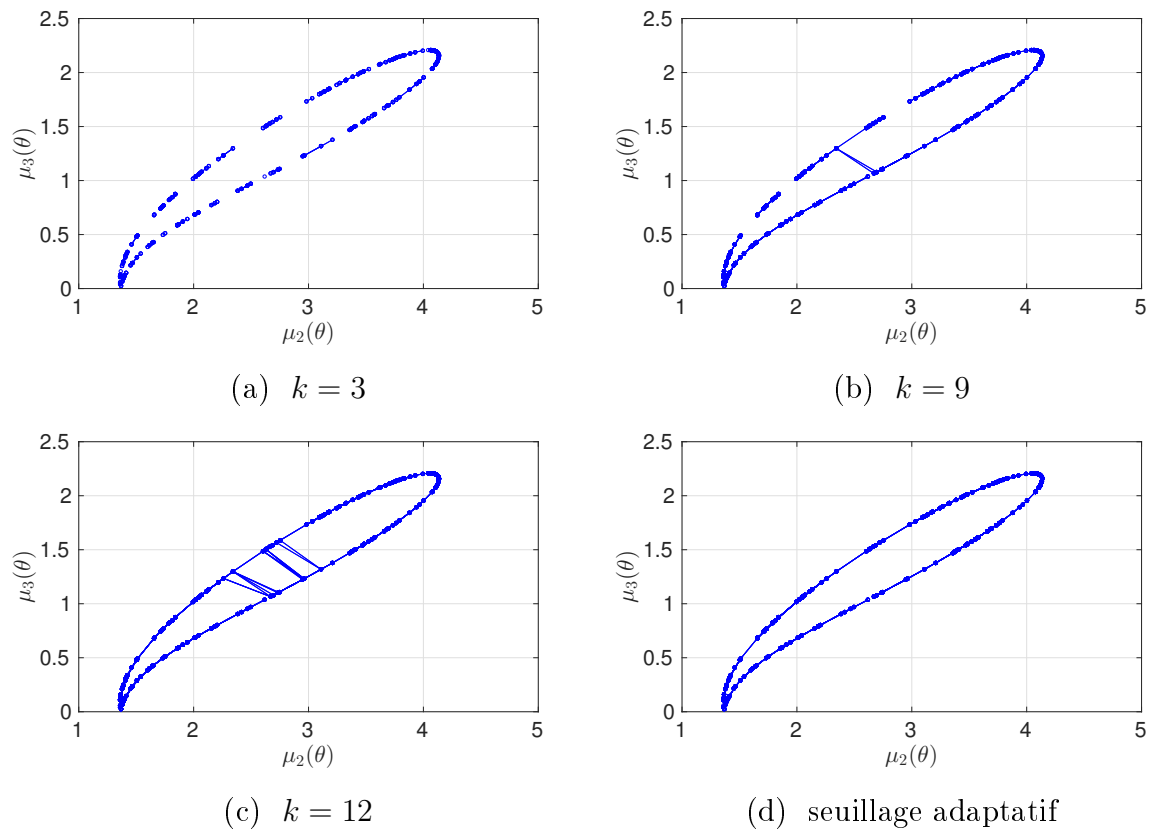


Figure 2.7: Recherche des voisins de chaque projection dans l'espace de moments par les k -plus proches voisins (a,b,c) et par seuillage adaptatif (d).

- $\tilde{\theta}^{\max} = \operatorname{argmax}(M)$ et $\tilde{\theta}^{\min} = \operatorname{argmin}(M)$.
- $\Delta(M) = \max_{\mu \in M} \min_{\mu' \neq \mu} |\mu - \mu'|$: différence maximale entre un moment et son plus proche voisin.

Nous avons présenté dans la partie précédente la recherche des voisins permettant de construire le graphe de voisinage G dont les arêtes relient les projections voisines. La pondération de ces arêtes est maintenant abordée. Pour cela, nous avons établi des formules en faisant le développement limité de l'équation (2.12). Ces formules sont présentées dans la définition suivante. Du fait que la formule principale (2.17) présente une instabilité numérique lorsque le moment d'ordre 2 de la projection est proche d'un des deux extremums, nous sommes obligés d'utiliser d'autres formulations au voisinages de ces extremums. Le choix des seuils $a(M)$ et $b(M)$ qui permettent de décider qu'elle formule doit être utilisée est exposé plus loin dans la proposition 3.

Définition 2 (Pondération des arêtes du graphe G). Soient $a(M), b(M) \in \mathbb{R}$. Pour deux angles proches θ_i et θ_j , la pondération $w_{i,j}$ entre les deux projections correspondantes $\mathcal{P}(\theta_i)$ et $\mathcal{P}(\theta_j)$ est calculée par l'une des trois formules suivantes selon la valeur des moments

- si $\mu_2(\theta_i) < a(M)$ et $\mu_2(\theta_j) < a(M)$,

$$w_{i,j} = \frac{|\sqrt{\mu_2(\theta_i) - \tilde{\mu}_2^{\min}} - \sqrt{\mu_2(\theta_j) - \tilde{\mu}_2^{\min}}|}{\sqrt{\tilde{\mu}_2^{\max} - \tilde{\mu}_2^{\min}}} \quad (2.15)$$

- si $\mu_2(\theta_i) > b(M)$ et $\mu_2(\theta_j) > b(M)$,

$$w_{i,j} = \frac{|\sqrt{\tilde{\mu}_2^{\max} - \mu_2(\theta_i)} - \sqrt{\tilde{\mu}_2^{\max} - \mu_2(\theta_j)}|}{\sqrt{\tilde{\mu}_2^{\max} - \tilde{\mu}_2^{\min}}} \quad (2.16)$$

- sinon

$$w_{i,j} = \frac{|\mu_2(\theta_j) - \mu_2(\theta_i)|}{\sqrt{(\tilde{\mu}_2^{\max} - \mu_2(\theta_\xi))(\mu_2(\theta_\xi) - \tilde{\mu}_2^{\min})}} \quad (2.17)$$

où $\xi \in \{i, j\}$ et $|\mu_2(\theta_\xi) - \frac{\tilde{\mu}_2^{\max} + \tilde{\mu}_2^{\min}}{2}|$ est minimal.

La valeur de $w_{i,j}$ est utilisée pour pondérer l'arête qui relie les deux sommets i et j sur le graphe de voisinage G . Un des problèmes du calcul de $w_{i,j}$ est que ces formules

utilisent les moments extrêmes empiriques $\tilde{\mu}_2^{\min}$ et $\tilde{\mu}_2^{\max}$ au lieu des moments extrêmes théoriques μ_2^{\max} et μ_2^{\min} . Les erreurs portant sur l'utilisation de $\tilde{\mu}_2^{\min}$ et $\tilde{\mu}_2^{\max}$ doivent être considérées. La proposition suivante donne une borne supérieure sur la différence entre les moments extrêmes empiriques et ceux théoriques.

Proposition 2 (Erreur d'estimation des moments extrêmes). *Soit $d \geq 2$. Les erreurs relatives sur μ_d^{\min} et μ_d^{\max} suite à l'utilisation des moments extrêmes empiriques $\tilde{\mu}_d^{\max}$, $\tilde{\mu}_d^{\min}$ sont inférieures à $\frac{1}{4}d^2\Delta(\Theta)^2(\mu_d^{\max} - \mu_d^{\min})$*

Démonstration. Soit $\theta_d^{\max} \in [-\pi/2, \pi/2)$, resp. $\tilde{\theta}_d^{\max} \in \Theta$, tels que

$$\mu_d(\theta_d^{\max}) = \max_{\theta \in [-\pi/2, \pi/2)} \{\mu_d(\theta)\}, \quad (2.18)$$

$$\mu_d(\tilde{\theta}_d^{\max}) = \max_{\theta_i \in \Theta} \{\mu_d(\theta_i)\}. \quad (2.19)$$

Alors, $\theta_d^{\max} \in [\theta_i, \theta_{i+1}]$ pour un certain i tel que $0 \leq i < n$.

Posons $\mu_d^{\max} = \mu_d(\theta_d^{\max})$, resp. $\tilde{\mu}_d^{\max} = \mu_d(\tilde{\theta}_d^{\max})$.

Alors, $\mu_d^{\max} - \tilde{\mu}_d^{\max} \leq \mu_d(\theta_d^{\max}) - \mu_d(\theta_i)$. Un développement limité est fait pour μ_d en $\theta = \theta_d^{\max}$. On obtient

$$\begin{aligned} \mu_d^{\max} - \tilde{\mu}_d^{\max} &\leq \mu_d(\theta_d^{\max}) - \mu_d(\theta_i) \\ &\leq \frac{1}{2}(\theta_d^{\max} - \theta_i)^2 \max_{\theta \in \mathbb{R}} \left| \frac{d^2 \mu_d}{d\theta^2} \right|. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Puis, comme $\theta_d^{\max} \in [\theta_i, \theta_{i+1}]$, on a

$$\mu_d^{\max} - \tilde{\mu}_d^{\max} \leq \frac{1}{2}\Delta(\Theta)^2 \max_{\theta \in \mathbb{R}} \left| \frac{d^2 \mu_d}{d\theta^2} \right|. \quad (2.21)$$

Comme μ_d est un polynôme trigonométrique de degré d , on déduit de l'inégalité de Bernstein (cf. annexe A.2) que

$$\mu_d^{\max} - \tilde{\mu}_d^{\max} \leq \frac{1}{4}d^2 \Delta(\Theta)^2 (\mu_d^{\max} - \mu_d^{\min}). \quad (2.22)$$

De la même façon, on obtient

$$\tilde{\mu}_d^{\min} - \mu_d^{\min} \leq \frac{1}{4}d^2 \Delta(\Theta)^2 (\mu_d^{\max} - \mu_d^{\min}). \quad (2.23)$$

□

Nous avons montré que les erreurs sur les moments extrêmes empiriques sont asymptotiquement négligeables lorsque le nombre de projections devient grand. Un autre point sensible du calcul de $w_{i,j}$ est la détermination des seuils $a(M)$ et $b(M)$ permettant de choisir une formule appropriée dans la définition 2. La proposition suivante explique comment choisir $a(M)$ et $b(M)$ et donne les erreurs dues à l'utilisation de $w_{i,j}$ pour l'estimation de la différence angulaire entre deux projections $\mathcal{P}(\theta_i)$ et $\mathcal{P}(\theta_j)$.

Proposition 3. *Si les seuils $a(M)$ et $b(M)$ sont tels que $a(M) - \tilde{\mu}_2^{\min}$ et $\tilde{\mu}_2^{\max} - b(M)$ sont asymptotiquement dominés par et soumis à $\Delta(M)^\alpha$ avec $\alpha \in (0, 2/3)$, alors, pour $0 \leq i, j < n$ tels que $|\theta_i - \theta_j| \in O(\Delta(\Theta))$,*

- si $\mu_2(\theta_i) \in [a(M), b(M)]$ ou $\mu_2(\theta_j) \in [a(M), b(M)]$,

$$w_{i,j} = d_{\text{ang}}(\mathcal{P}(\theta_i), \mathcal{P}(\theta_j)) + o(\Delta(\Theta)) \quad (2.24)$$

- sinon

$$w_{i,j} = d_{\text{ang}}(\mathcal{P}(\theta_i), \mathcal{P}(\theta_j)) + O(\Delta(\Theta)). \quad (2.25)$$

La démonstration de la proposition 3 est donnée dans l'Annexe A.4. L'erreur estimée pour l'utilisation de trois formules de $w_{i,j}$ est illustrée par la figure 2.8 où l'erreur d'estimation est calculée comme suit

$$|w_{i,j} - d_{\text{ang}}(\mathcal{P}(\theta_i), \mathcal{P}(\theta_j))| / d_{\text{ang}}(\mathcal{P}(\theta_i), \mathcal{P}(\theta_j)). \quad (2.26)$$

Nous voyons que la formule (2.15) donne un meilleur résultat que les autres pour les couples de projections qui sont proches de μ_2^{\min} . De même avec la formule (2.16) pour les couples de projections qui sont proches de μ_2^{\max} et avec la formule (2.17) pour les couples de projections qui ne sont pas proches μ_2^{\min} et μ_2^{\max} . La combinaison des trois formules donne donc un meilleur résultat que l'utilisation d'une seule formule.

Les positions relatives de μ_2^{\min} , $\tilde{\mu}_2^{\min}$, $a(M)$, μ_2^{\max} , $\tilde{\mu}_2^{\max}$ et $b(M)$ en l'absence de bruit sont illustrées par la figure 2.9.

Les étapes de la méthode d'estimation de la différence angulaire sont résumées dans la partie suivante.

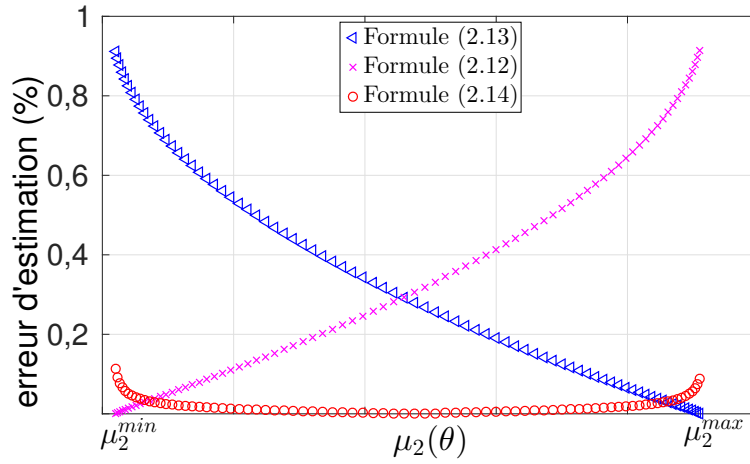


Figure 2.8: Erreur d'estimation de la différence angulaire par les trois formules dans la définition 2.

2.3.3 Algorithme d'estimation de la différence angulaire

Nous proposons un algorithme pour l'estimation de la différence angulaire entre deux projections à partir de l'ensemble de projections Π . Nous calculons d'abord les moments d'ordre d , $d \in \{2,3,4,5\}$, des projections dans Π , puis les voisins de chaque projection sont trouvés par la recherche des moments dans l'intervalle $|\mu_d(\theta)| \pm \varepsilon_d$. Le seuil ε_d est calculé par l'équation (2.13) en fixant la probabilité $p = 0,95$. Il est à noter qu'il y a un ensemble de voisins trouvés pour chaque ordre de moment. Le résultat final de la recherche des voisins est obtenu par l'intersection de ces ensembles. Nous choisissons les ordres $d = 2 \dots 5$ car nous avons constaté empiriquement que les moments d'ordre supérieur à 5 sont sensibles au bruit et n'améliorent pas le résultat.

Ensuite, les différences angulaires entre les projections voisines sont estimées par les formules données dans la définition 2. Afin de séparer ces trois formules, $a(M)$ est fixé à $\tilde{\mu}_2^{min} + \Delta(M)^{1/2}$ et $b(M)$ est fixé à $\tilde{\mu}_2^{max} - \Delta(M)^{1/2}$ selon la condition dans la proposition 3.

Nous pouvons maintenant construire un graphe de voisinage $G = (V, E)$ dont les sommets V sont les projections, dont les arêtes E relient les projections voisines et sont pondérées par les différences angulaires estimées. La différence angulaire entre deux projections quelconques du graphe G est estimée par un algorithme du plus court chemin

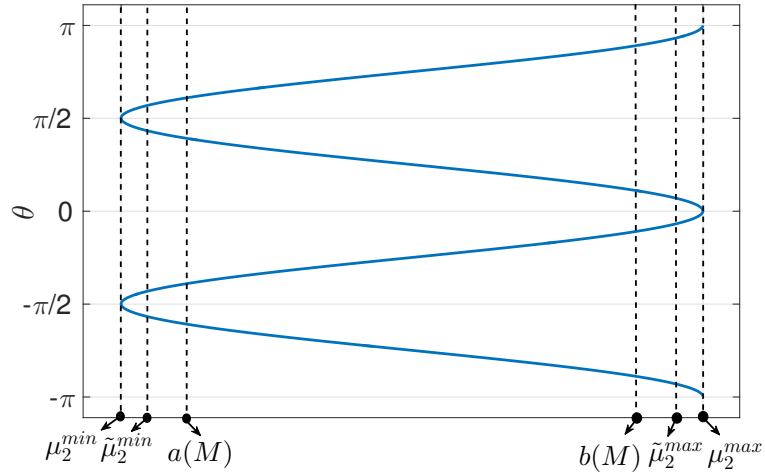


Figure 2.9: Positions relatives entre μ_2^{min} , μ_2^{max} , $\tilde{\mu}_2^{min}$, $\tilde{\mu}_2^{max}$, $a(M)$ et $b(M)$.

sur ce graphe. La procédure d'estimation de la différence angulaire est résumée dans l'Algorithme 1.

Remarque 3. `Plus_Court_Chemin(G)` représente un des algorithmes pour calculer le plus court chemin sur le graphe G . Nous pouvons utiliser, par exemple, l'algorithme de Dijkstra [54] pour calculer le plus court chemin.

2.4 Traitement du bruit

Cette partie traite du problème du bruit qui souvent perturbe les projections pendant l'acquisition. Soit $\hat{\mathcal{P}}(\theta) = \mathcal{P}(\theta) + \epsilon$, la projection bruitée, où $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ est un bruit gaussien de moyenne 0 et de variance σ^2 . On note aussi $\hat{\Pi} = \{\hat{\mathcal{P}}_i | 1 \leq i \leq n\}$ l'ensemble de projections bruitées. Nous présentons d'abord les méthodes de débruitage de l'ensemble de projections.

Algorithme 1: Estimation de la différence angulaire en 2D

Données: $\Pi = \{\mathcal{P}(\theta_i) \mid 1 \leq i \leq n\}$.

Résultats: estimation de $d_{\text{ang}}(\mathcal{P}(\theta_i), \mathcal{P}(\theta_j)), 1 \leq i, j \leq n, i \neq j$.

1. $G \leftarrow \emptyset, D \leftarrow \{2, \dots, 5\}$.
 2. Calculer $\{\mu_d(\theta_i)\}_{i=1\dots n}$ puis ε_d , pour $d \in D$.
 3. Pour chaque indice i ,
 - 3.1. $J_d^i \leftarrow \{j \mid |\mu_d(\theta_i)| - \varepsilon_d \leq |\mu_d(\theta_j)| \leq |\mu_d(\theta_i)| + \varepsilon_d\}, \forall d \in D$.
 - 3.2. $J^i \leftarrow \bigcap J_d^i$.
 - 3.3. Pour chaque $j \in J^i, G \leftarrow G \cup \{(i, j, w_{i,j})\}$.
 4. Plus_Court_Chemin(G).
-

2.4.1 Débruitage de l'ensemble des projections

2.4.1.1 Analyse en composantes principales

L'analyse en composantes principales (ACP) est une technique de réduction dimensionnelle linéaire qui a été proposée en 1901 [55]. La technique d'ACP est une des techniques les plus utiles pour analyser les données de haute dimension. L'ACP fait une transformation orthogonale du système de coordonnées telle que si on projette les données sur le premier axe (ou première composante), la variance de la projection est maximale, si on projette les données sur le deuxième axe, la variance est la deuxième plus grande, etc (la figure 2.10 illustre le principe de l'ACP). Soit p la taille des projections de l'ensemble Π . On peut considérer chaque projection de Π comme la réalisation d'une variable aléatoire \mathcal{P} de dimension p . L'application de l'ACP sur l'ensemble Π de n projections est faite par le calcul de la matrice de covariance S

$$S = \frac{1}{n} \sum_{\mathcal{P} \in \Pi} (\mathcal{P} - \mathbf{m})(\mathcal{P} - \mathbf{m})^T. \quad (2.27)$$

où $\mathbf{m} = \frac{1}{n} \sum_{\mathcal{P} \in \Pi} \mathcal{P}$ est la moyenne des projections dans Π . On note $l_1 \geq l_2 \geq \dots \geq l_p \in \mathbb{R}$ les valeurs propres et $u_1, u_2, \dots, u_p \in \mathbb{R}^p$ les vecteurs propres de la matrice de covariance

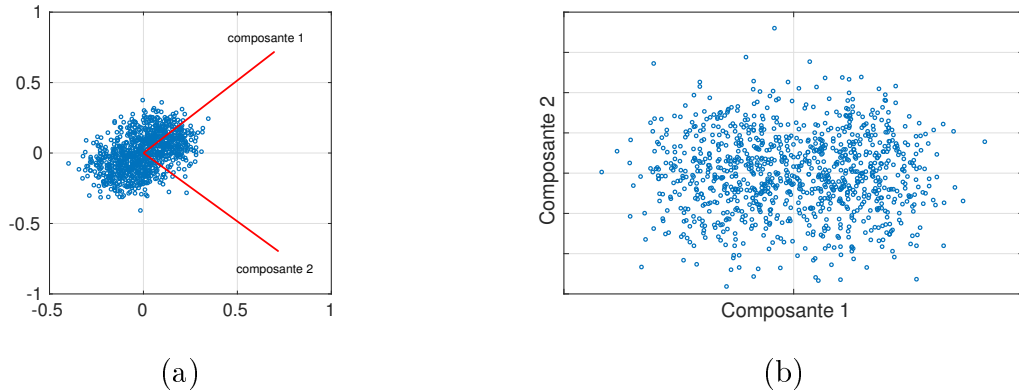


Figure 2.10: l'ACP pour les données de 2 dimensions : (a) les données sont analysées selon deux composantes ; (b) les données sont transformées selon ces deux composantes.

S . L'ACP exprime l'ensemble des projections dans la base formée par les vecteurs propres u_1, u_2, \dots, u_p . En pratique, les données sont souvent approchées dans une dimension k plus petite que p afin de réduire la complexité des données. La figure 2.11a montre les 20 premières valeurs propres de S pour l'ensemble de projections Π . On voit que le 15 premières valeurs propres sont suffisantes pour capturer presque toute la variance des données.

Le bruit est réparti uniformément sur la base orthonormée de l'ACP et la projection (algébrique) de l'ensemble des projections bruitées $\hat{\Pi}$ sur $k < p$ dimensions permet de réduire la variance du bruit, tout en préservant la majeure partie de la variance des projections. Les figures 2.11b–2.11d représentent les 20 premières valeurs propres dans un cas bruité. Il est clair que lorsque le bruit est plus important, il y a moins de valeurs propres qui se distinguent du bruit. L'identification du nombre de composantes qui sont encore distinguables dans le cas de bruit est donc nécessaire. Cette identification peut être réalisée en utilisant la méthode présentée dans [56].

2.4.1.2 Filtre de Singer-Wu

Une méthode de débruitage basée sur la combinaison entre l'ACP et la définition du filtre de Wiener [57] a été développée par Singer et Wu [58]. On rappelle d'abord le filtre

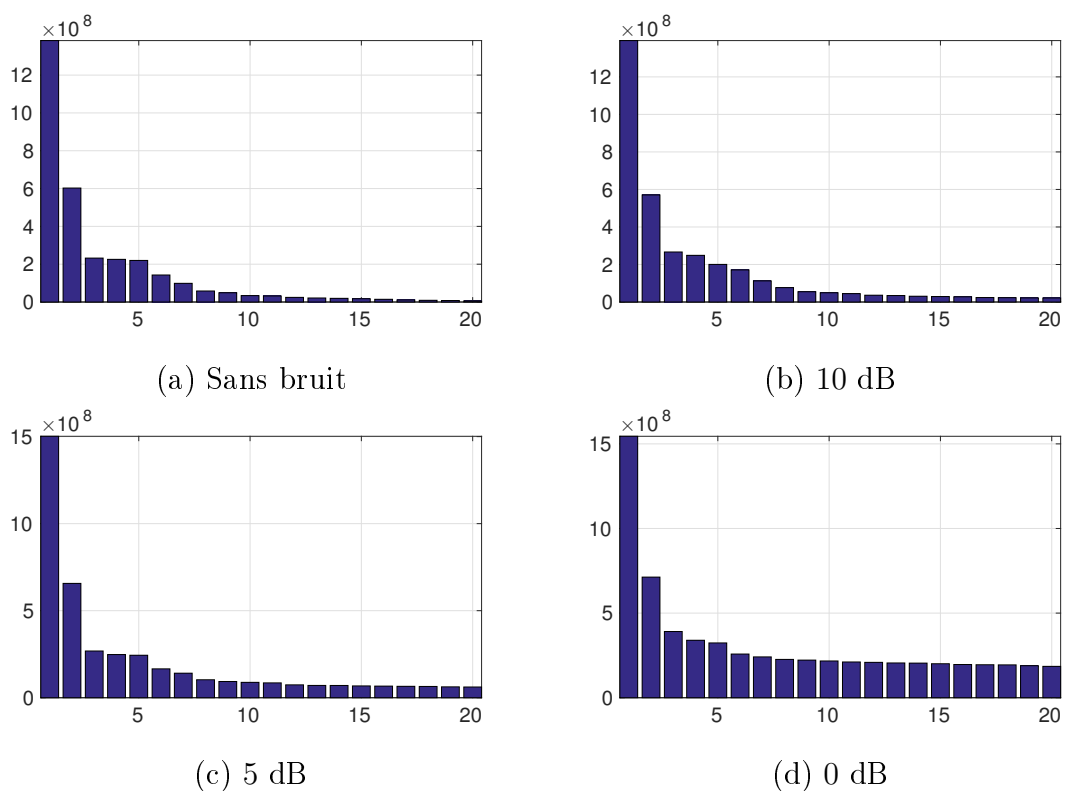


Figure 2.11: L'ACP du sinogramme sur la figure 2.2b : les 20 premières valeurs propres de la matrice de covariance pour différents niveaux du bruit.

de Wiener qui donne un estimateur $\tilde{\mathcal{P}}$ de \mathcal{P} à partir de $\hat{\mathcal{P}}$. L'estimateur $\tilde{\mathcal{P}}$ est donné par la formule linéaire suivante

$$\tilde{\mathcal{P}} = \mathbf{m} + H(\hat{\mathcal{P}} - \mathbf{m}), \quad (2.28)$$

où H est obtenu par

$$H = \operatorname{argmin}_{H \in \mathbb{R}^{p \times p}} \frac{1}{n} \sum_{\mathcal{P} \in \Pi, \hat{\mathcal{P}} \in \hat{\Pi}} \|\mathcal{P} - (\mathbf{m} + H(\hat{\mathcal{P}} - \mathbf{m}))\|^2. \quad (2.29)$$

La solution de (2.29) est donnée dans [59]

$$H = S(S + \sigma^2 I)^{-1},$$

où $I \in \mathbb{R}^{p \times p}$ est la matrice identité. L'équation (2.28) devient alors

$$\tilde{\mathcal{P}} = \mathbf{m} + S(S + \sigma^2 I)^{-1}(\hat{\mathcal{P}} - \mathbf{m}). \quad (2.30)$$

L'estimateur $\tilde{\mathcal{P}}$ dans (2.30) peut aussi être écrit dans la base des vecteurs propres de S

$$\tilde{\mathcal{P}} = \mathbf{m} + \sum_{i=1}^p h_i \langle \hat{\mathcal{P}} - \mathbf{m}, u_i \rangle u_i, \quad (2.31)$$

où $\langle \dots \rangle$ est le produit scalaire et h_i est calculé par

$$h_i = \frac{1}{1 + \text{RSB}_i}, \quad \text{avec} \quad \text{RSB}_i = \frac{l_i}{\sigma^2}. \quad (2.32)$$

Singer et Wu ont développé leur méthode de débruitage à partir du filtre de Wiener linéaire (2.31) en prenant en compte l'identification du nombre $k < p$ de premières composantes de l'ACP. Le filtre de Singer-Wu est donné par

$$\tilde{\mathcal{P}} = \hat{\mathbf{m}} + \sum_{i=1}^p h_{i,k} \langle \hat{\mathcal{P}} - \hat{\mathbf{m}}, \hat{u}_i \rangle \hat{u}_i, \quad (2.33)$$

où $\hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{n} \sum_{\hat{\mathcal{P}} \in \hat{\Pi}} \hat{\mathcal{P}}$ est la moyenne de $\hat{\mathcal{P}}$ dans $\hat{\Pi}$ et $\hat{u}_1, \hat{u}_2, \dots, \hat{u}_p$ sont les vecteurs propres calculés de la matrice de covariance \hat{S} de $\hat{\mathcal{P}}$

$$\hat{S} = \frac{1}{n} \sum_{\hat{\mathcal{P}} \in \hat{\Pi}} (\hat{\mathcal{P}} - \hat{\mathbf{m}})(\hat{\mathcal{P}} - \hat{\mathbf{m}})^T. \quad (2.34)$$

La valeur de $h_{i,k}$ est calculée par

$$h_{i,k} = \frac{1}{1 + \text{RSB}_{i,k}} \quad (2.35)$$

avec

$$\text{RSB}_{i,k} = \begin{cases} \frac{\text{RSB}_i^2 - p/n}{\text{RSB}_i + p/n} & \text{si } i \leq k \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.36)$$

Il est à noter que les k premières composantes, la variance σ^2 et les valeurs propres l_1, l_2, \dots, l_k sont inconnues. Elles sont estimées à partir de données bruitées par la méthode présentée dans [56]. Cette méthode donne un estimateur $\tilde{\sigma}^2$ pour la variance en se basant sur la théorie des permutations. La variance σ^2 peut aussi être estimée en considérant les pixels proches des bordures du sinogramme (très liés au bruit). Un estimateur \tilde{k} est ensuite donné pour le nombre de composantes utilisées. Pour $n, p \rightarrow \infty$, \tilde{k} est déterminé par la sélection des valeurs propres $\hat{l}_1, \dots, \hat{l}_p$ de la matrice de covariance S qui sont supérieures au critère suivant

$$\hat{l}_{crit} = \tilde{\sigma}^2 \sqrt{p/n}. \quad (2.37)$$

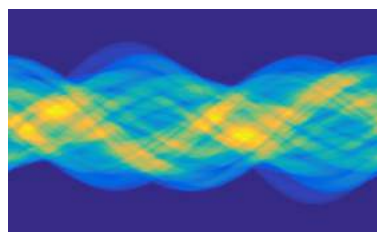
En fin, les estimateurs $\tilde{l}_1, \dots, \tilde{l}_{\tilde{k}}$ pour les valeurs propres $\hat{l}_1, \dots, \hat{l}_{\tilde{k}}$ sont estimées comme la solution positive de l'équation du second degré

$$\hat{l}_j = (\tilde{l}_j + \tilde{\sigma}^2) \left(1 + \frac{p \tilde{\sigma}^2}{n \tilde{l}_k}\right), \quad j = 1, \dots, \tilde{k}. \quad (2.38)$$

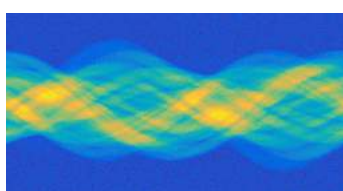
La figure 2.12 représente le résultat du débruitage pour différents niveaux du bruit.

2.4.2 Estimation des moments extrêmes

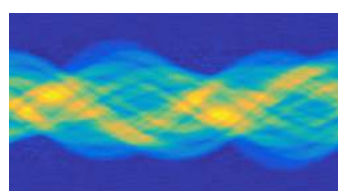
Le bruit se propage aussi sur le calcul du moment de projection et conduit à des erreurs non seulement dans la formule de la recherche des voisins, mais aussi dans les formules d'estimation de la différence angulaire. Soit $\hat{\mathcal{P}}(\theta) = \mathcal{P}(\theta) + \epsilon$ la projection bruitée, où $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ est le vecteur de bruit gaussien de moyenne 0 et de variance σ^2 dont les composantes sont indépendantes. Le moment $\hat{\mu}_d(\theta)$ d'ordre d de la projection bruitée



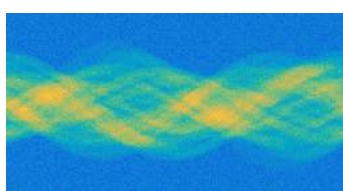
(a) sans bruit



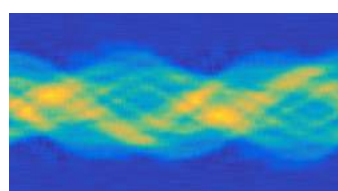
(b) 20 dB



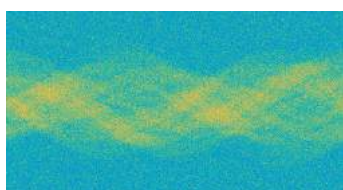
(c) débruitage de (b)



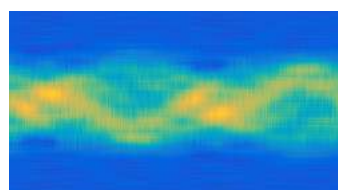
(d) 10 dB



(e) débruitage de (d)



(f) 0 dB



(g) débruitage de (f)

Figure 2.12: Débruitage par le filtre de Singer-Wu pour différents niveaux du bruit. (a) sans bruit. (b), (d), (f) sinogramme bruité. (c), (e), (g) résultat débruité correspondant

$\widehat{\mathcal{P}}(\theta)$ est calculé par

$$\begin{aligned}
 \widehat{\mu}_d(\theta) &= \int_{-1}^1 x^d \widehat{\mathcal{P}}(\theta)(x) \, dx \\
 &= \int_{-1}^1 x^d \mathcal{P}(\theta)(x) \, dx + \int_{-1}^1 x^d \epsilon(x) \, dx \\
 &= \mu_d(\theta) + \int_{-1}^1 x^d \epsilon(x) \, dx.
 \end{aligned} \tag{2.39}$$

Comme la somme de variables gaussiennes indépendantes est gaussienne, le moment $\widehat{\mu}_d(\theta)$ suit aussi une distribution normale de moyenne $\mu_d(\theta)$ et de variance Σ^2 , où

$$\Sigma = \left(\int_{-1}^1 x^{2d} \sigma^2 \, dx \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\sigma}{\sqrt{d + 1/2}}. \tag{2.40}$$

Comme le bruit peut augmenter l'écart entre les moments d'extrêmes théoriques et les moments extrêmes empiriques, il est nécessaire estimer les moments extrêmes théoriques à partir de l'ensemble des moments empiriques (moments bruités). Sous l'hypothèse d'une distribution uniforme des angles θ , nous déduisons de l'équation (2.12) la densité de probabilité du moment μ_2 comme suit

$$P(\mu_2) = \frac{1}{\pi} \times \frac{1}{2\sqrt{(\mu_2^{max} - \mu_2)(\mu_2 - \mu_2^{min})}}. \tag{2.41}$$

Si la distribution des angles θ n'est pas uniforme, mais sa densité de probabilité est encore disponible, la densité de probabilité du moment μ_2 peut aussi être calculée en remplaçant le terme $1/\pi$ dans la formule (2.41) par

$$\lambda \left(\arcsin \left(\sqrt{(\mu_2 - \mu_2^{min}) / (\mu_2^{max} - \mu_2^{min})} \right) \right), \tag{2.42}$$

où λ est la densité de probabilité des angles θ . Ensuite, la densité de probabilité du moment $\widehat{\mu}_d(\theta)$ est obtenue par la convolution entre P et la densité de probabilité du bruit

gaussien de moyenne 0 et de variance Σ^2

$$\widehat{P}(\widehat{\mu}_2) = \int_{\mu_2^{min}}^{\mu_2^{max}} P(\mu_2) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Sigma} \exp\left(-\frac{(\widehat{\mu}_2 - \mu_2)^2}{2\Sigma^2}\right) d\mu_2. \quad (2.43)$$

La figure 2.13 illustre la forme de P et \widehat{P} pour différents niveaux du bruit gaussien. On remarque que les positions relatives de μ_2^{min} , μ_2^{max} , $\tilde{\mu}_2^{min}$, $\tilde{\mu}_2^{max}$, $a(M)$ et $b(M)$ dans le cas bruité sont changées en général comme illustré sur la figure 2.14 (à comparer avec la figure 2.9).

Les deux moments extrêmes μ_2^{min} et μ_2^{max} peuvent alors être estimés en utilisant le maximum de vraisemblance

$$(\widehat{\mu}_2^{min}, \widehat{\mu}_2^{max}) = \operatorname{argmax}_{m \in \widehat{M}} \prod_{m \in \widehat{M}} \widehat{P}(m | \min \widehat{M}, \max \widehat{M}), \quad (2.44)$$

où $\widehat{M} = \{\widehat{\mu}_2(\theta_i) \mid 1 \leq i \leq n\}$.

Nous n'avons pas trouvé une solution analytique pour l'équation (2.44). Dans les tests présentés au chapitre 4, l'équation (2.44) est résolue numériquement.

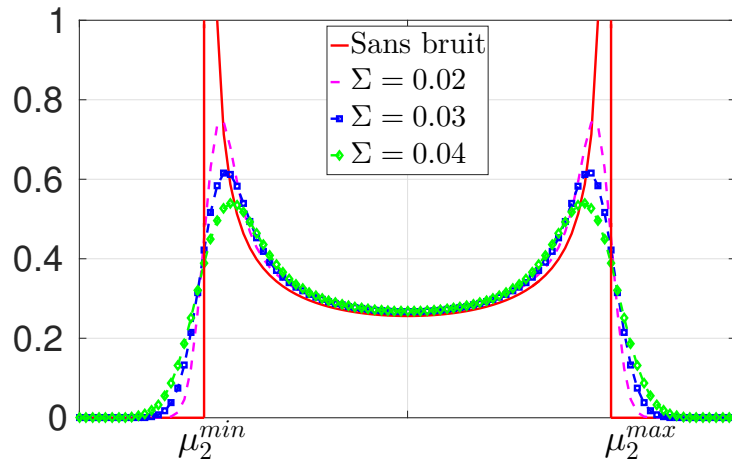


Figure 2.13: Densité de probabilité du moment μ_2 pour différents niveaux de bruit sous l'hypothèse d'une distribution uniforme des angles de projection.

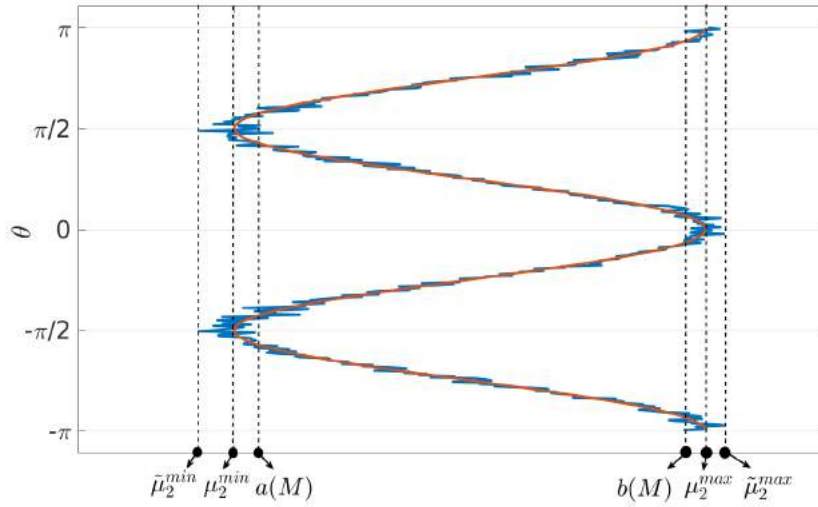


Figure 2.14: Positions relatives de μ_2^{min} , μ_2^{max} , $\tilde{\mu}_2^{min}$, $\tilde{\mu}_2^{max}$, $a(M)$ et $b(M)$ dans le cas bruité.

2.4.3 Débruitage du graphe de voisinage

Le débruitage de l'ensemble de projections utilisant le filtre de Singer-Wu et l'estimation des moments extrêmes nous permet de réduire les erreurs portant sur la formule de seuil (2.13) de la recherche des projections voisines et sur la formule d'estimation des angles entre projections voisines dans la définition 2. Cependant, le bruit affecte le graphe de voisinage même après cette étape de débruitage. En réalité, le graphe G peut être « raccourci » par les arêtes qui relient des projections initialement éloignées à cause du bruit (voir la figure 2.15a). Comme les formules de la définition 2 sont prévues pour estimer la différence angulaire entre des projections proches, plus deux projections sont éloignées, plus l'erreur du calcul de la différence angulaire par ces formules est importante. Il est donc préférable de détecter ces fausses arêtes et de les enlever du graphe de voisinage G .

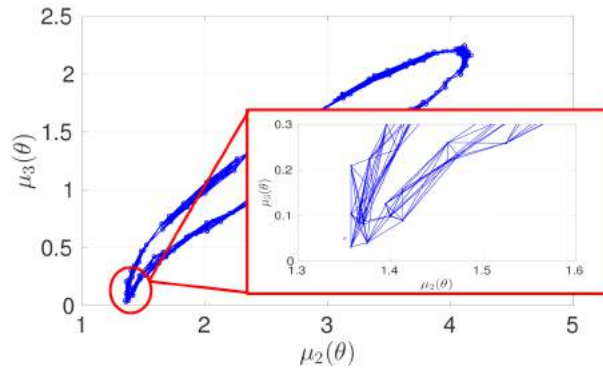
Le nombre de voisins communs à deux sommets i et j reliés par une arête qui « raccourcit » le graphe du voisinage est plus petit que celui de deux sommets qui sont de vrais voisins. Ceci nous permet de détecter les fausses arêtes en vérifiant le nombre de voisins communs à deux sommets. Une des possibilités pour calculer le nombre de voisins communs à deux sommets du graphe est l'utilisation de l'indice de Jaccard définie par

$$J(i,j) = \frac{|N_i \cap N_j|}{|N_i \cup N_j|}, \quad (2.45)$$

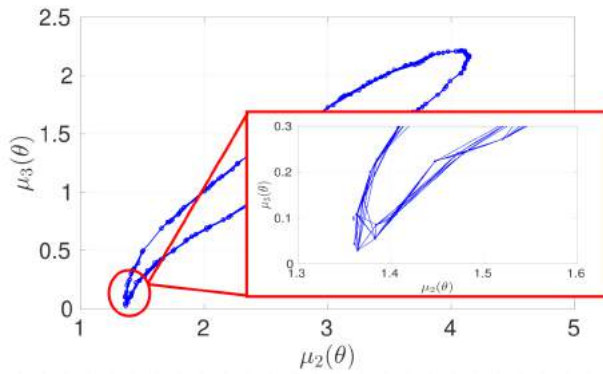
où N_i est l'ensemble de sommets voisins du sommet i . L'indice de Jaccard pour les arêtes raccourcies doit être plus petit que celui pour les bonnes arêtes (c'est à dire reliant deux vrais voisins). Un seuil γ est donc défini de telle sorte que si $J(i,j) < \gamma$ on enlève l'arête entre les sommets i et j , où $0 \leq \gamma \leq 1$. La figure 2.15 représente le graphe du voisinage G dans le cas de bruit avant (a) et après avoir appliqué le filtre de Singer-Wu, l'estimation des moments extrêmes (b) et l'utilisation de l'indice de Jaccard (c). Nous voyons que le nombre des arêtes raccourcies diminue lorsque le filtre de Singer-Wu et l'estimation des moments extrêmes sont appliqués (figure 2.15b) et il diminue encore après avoir utilisé l'indice de Jaccard pour enlever les faux candidats sur le graphe G . En pratique, le choix du γ est empirique : il ne doit pas être trop grand pour que le graphe G ne perde pas des bonnes arêtes qui relient deux sommets voisins.

2.5 Estimation de la différence angulaire par l'estimation des angles des projections

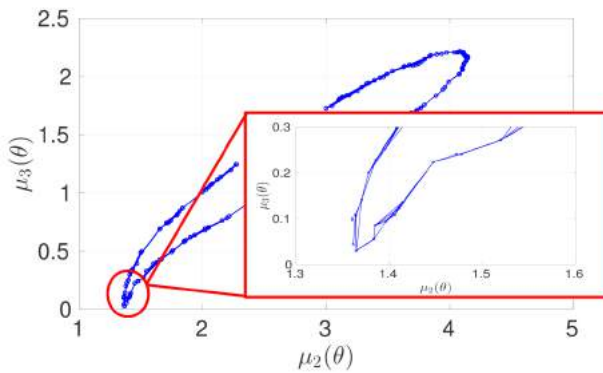
La différence angulaire entre deux projections peut être obtenue en estimant d'abord les angles des deux projections. Une des méthodes les plus récentes pour l'estimation des angles des projections est la méthode développée par Singer *et al.* [58]. Il est à noter que le filtre de Singer-Wu et la technique de l'indice de Jaccard présentés dans la partie précédente font partie de cette méthode. Le principe de la méthode de Singer-Wu est basé sur la décomposition en éléments propres d'un graphe laplacien [60]. C'est une technique de réduction dimensionnelle non-linéaire permettant de réduire les données d'une structure non-linéaire de grande dimension dans une base de dimension inférieure en préservant sa structure non-linéaire. Sachant que les projections de haute dimension sont obtenues selon des angles distribués sur un cercle, la réduction dimensionnelle de l'ensemble des projections dans une base à deux dimensions peut donc révéler l'information sur leurs



(a) graphe bruité



(b) débruitage par filtre de Singer-Wu avec l'estimation des moments extrêmes



(c) élagage des arêtes du graphe à l'aide de l'indice de Jaccard

Figure 2.15: Débruitage du graphe de voisinage G . (a) le graphe est perturbé par du bruit, (b) après avoir appliqué le filtre de Singer-Wu et estimé les moments extrêmes, (c) après avoir utilisé l'indice de Jaccard.

angles.

La comparaison entre notre méthode et la méthode de Singer-Wu est présentée dans le chapitre 4.

2.6 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre notre étude en 2D sur le problème de l'estimation de la différence angulaire entre deux projections faisant partie d'un ensemble de projections donné sans connaissance sur les angles des projections. Les propriétés des moments de projection ont été présentées. Une méthode d'estimation de la différence angulaire basée sur les moments de projections, sur la technique de seuillage adaptatif et sur la construction d'un graphe de voisinage a été développée. De plus, nous avons aussi abordé le problème du bruit qui perturbe les projections et limite le résultat d'estimation. Plusieurs techniques de débruitage (filtre de Singer-Wu, maximum de vraisemblance, indice de Jaccard) ont été proposées dans ce chapitre. La suite du mémoire présente le cas 3D du problème d'estimation de la différence angulaire, qui est une extension de notre méthode en 2D.

Estimation de la différence angulaire en 3D

Sommaire

3.1	Notions de base	71
3.1.1	Rotation en 3D	71
3.1.2	Projection	71
3.1.3	Moment et orientation des projections	72
3.2	Estimation de la différence angulaire	77
3.3	Méthode d'estimation de la différence angulaire	78
3.3.1	Recherche des voisins pour chaque projection	78
3.3.2	Formule d'estimation de la différence angulaire	81
3.3.3	Résumé de la méthode d'estimation de la différence angulaire en 2D et 3D	81
3.4	Estimation de la différence angulaire par l'estimation des orientations des projections	83
3.4.1	Méthode de Singer-Zhao	84
3.4.2	Méthode de Shkolnisky-Singer	84
3.5	Conclusion	86

L'estimation de la différence angulaire en 3D est plus compliquée que celle en 2D. La projection en 3D est une image 2D qui est obtenue par la projection de l'objet 3D selon une orientation dans trois dimensions. Les orientations des projections en 3D sont distribuées sur une sphère. Ceci est différent du cas 2D où les orientations des projections sont distribuées sur un cercle. De plus, une projection en 3D possède aussi une rotation aléatoire dans son plan d'image. Cette propriété n'existe pas en 2D.

Cependant, la méthode d'estimation de la différence angulaire basée sur les moments en 2D peut aussi être utilisée en 3D. Comme la généralisation à la 3D de la méthode des moments n'est pas triviale, nous nous sommes concentrés, pour le cas 3D, sur cette généralisation. La méthode résultante peut être combinée avec d'autres outils existants mais cela dépasse le cadre de notre étude.

Nous considérons maintenant le problème d'estimation de la différence angulaire en 3D. Comme en 2D, dans \mathbb{R}^3 on appelle *objet* une fonction $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow [0,1]$ mesurable au sens de la mesure de Lebesgue et à support S_f compact (S_f est l'adhérence de l'ensemble $\{x \in \mathbb{R}^3 | f(x) \neq 0\}$). Nous définissons aussi le barycentre $C: (x_C, y_C, z_C)$ de f — centre de masse de l'objet — comme suit :

$$\begin{aligned} x_C &= \frac{\int \int x f(x,y,z) dx dy}{\int \int f(x,y,z) dx dy dz}, \\ y_C &= \frac{\int \int y f(x,y,z) dy dy}{\int \int f(x,y,z) dx dy dz}, \\ z_C &= \frac{\int \int z f(x,y,z) dz dy}{\int \int f(x,y,z) dx dy dz}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Les notions de base utilisées dans ce chapitre sont présentées dans la partie suivante.

3.1 Notions de base

3.1.1 Rotation en 3D

On écrit $SO(3)$ pour le groupe de toutes les rotations autour de l'origine dans \mathbb{R}^3 . La rotation des angles (φ, θ, ψ) d'un point dans \mathbb{R}^3 autour des axes x , y et z peut être représentée par la matrice $R_{\varphi, \theta, \psi}$ suivante

$$R_{\varphi, \theta, \psi} = (C^1, C^2, C^3), \quad (3.2)$$

avec

$$C^1 = \begin{pmatrix} c.\theta c.\psi \\ -c.\theta s.\psi \\ s.\theta \end{pmatrix}, C^2 = \begin{pmatrix} s.\varphi s.\theta c.\psi + c.\varphi s.\psi \\ -s.\varphi s.\theta s.\psi + c.\varphi c.\psi \\ -s.\varphi c.\theta \end{pmatrix}, C^3 = \begin{pmatrix} -c.\varphi s.\theta c.\psi + s.\varphi s.\psi \\ c.\varphi s.\theta s.\psi + s.\varphi c.\psi \\ c.\varphi c.\theta \end{pmatrix},$$

où $s.$ et $c.$ représentant respectivement les fonctions sinus et cosinus. La rotation $R_{\varphi, \theta, \psi}$ se compose de trois rotations élémentaires consécutives, la rotation autour de l'axe z d'un angle ψ , puis autour de l'axe y d'un angle θ , puis autour de l'axe x d'un angle φ . Ces rotations sont données par les matrices R_φ , R_θ et $R_\psi \in SO(3)$.

$$R_\varphi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c.\varphi & -s.\varphi \\ 0 & s.\varphi & c.\varphi \end{pmatrix}, R_\theta = \begin{pmatrix} c.\theta & 0 & s.\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -s.\theta & 0 & c.\theta \end{pmatrix}, R_\psi = \begin{pmatrix} c.\psi & -s.\psi & 0 \\ s.\psi & c.\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

3.1.2 Projection

La projection en 2D est définie comme la transformée de Radon selon une orientation fixée. Cette définition peut aussi s'étendre en 3D comme la transformée de Radon selon un plan en dimension 3. Cependant, il y a une autre extension, appelée transformée en rayon X qui est l'intégrale de l'objet selon une orientation. Nous choisissons cette dernière qui modélise l'acquisition en microscopie électronique. Étant donné f un objet de \mathbb{R}^3 , sa projection suivant les angles $\varphi, \theta, \psi \in \mathbb{R}$ est obtenue par la rotation de l'objet autour des axes x , y et z suivant les angles φ, θ, ψ , puis par l'intégration selon l'orientation verticale

sur le plan (xOy) .

$$\mathcal{P}_f(s)(x,y) = \int_{\mathbb{R}} f_s(x,y,z) dz, \quad (3.3)$$

où $s = (\varphi, \theta, \psi) \in \mathbb{R}^3$, $f_s(x,y,z) = f(\rho_s(x,y,z))$, $(\rho_s(x,y,z))^T = R_s(x,y,z)^T$, $R_s \in \text{SO}(3)$.

Dans la suite de cette partie, f désigne un objet de \mathbb{R}^3 et f_s désigne l'image de f par la rotation R_s où $s = (\varphi, \theta, \psi) \in \mathbb{R}^3$. Nous définissons aussi le vecteur d'orientation de la projection comme le vecteur unitaire obtenu par la rotation du vecteur unitaire de l'axe z suivant R_s^{-1}

$$\begin{aligned} v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta) &= R_s^{-1}(0,0,1)^T \\ &= (\sin \theta, -\sin \varphi \cos \theta, \cos \varphi \cos \theta)^T. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Notons que le vecteur d'orientation $v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta)$ de la projection $\mathcal{P}_f(\varphi, \theta, \psi)$ ne dépend pas de l'angle ψ qui détermine la rotation de la projection dans le plan (xOy) . La figure 3.1 donne des exemples de projections d'un objet 3D suivant différentes orientations.

Notons aussi que $(\varphi, \theta, \psi) \mapsto \mathcal{P}_f(\varphi, \theta, \psi)$ est une fonction périodique de période 2π en φ, θ, ψ et que l'on a les relations suivantes

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_f(\varphi, \theta, \psi)(x,y) &= \mathcal{P}_f(\varphi, \theta + \pi, -\psi)(-x,y) \\ &= \mathcal{P}_f(\varphi + \pi, -\theta, -\psi)(x, -y) \\ &= \mathcal{P}_f(\varphi, \theta, \psi + \pi)(-x, -y). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Comme la méthode d'estimation de la différence angulaire en 3D est basée sur des moments de projections qui sont invariants par rapport aux signes de x et y , nous pouvons supposer $\varphi, \theta, \psi \in [-\pi/2, \pi/2[$. Ceci correspond à une distribution de $v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta)$ sur la demi-sphère.

3.1.3 Moment et orientation des projections

Le moment d'ordre $(c,d,e) \in \mathbb{N}^3$ de la fonction f en 3D est donné par

$$\mu_{c,d,e}(f) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} x^c y^d z^e f(x,y,z) dx dy dz. \quad (3.6)$$

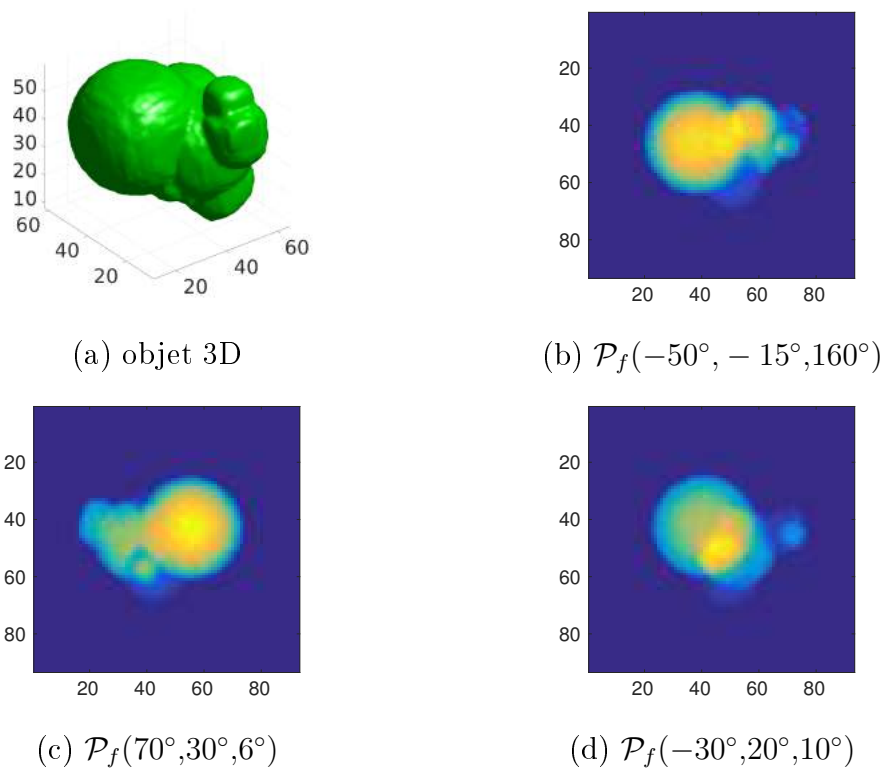


Figure 3.1: Projections en 3D : (a) un objet de \mathbb{R}^3 , (b) – (d) trois projections de l'objet.

On rappelle aussi que la matrice d'inertie [61] de f_s est définie par

$$\mathbb{T}_f(s) = \begin{pmatrix} \mu_{2,0,0}(f_s) & \mu_{1,1,0}(f_s) & \mu_{1,0,1}(f_s) \\ \mu_{1,1,0}(f_s) & \mu_{0,2,0}(f_s) & \mu_{0,1,1}(f_s) \\ \mu_{1,0,1}(f_s) & \mu_{0,1,1}(f_s) & \mu_{0,0,2}(f_s) \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

La matrice d'inertie associée à l'orientation s est liée à la matrice d'inertie associée à l'orientation $(0,0,0)$ par

$$R_s \mathbb{T}_f(s) R_s^{-1} = \mathbb{T}_f(s_0), \quad (3.8)$$

où $s_0 = (0,0,0)$. Si l'on prend comme référentiel la base des vecteurs propres de la matrice symétrique $\mathbb{T}_f(s)$, l'équation (3.8) correspond à une procédure de diagonalisation de $\mathbb{T}_f(s)$ avec, comme vecteurs propres, les colonnes de R_s^{-1} et, comme valeurs propres, les moments $\mu_{2,0,0}(f_{s_0})$, $\mu_{0,2,0}(f_{s_0})$, $\mu_{0,0,2}(f_{s_0})$. Cependant, le calcul direct de $\mathbb{T}_f(s)$ à partir de f est impossible dans le contexte de la tomographie car f est inconnue. Il n'y a que l'ensemble de projections de f qui est disponible. Nous montrons dans la suite que $\mathbb{T}_f(s)$ peut être calculée à partir de l'ensemble des projections de f .

Quand f_s est projetée sur le plan xOy , certains moments de f_s sont préservés sur ses projections $\mathcal{P}_f(s)$.

Propriété 5 (Conservation des moments, [10]). Soient $c, d \in \mathbb{N}$ et $s = (\varphi, \theta, \psi) \in \mathbb{R}^3$. Les moments d'ordre $(c, d, 0)$ de f_s sont égaux aux moments d'ordre (c, d) de la projection $\mathcal{P}_f(s)$

$$\mu_{c,d,0}(f_s) = \mu_{c,d}(\mathcal{P}_f(s)). \quad (3.9)$$

Notons que si le barycentre de f_s est à l'origine, $\mathcal{P}_f(s)$ est aussi centrée à l'origine et $\mu_{1,1,0}(f_s) = \mu_{1,1}(\mathcal{P}_f(s)) = 0$.

La conservation de la trace de la matrice $\mathbb{T}_f(s_0)$ dans le changement de base associé à s permet d'écrire la propriété suivante

Propriété 6 (Somme invariante, [52]). Soit $s = (\varphi, \theta, \psi) \in \mathbb{R}^3$ et soit $\mu_{2,0,0}(f_s)$, $\mu_{0,2,0}(f_s)$ et $\mu_{0,0,2}(f_s)$ les moments d'ordres $(2,0,0)$, $(0,2,0)$ et $(0,0,2)$ de la fonction f_s . Il existe une

constante $C \in \mathbb{R}$ telle que

$$\mu_{2,0,0}(f_s) + \mu_{0,2,0}(f_s) + \mu_{0,0,2}(f_s) = C, \quad \forall s \in \mathbb{R}^3. \quad (3.10)$$

Le calcul de la matrice $\mathbb{T}_f(s)$ à partir de l'ensemble des projections de f est donné par le théorème suivant

Théorème 2 (Expression de $\mathbb{T}_f(s)$ en fonction des moments de projection, [10]). *Soient $\mu^{max}, \mu^{med}, \mu^{min}$ le moment maximal, médian et minimal de la projection $\mathcal{P}(s)$ pour $s = (\varphi, \theta, \psi) \in \mathbb{R}^3$. Si f est centrée à l'origine et si l'origine des angles est choisie de telle façon que $\mu_{2,0,0}(f_{s_0}) = \mu^{max}$, $\mu_{0,2,0}(f_{s_0}) = \mu^{med}$ et $\mu_{0,0,2}(f_{s_0}) = \mu^{min}$, où $s_0 = (0,0,0)$, alors les matrices $\mathbb{T}_f(s)$ de f sont calculées par*

$$\mathbb{T}_f(s) = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & d \\ b & d & e \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

où

- $a = \mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s))$ et $c = \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s))$
- $e = \mu^{max} + \mu^{med} + \mu^{min} - a - c$
- $b = \pm \left(\frac{(a - \mu^{max})(a - \mu^{med})(a - \mu^{min})}{c - a} \right)^{1/2}$
- $d = \pm \left(\frac{(c - \mu^{max})(c - \mu^{med})(c - \mu^{min})}{a - c} \right)^{1/2}$

et

- $\mu^{max} = \max_{s \in \mathbb{R}^3} \max(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)))$
- $\mu^{med} = \max_{s \in \mathbb{R}^3} \min(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s))) = \min_{s \in \mathbb{R}^3} \max(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)))$
- $\mu^{min} = \min_{s \in \mathbb{R}^3} \min(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s))).$

Après avoir calculé les matrices $\mathbb{T}_f(s)$, on obtient l'orientation $v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta)$ de la projection $\mathcal{P}_f(s)$ en fonction des moments de projection par

Corollaire 2 (Calcul de $v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta)$). *Si f est centrée à l'origine, les vecteurs d'orientation $v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta)$ de la projection $\mathcal{P}_f(s)$, où $s = (\varphi, \theta, \psi)$ sont calculés par*

$$v_{\mathcal{P}}^i(\varphi, \theta) = \pm \left(\frac{(\mu^i - \mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)))(\mu^i - \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)))}{(\mu^i - \mu^j)(\mu^i - \mu^k)} \right)^{1/2}, \quad (3.12)$$

où

- $\{i,j,k\} = \{1,2,3\}$,
- $(\mu^1, \mu^2, \mu^3) = (\mu^{max}, \mu^{med}, \mu^{min})$.

La démonstration du corollaire 2 est donnée dans l'annexe B.1.

Il est à noter que pour $\varphi, \theta \in [-\pi/2, \pi/2[$, $v_{\mathcal{P}}^3(\varphi, \theta) = \cos \varphi \cos \theta > 0$ et on déduit de l'équation (3.12) quatre solutions différentes de $v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta)$ dû à l'ambiguïté des signes de $v_{\mathcal{P}}^1(\varphi, \theta)$ et $v_{\mathcal{P}}^2(\varphi, \theta)$. Ceci correspond à quatre valeurs symétrique de $v_{\mathcal{P}}$ sur quatre octants de la demi-sphère (figure 3.2).

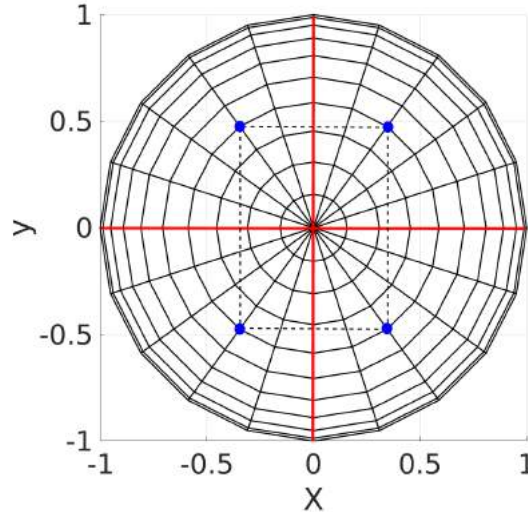


Figure 3.2: Représentation des quatre possibilités pour le vecteur d'orientation sur les quatre octants de la demi-sphère (vue de dessus) en raison des signes inconnus dans l'équation (3.12).

Comme en 2D, les moments d'ordre (c,d) de la projection $\mathcal{P}_f(s)$ sont aussi des polynômes trigonométriques. La proposition suivante étend le corollaire 3 à la 3D.

Proposition 4 (Polynôme trigonométrique). *Soit $s = (\varphi, \theta, \psi) \in \mathbb{R}^3$, le moment $\mu_{c,d}(\mathcal{P}_f(s))$ d'ordre (c,d) de la projection $\mathcal{P}_f(s)$ est un polynôme trigonométrique de degré $c + d$ en fonction de l'orientation de projection.*

La démonstration de la proposition 4 est donnée dans l'annexe B.2.

3.2 Estimation de la différence angulaire

Nous considérons maintenant le cas 3D de l'estimation de la différence angulaire entre deux projections. Soit f un objet 3D dont le barycentre est à l'origine, $n \in \mathbb{N}$, $\Theta = \{(\varphi_i, \theta_i, \psi_i) \mid 1 \leq i \leq n\}$ un ensemble d'orientations inconnues dans $[-\pi/2, \pi/2]^3$. On appelle $\Pi = \{\mathcal{P}(\varphi_i, \theta_i, \psi_i) \mid 1 \leq i \leq n\}$, l'ensemble des projections associées à Θ , et $V = \{v_{\mathcal{P}}(\varphi_i, \theta_i) \mid 1 \leq i \leq n\}$, l'ensemble des vecteurs d'orientations de Π . Notre objectif est d'estimer la différence angulaire entre deux projections à partir de l'ensemble des projections Π . Comme en 2D, nous définissons la différence angulaire entre deux projections $\mathcal{P}_f(s)$ et $\mathcal{P}_f(s')$ comme l'angle minimal entre deux droites associées à deux vecteurs d'orientations $v_{\mathcal{P}}(s)$ et $v_{\mathcal{P}}(s')$. Elle est calculée par le produit scalaire entre ces deux vecteurs et définie comme suit

$$d_{\text{ang}}(\mathcal{P}_f(s), \mathcal{P}_f(s')) = \arccos(|v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta) \cdot v_{\mathcal{P}}(\varphi', \theta')|). \quad (3.13)$$

L'équation (3.13) peut être utilisée pour effectuer cette estimation. Cependant, il est à noter qu'il y a quatre solutions possibles à l'équation (3.13) à cause des signes inconnus dans l'équation (3.12). En effet, la valeur absolue du produit scalaire de deux vecteurs $v_{\mathcal{P}_i}$ et $v_{\mathcal{P}_j}$ est comme suit

$$|v_{\mathcal{P}_i} \cdot v_{\mathcal{P}_j}| = |\pm v_{\mathcal{P}_i}^1 v_{\mathcal{P}_j}^1 \pm v_{\mathcal{P}_i}^2 v_{\mathcal{P}_j}^2 + v_{\mathcal{P}_i}^3 v_{\mathcal{P}_j}^3|, \quad (3.14)$$

où $v_{\mathcal{P}_i} = (\pm v_{\mathcal{P}_i}^1, \pm v_{\mathcal{P}_i}^2, v_{\mathcal{P}_i}^3)$ et $v_{\mathcal{P}_j} = (\pm v_{\mathcal{P}_j}^1, \pm v_{\mathcal{P}_j}^2, v_{\mathcal{P}_j}^3)$ sont les deux vecteurs d'orientations des projections \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_j , $i \neq j$. L'équation (3.14) donne en prenant la fonction arccosinus quatre angles différentes entre 0 et $\pi/2$.

Pour résoudre le problème d'estimation de la différence angulaire, nous proposons une approche basée sur les moments, qui étend notre méthode en 2D. Nous cherchons d'abord les projections dont les vecteurs d'orientations sont proches (les projections voisines). Une technique de seuillage adaptatif est développée pour rechercher les voisins de chaque

projection dans l'ensemble de projection Π . Les différences angulaires entre ces projections voisines sont estimées avec une formule déduite de (3.13). Ensuite, nous construisons un graphe de voisinage $G = (V, E)$ dont les sommets sont des projections, les arêtes relient les projections voisines et sont pondérées par les différences angulaires estimées. Enfin, la différence angulaire entre deux projections quelconques sur le graphe de voisinage G est estimée en appliquant un algorithme du plus court chemin sur le graphe G .

Bien que toutes les étapes d'estimation soient similaires à celles en 2D, il existe aussi des difficultés spécifiques au cas 3D à chaque étape. Elles sont présentées dans la partie suivante.

3.3 Méthode d'estimation de la différence angulaire

3.3.1 Recherche des voisins pour chaque projection

Le problème de la recherche des voisins les plus proches de chaque projection est étudié dans cette partie. Comme en 2D, la recherche des projections voisines est basée sur le calcul d'intervalles de confiance pour les moments de projections de différents ordres. Plus précisément, étant donné $\mu_{c,d}$ le moment d'ordre (c,d) de la projection \mathcal{P} , il faut trouver au moins un autre moment $\mu'_{c,d}$ d'une projection \mathcal{P}' ($\mathcal{P} \neq \mathcal{P}'$) dans un intervalle $\mu_{c,d} \pm \varepsilon_{c,d}$ tel que le vecteur d'orientation $v_{\mathcal{P}'}$ de \mathcal{P}' soit proche du vecteur d'orientation $v_{\mathcal{P}}$ de \mathcal{P} . Cependant, cette approche ne peut pas être appliquée directement en 3D, car le moment de projection calculé à partir du vecteur d'orientation $v_{\mathcal{P}}(\varphi, \theta)$ dépend de l'angle ψ qui donne la rotation de la projection dans le plan projeté. Au lieu d'utiliser ces moments (appelés moments initiaux), nous utilisons les moments de Hu [62] qui sont invariants par rotation. Les moments de Hu sont des sommes de produits des moments initiaux. Étant donné que les moments initiaux sont des polynômes trigonométriques (cf. proposition 4) et que l'ensemble des polynômes trigonométriques est un anneau, les moments de Hu sont aussi des polynômes trigonométriques. Notons $\mathcal{M}^h(\varphi, \theta)$ le $h^{\text{ème}}$ moment de Hu de la projection $\mathcal{P}(\varphi, \theta, \psi)$, $h = 1 \dots 7$. La valeur de $\mathcal{M}^h(\varphi, \theta)$ est calculée comme suit (en omettant les arguments (φ, θ, ψ)) :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{M}^1 &= \mu_{2,0} + \mu_{0,2}, \\
 \mathcal{M}^2 &= (\mu_{2,0} - \mu_{0,2})^2 + 4\mu_{1,1}^2, \\
 \mathcal{M}^3 &= (\mu_{3,0} - 3\mu_{1,2})^2 + (3\mu_{2,1} - \mu_{0,3})^2, \\
 \mathcal{M}^4 &= (\mu_{3,0} + \mu_{1,2})^2 + (\mu_{2,1} + \mu_{0,3})^2, \\
 \mathcal{M}^5 &= (\mu_{3,0} - 3\mu_{1,2})(\mu_{3,0} + \mu_{1,2})((\mu_{3,0} + \mu_{1,2})^2 - 3(\mu_{2,1} + \mu_{0,3})^2) \\
 &\quad + (3\mu_{2,1} - \mu_{0,3})(\mu_{2,1} + \mu_{0,3})(3(\mu_{3,0} + \mu_{1,2})^2 - (\mu_{2,1} + \mu_{0,3})^2), \\
 \mathcal{M}^6 &= (\mu_{2,0} - \mu_{0,2})((\mu_{3,0} + \mu_{1,2})^2 - (\mu_{2,1} + \mu_{0,3})^2) + 4\mu_{1,1}(\mu_{3,0} + \mu_{1,2})(\mu_{2,1} + \mu_{0,3}), \\
 \mathcal{M}^7 &= (3\mu_{2,1} - \mu_{0,3})(\mu_{3,0} + \mu_{1,2})((\mu_{3,0} + \mu_{1,2})^2 - 3(\mu_{2,1} + \mu_{0,3})^2) \\
 &\quad - (\mu_{3,0} - 3\mu_{1,2})(\mu_{2,1} + \mu_{0,3})(3(\mu_{3,0} + \mu_{1,2})^2 - (\mu_{2,1} + \mu_{0,3})^2).
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

La figure 3.3 illustre la distribution des moments de Hu en fonction des angles φ et $\theta \in [-\pi/2, \pi/2]$. On voit que les moments de Hu sont des sommes de produits de fonctions sinusoïdales. Le degré du polynôme trigonométrique \mathcal{M}^h est calculé à partir des degrés des polynômes trigonométriques $\mu_{c,d}$ qui font partie de l'expression de \mathcal{M}^h . Notons aussi que l'ordre du moment \mathcal{M}^h correspond au degré du polynôme trigonométrique \mathcal{M}^h . Ensuite, afin de choisir les voisins les plus proches de chaque projection, nous calculons, pour chaque moment $\mathcal{M}^h(\varphi, \theta)$ de la projection $\mathcal{P}(\varphi, \theta, \psi)$, un intervalle $\mathcal{M}^h(\varphi, \theta) \pm \varepsilon_h$ dans lequel on peut trouver, avec une probabilité assez grande, au moins un autre moment de Hu $\mathcal{M}^h(\varphi', \theta')$ correspondant à un voisin de $\mathcal{P}(\varphi, \theta, \psi)$. La valeur de ε_h est calculée comme suit.

Proposition 5 (Seuillage adaptatif en 3D).

Soit $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow [0,1]$ un objet 3D et soit $p \in [0,1]$. Supposons que les orientations de projections soient distribuées uniformément sur la demi-sphère. Pour chaque moment de Hu \mathcal{M}_i^h de la projection \mathcal{P}_i sous l'orientation $v_{\mathcal{P}_i}$ ($1 \leq h \leq 7$), il existe un intervalle borné par $\mathcal{M}_i^h \pm \varepsilon_h$ dans lequel on peut trouver, avec une probabilité supérieure ou égale à p , au moins un moment de Hu \mathcal{M}_j^h d'une projection \mathcal{P}_j sous l'orientation $v_{\mathcal{P}_j}$ avec $\mathcal{M}_i^h \neq \mathcal{M}_j^h$ et $v_{\mathcal{P}_j}$ est le voisin de $v_{\mathcal{P}_i}$. La valeur de ε_h est donnée par

$$\varepsilon_h = \pi \left(1 - (1 - p)^{\frac{1}{n-1}}\right)^{\frac{1}{3}} \xi_h, \tag{3.16}$$

où $\xi_h = k \max_{1 \leq j \leq n} (|\mathcal{M}^h(\varphi_j, \theta_j)|)$, $k = 2, 4, 6, 6, 12, 8, 12$ est l'ordre de \mathcal{M}^h pour $h = 1 \dots 7$, respectivement.

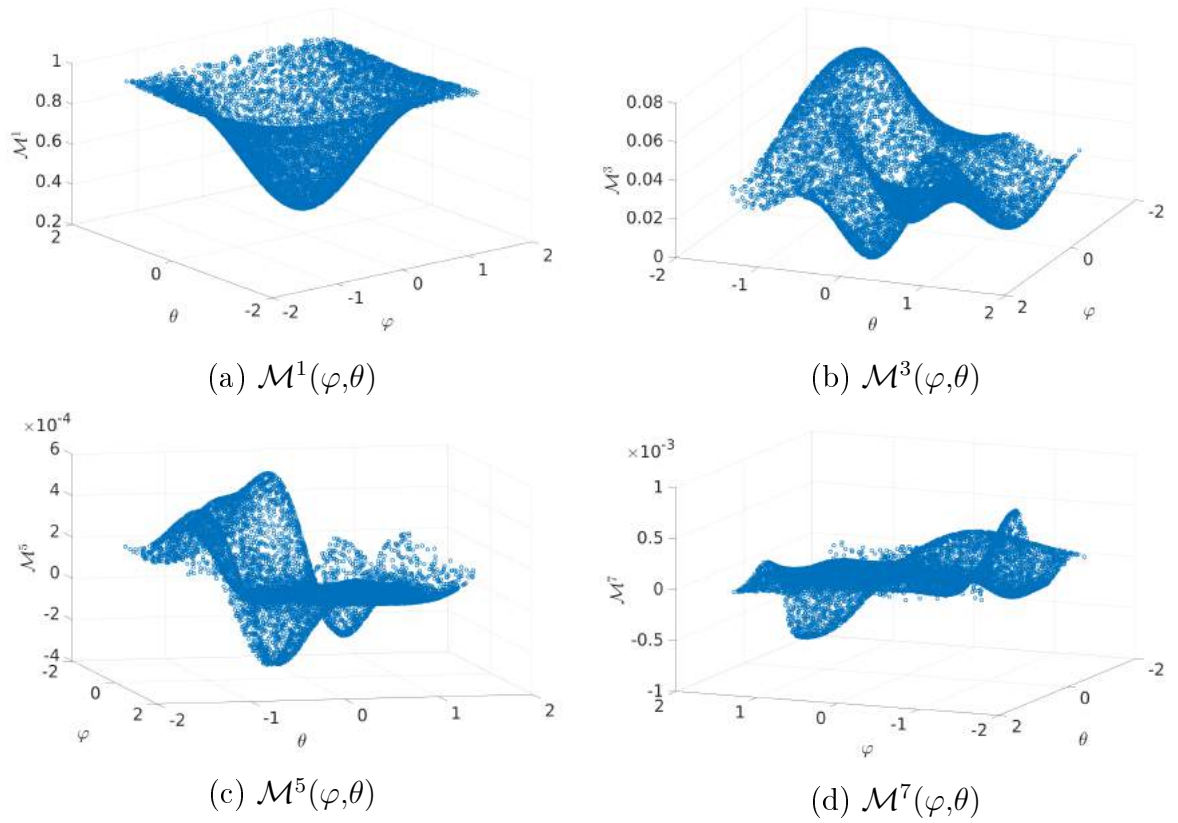


Figure 3.3: Distribution de moments de Hu en fonction des angles φ et θ .

La démonstration de la proposition 5 est donnée dans l'annexe B.3.

Remarque 4. Comme en 2D, la démonstration de la proposition 5 peut être adaptée afin de relâcher l'hypothèse de la distribution uniforme pour les angles. Notons λ_1, λ_2 la densité de probabilité des angles φ et θ . Alors, dans l'équation (3.16), le terme $(1 - (1 - p)^{\frac{1}{n-1}})^{\frac{1}{3}}$ peut être remplacé par $\alpha \in \Lambda^{-1} \left(\frac{1}{4} (1 - (1 - p)^{\frac{1}{n-1}}) \right)$ où Λ est la fonction croissante

$$\delta \mapsto \int_0^\delta ((\lambda_1 \star \tilde{\lambda}_1)|_{t \geq 0} \star (\lambda_2 \star \tilde{\lambda}_2)|_{t \geq 0})(t) dt, \quad (3.17)$$

avec $\tilde{\lambda}_1 = \lambda_1 \circ (-\text{id})$ (resp. $\tilde{\lambda}_2 = \lambda_2 \circ (-\text{id})$) et \star est la convolution.

3.3.2 Formule d'estimation de la différence angulaire

Comme nous l'avons déjà dit, la formule (3.13) ne permet pas d'estimer la différence angulaire entre deux projections quelconques suite au problème des signes dans (3.12). Cependant, nous pouvons utiliser la formule (3.13) dans le cas de deux projections voisines en faisant l'hypothèse que toutes les projections voisines se situent dans un même octant. La majoration de l'erreur produite par cette hypothèse est complexe et nous ne l'avons pas fait. Cependant, Nous avons constaté expérimentalement que cette hypothèse conduit à des erreurs négligeables (selon les résultats dans la partie 4.2) lorsque le nombre de projections est suffisamment grand. Sous cette hypothèse, on choisit donc le plus petit angle parmi les quatre possibles. La formule (3.13) est ré-écrite comme suit :

$$d_{\text{ang}}(\mathcal{P}, \mathcal{P}') = \arccos \left(\sum_{i=1}^3 |v_{\mathcal{P}}^i v_{\mathcal{P}'}^i| \right). \quad (3.18)$$

La figure 3.4 représente la distribution uniforme des vecteurs d'orientations sur la demi-sphère. Les points entre les bandes rouges sont des points dans la zone ambiguë où on peut trouver les paires qui se situent sur deux octants différents et les deux lignes violettes séparent les quatre octants.

3.3.3 Résumé de la méthode d'estimation de la différence angulaire en 2D et 3D

Nous pouvons maintenant construire un graphe de voisinage dont les sommets sont les projections, les arêtes connectent les projections voisines et sont pondérées par les différences angulaires estimées par l'équation (3.18). Enfin, la différence angulaire entre deux projections quelconques dans le graphe de voisinage est calculée par un algorithme du plus court chemin. Nous rappelons que notre méthode en 2D linéarise l'équation de Salzman (2.12) afin de réduire l'effet du bruit. Cependant, comme la linéarisation de l'équation (3.18) en 3D n'est pas aussi simple qu'en 2D, nous omettons cette étape. Comme en 2D également, les valeurs de μ^{max} , μ^{med} et μ^{min} utilisées dans (3.18) et (3.16) sont incon-

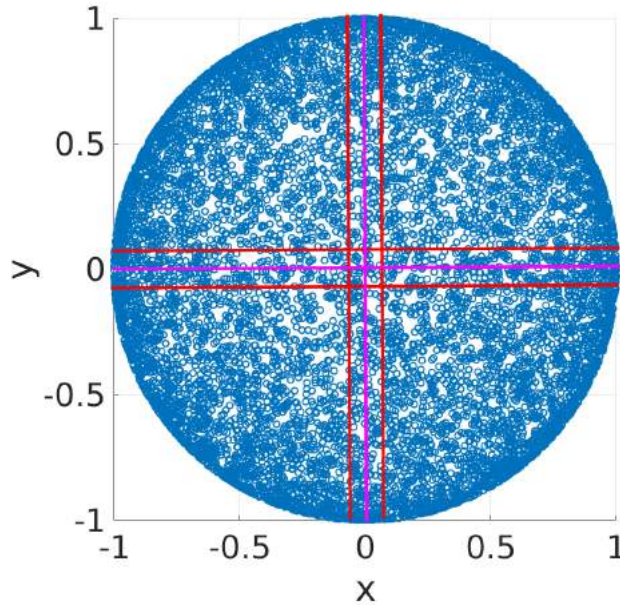


Figure 3.4: représentation des orientations sur la demi-sphère (vue dessus) : les quatre octants sont divisés par les bandes violettes, la zone entre des bandes rouges est la zone ambiguë.

nues et ne peuvent être estimées qu'à partir de l'ensemble fini de projections. Néanmoins, la proposition 2 est encore valable en 3D et nous pouvons donc négliger les erreurs d'estimation de μ^{max} , μ^{med} et μ^{min} lorsque le nombre de projections est grand. En présence de bruit, le filtre de Singer-Wu est utilisé pour débruiter les projections et l'indice de Jaccard est utilisé pour débruiter le graphe de voisinage. Par contre, l'estimation μ^{max} , μ^{med} et μ^{min} par le maximum de vraisemblance est abandonné à cause de la complexité du calcul. Bien que la linéarisation de l'équation de Salzman et l'estimation des extrémités ne soient pas appliquées en 3D, les expérimentations (chapitre 4) montrent que le résultat de notre méthode surpasse celui de la distance euclidienne par sa faible variabilité.

La méthode proposée pour l'estimation de la différence angulaire entre deux projections tomographiques en 2D et 3D est appelée **Estimation de la Différence Angulaire basé sur les Moments (EDAM)**. Les étapes de la méthode EDAM sont détaillées ci-après.

Étape 1 : Débruitage de l'ensemble de projections en utilisant le filtre de Singer-Wu

[58].

Étape 2 : Calcul des moments à partir de l'ensemble de projections. En 2D, les moments μ_d , $2 \leq d \leq 5$, sont calculés par l'équation (2.5). En 3D, les moments $\mu_{c,d}$, $0 \leq c, d \leq 3$, sont calculés par l'équation (2.4). Puis les moments de Hu \mathcal{M}^h , $1 \leq h \leq 7$, sont calculés à partir de $\mu_{c,d}$.

Étape 3 : Estimation des moments extrêmes : cette étape n'est valable qu'en 2D où μ_2^{min} and μ_2^{max} sont estimées comme présentées dans la partie 2.4.2.

Étape 4 : Sélection des voisins de chaque projection par seuillage adaptatif. En 2D, le seuil ε_d est calculé par l'équation 2.13. En 3D, le seuil ε_h est calculé par l'équation 3.16.

Étape 5 : Calcul des différences angulaires entre des projections voisines. En 2D, les formules dans la définition 2 sont utilisées. En 3D, la formule (3.18) est utilisée.

Étape 6 : Construction du graphe de voisinage dont les sommets sont les projections et les arêtes relient les projections voisines trouvées dans l'Étape 4 et sont pondérées par les différences angulaires calculées dans l'Étape 5.

Étape 7 : Débruitage du graphe de voisinage en utilisant l'indice de Jaccard comme présentée dans la partie 2.4.3.

Étape 8 : Calcul de la différence angulaire entre deux projections quelconques en utilisant un algorithme du plus court chemin sur le graphe de voisinage.

3.4 Estimation de la différence angulaire par l'estimation des orientations des projections

Comme en 2D, la différence angulaire entre deux projections peut être obtenue par l'estimation préalable des orientations des deux projections. Parmi les méthodes d'estimation des orientations en 3D, deux méthodes récentes sont présentées.

3.4.1 Méthode de Singer-Zhao

Singer *et al.* [63] ont proposé une méthode d'estimation des orientations des projections en se basant sur une technique de réduction dimensionnelle dont le calcul des trois premiers vecteurs propres donne l'information sur les orientations des projections. Soient \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_j deux projections. La première étape de cette méthode est de calculer la distance euclidienne entre \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_j

$$DE_{i,j} = \min_{\theta \in [0, 2\pi)} \|\mathcal{P}_i - R_\theta \mathcal{P}_j\|, \quad (3.19)$$

où $R_\theta \mathcal{P}$ est la rotation de \mathcal{P} suivant l'angle θ . L'étape suivante est de construire un graphe de voisinage $G = (V, E)$. Les sommets dans V sont des projections, les arêtes dans E relient deux projections dont la distance euclidienne est inférieure à un seuil ε donné. La construction du graphe de voisinage G est basée sur le fait que si deux projections dont les orientations sont très proches, la distance euclidienne calculée entre ces deux projections est aussi petite. Le seuil ε permet de rechercher les plus proches voisins de chaque projection. Ensuite, pour faire la réduction dimensionnelle, une matrice H est calculée à partir du graphe de voisinage G

$$H_{i,j} = \begin{cases} e^{i\theta_{i,j}}, & \{i,j\} \in E \\ 0, & \{i,j\} \notin E \end{cases}, \quad (3.20)$$

où $i = \sqrt{-1}$ et $\theta_{i,j}$ est l'angle θ obtenu de l'équation (3.19). La matrice H représente une relation d'orientation locale entre des projections voisines et le calcul de trois premiers vecteurs propres de H donne l'information sur les orientations des projections. Il est à noter que la méthode de Singer-Zhao repose sur l'hypothèse que la différence angulaire entre des orientations de deux projection voisines est très petite. Le nombre de projections doit donc être très grand pour valider cette hypothèse.

3.4.2 Méthode de Shkolnisky-Singer

La méthode d'estimation des orientations de Shkolnisky *et al.* [64] est basée sur la technique de la ligne commune présentée dans la partie 1.3.2. La première étape est la

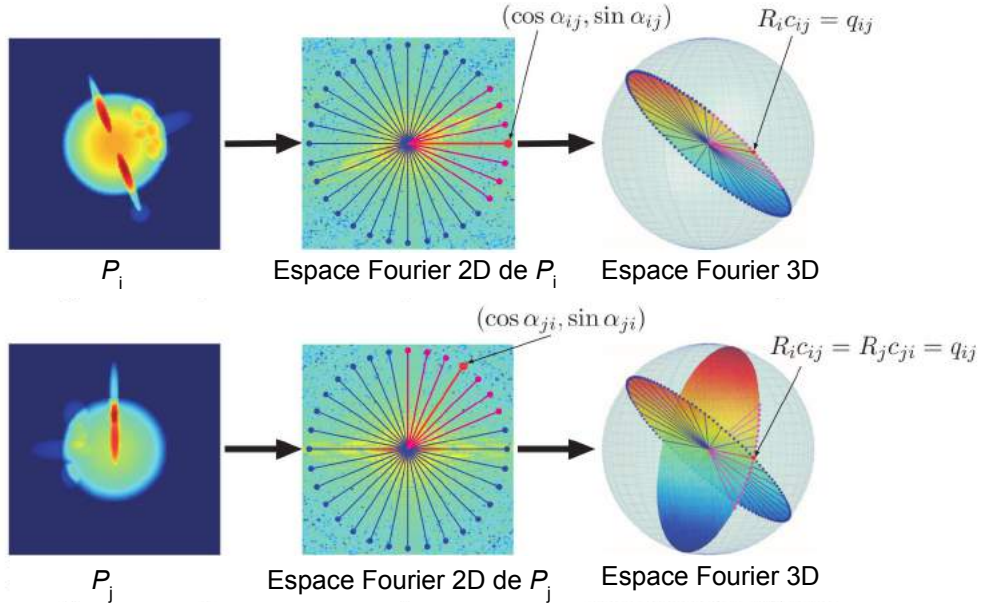


Figure 3.5: La relation des lignes communes dans l'espace de Fourier [64].

recherche de la ligne commune entre deux projections \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_j quelconques. Comme illustré sur la figure 3.5, deux projections \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_j s'intersectent en une ligne commune caractérisée par un vecteur unitaire $q_{i,j}$ dans l'espace de Fourier 3D. Les projections de ce vecteur sur l'espace de Fourier 2D des deux projections \mathcal{P}_i et \mathcal{P}_j sont les deux vecteurs unitaires $c_{i,j}$ et $c_{j,i}$

$$c_{i,j} = (\cos \alpha_{i,j}, \sin \alpha_{i,j}, 0)^T, \quad c_{j,i} = (\cos \alpha_{j,i}, \sin \alpha_{j,i}, 0)^T, \quad (3.21)$$

où $\alpha_{i,j}$ est l'angle entre $c_{i,j}$ et l'axe des abscisses. Il existe une relation entre $q_{i,j}$ et ses projections $c_{i,j}$, $c_{j,i}$

$$R_i c_{i,j} = q_{i,j} = R_j c_{j,i}, \quad (3.22)$$

où R_i est la rotation qui amène $c_{i,j}$ à $q_{i,j}$. L'équation (3.22) est ré-écrite par

$$c_{i,j} = R_i^{-1} R_j c_{j,i}, \quad (3.23)$$

où $R_i^{-1} R_j$ est la rotation qui amène $c_{j,i}$ à $c_{i,j}$. Cette rotation peut être calculée à partir des lignes communes entre \mathcal{P}_i , \mathcal{P}_j et une autre projection \mathcal{P}_k , $k \neq \{i,j\}$. En pratique,

la recherche des lignes communes contient des erreurs dues au bruit. Pour y remédier, plusieurs valeurs de $R_i^{-1}R_j$ sont calculées à partir de $\mathcal{P}_i, \mathcal{P}_j$ et toutes les autres projections \mathcal{P}_k , puis la moyenne des $R_i^{-1}R_j$ est utilisé. L'étape suivante est d'établir une matrice S telle que

$$S_{i,j} = R_i^{-1}R_j. \quad (3.24)$$

Comme la matrice S contient les rotations relatives entre toutes les paires de projections, le calcul de trois premiers vecteurs propres de cette matrice donne l'information sur les orientations des projections.

La comparaison des deux méthodes présentées ci-dessus avec la méthode EDAM est faite dans la partie suivante.

3.5 Conclusion

Nous avons introduit dans ce chapitre le cas 3D du problème d'estimation de la différence angulaire entre deux projections non-orientées. La méthode d'estimation en 3D est une extension de celle en 2D. Les propriétés des moments de projections sont étudiées et utilisées pour obtenir une formule d'estimation entre deux projections voisines et pour rechercher les voisins de chaque projection en utilisant la technique du seuillage adaptatif. Les seuils sont déterminés en se basant sur les moments de Hu au lieu des moments initiaux dû à leur invariance par rotation. Enfin, un graphe de voisinage comme celui en 2D est construit pour estimer la différence angulaire entre deux projections quelconques. Les techniques de débruitage présentées en 2D sont aussi utilisées en 3D sauf l'estimation des deux moments extrêmes en raison de la complexité du calcul. Dans la suite du mémoire, la performance de notre méthode en 2D et 3D est testée dans plusieurs expérimentations.

Résultats expérimentaux et discussion

Sommaire

4.1	Expérimentations en 2D	88
4.1.1	Cas sans bruit	90
4.1.1.1	Estimation de la différence angulaire entre deux projections voisines	90
4.1.1.2	Estimation de la différence angulaire entre deux projections quelconques	92
4.1.2	Cas bruité	95
4.1.2.1	Estimation des moments extrêmes par le maximum de vraisemblance	95
4.1.3	Comparaison avec la méthode de Singer-Wu	96
4.2	Expérimentations en 3D	99
4.2.1	Cas sans bruit	101
4.2.2	Cas bruité	105
4.2.3	Comparaison avec la méthode de Singer-Zhao et la méthode de Shkolnisky-Singer	105
4.3	Conclusion	107

Le but des expérimentations dans ce chapitre est de tester les performances des mesures de dissimilarité en fonction des orientations des projections et de la différence

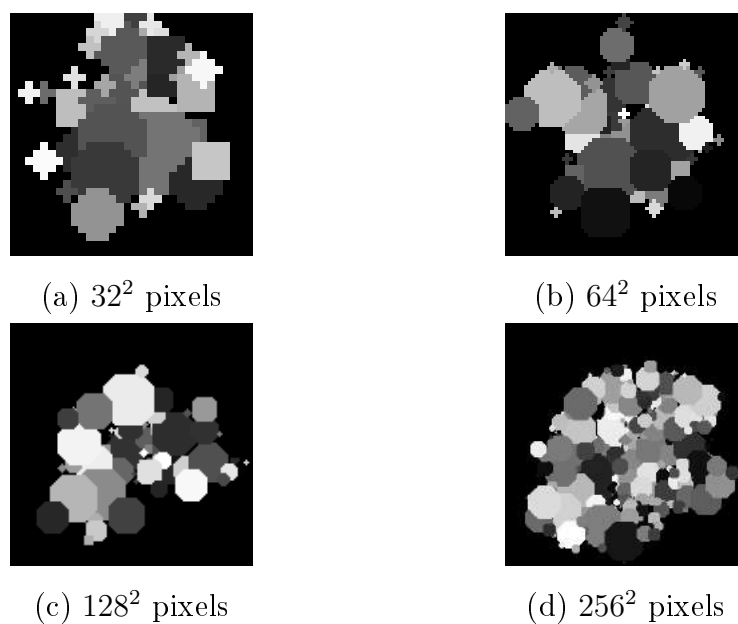


Figure 4.1: Exemples des images 2D pour différentes résolutions.

angulaire entre deux projections. Les tests pour des projections voisines (le cas local) et des projections quelconques (le cas global) sont effectués. La base des images 2D et 3D testées est fabriquée artificiellement à l'aide d'un programme informatique que nous avons écrit. Les images ont des formes aléatoires en niveau de gris avec comme objectif de simuler des molécules en Cryo-ME.

4.1 Expérimentations en 2D

Notre méthode est testée sur un ensemble de 50 images 2D en niveau de gris aux résolutions 32^2 , 64^2 , 128^2 et 256^2 pixels. Des exemples de ces images sont présentés sur la figure 4.1 et leurs projections 1D selon différents niveaux de bruit le sont sur la figure 4.2.

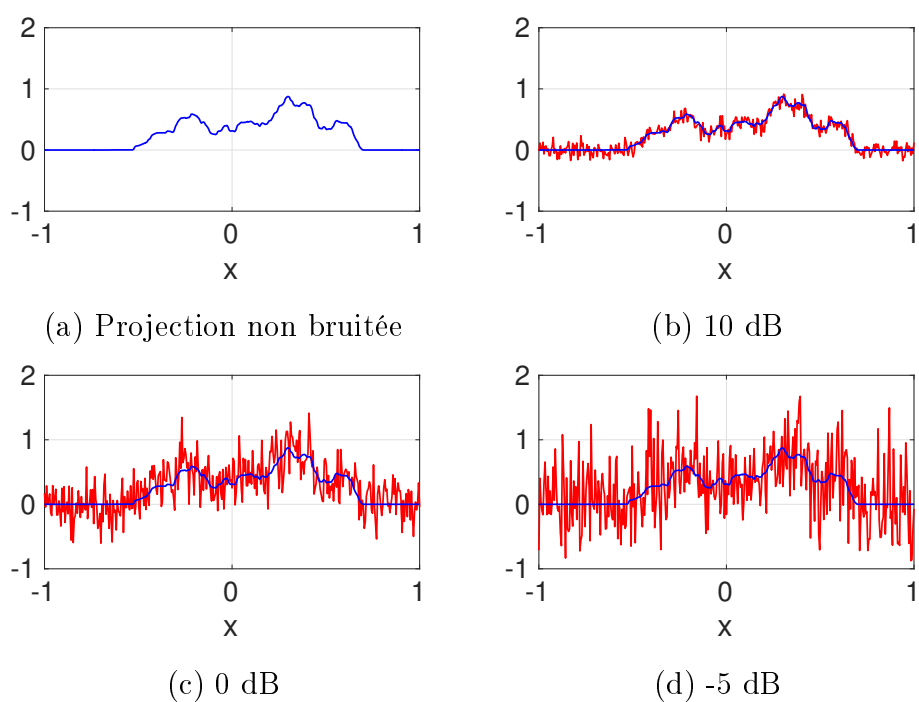


Figure 4.2: Projections 1D avec différents niveaux de bruit de l'image présentée sur la figure 4.1 à la résolution 128^2 pixels.

4.1.1 Cas sans bruit

4.1.1.1 Estimation de la différence angulaire entre deux projections voisines

La première expérimentation vise à tester la robustesse des formules d'estimation présentées dans la définition 2, dans le cas où la différence angulaire entre deux projections est petite. (c'est à dire entre des projections voisines). Dans cette première expérimentation, pour chaque image 2D, 200 paires d'angles $(\theta, \Delta\theta)$ sont générées aléatoirement (selon une distribution uniforme) dans le pavé $[-90^\circ, 90^\circ] \times [0^\circ, 2^\circ]$. Les projections $\mathcal{P}(\theta)$ et $\mathcal{P}(\theta + \Delta\theta)$ sont calculées pour chaque paire $(\theta, \Delta\theta)$. La différence angulaire entre $\mathcal{P}(\theta)$ et $\mathcal{P}(\theta + \Delta\theta)$ est ensuite estimée en utilisant les formules de la définition 2. Il est à noter que les deux moments extrêmes μ_2^{max} et μ_2^{min} sont pris dans l'ensemble des 200 paires de moments $(\mu_2(\theta), \mu_2(\theta + \Delta\theta))$. Une seconde estimation est calculée à l'aide de la méthode de Salzman (MS) présentée dans la partie 2.2. Une troisième mesure de similarité avec la distance euclidienne (DE) entre $\mathcal{P}(\theta)$ et $\mathcal{P}(\theta + \Delta\theta)$ est aussi calculée. L'objectif de cette première expérimentation est d'estimer la dispersion de ces mesures par rapport à l'angle θ de projection, ainsi que la linéarité des mesures en fonction de la différence angulaire $d_{\text{ang}}(\mathcal{P}(\theta), \mathcal{P}(\theta + \Delta\theta)) = \Delta\theta$. Afin de mesurer le résultat obtenu, nous utilisons la racine de l'erreur quadratique moyenne normalisée $\bar{\varepsilon}$ défini comme suit en (%)

$$\bar{\varepsilon} = \frac{100}{\widehat{X}_{max} - \widehat{X}_{min}} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \widehat{X}_i)^2}{n}}, \quad (4.1)$$

où \widehat{X} est l'estimateur de X , $\widehat{X}_{max} = \max_{1 \leq i \leq n}(\widehat{X}_i)$, $\widehat{X}_{min} = \min_{1 \leq i \leq n}(\widehat{X}_i)$. Les résultats de la première expérimentation sont montrés sur la figure 4.3. Il est clair que la linéarité de la DE (figure 4.3a) est moins forte que celle de la MS (figure 4.3b) et de l'EDAM (figure 4.3c). De plus, la dispersion de la DE est beaucoup plus élevée que celle de la MS et de l'EDAM. Cependant, la dispersion de la MS est un peu plus petite que celle de l'EDAM. Une raison est que la méthode EDAM est la linéarisation de la formule de Salzman.

Notons aussi que la distance euclidienne n'estime pas la différence angulaire entre deux

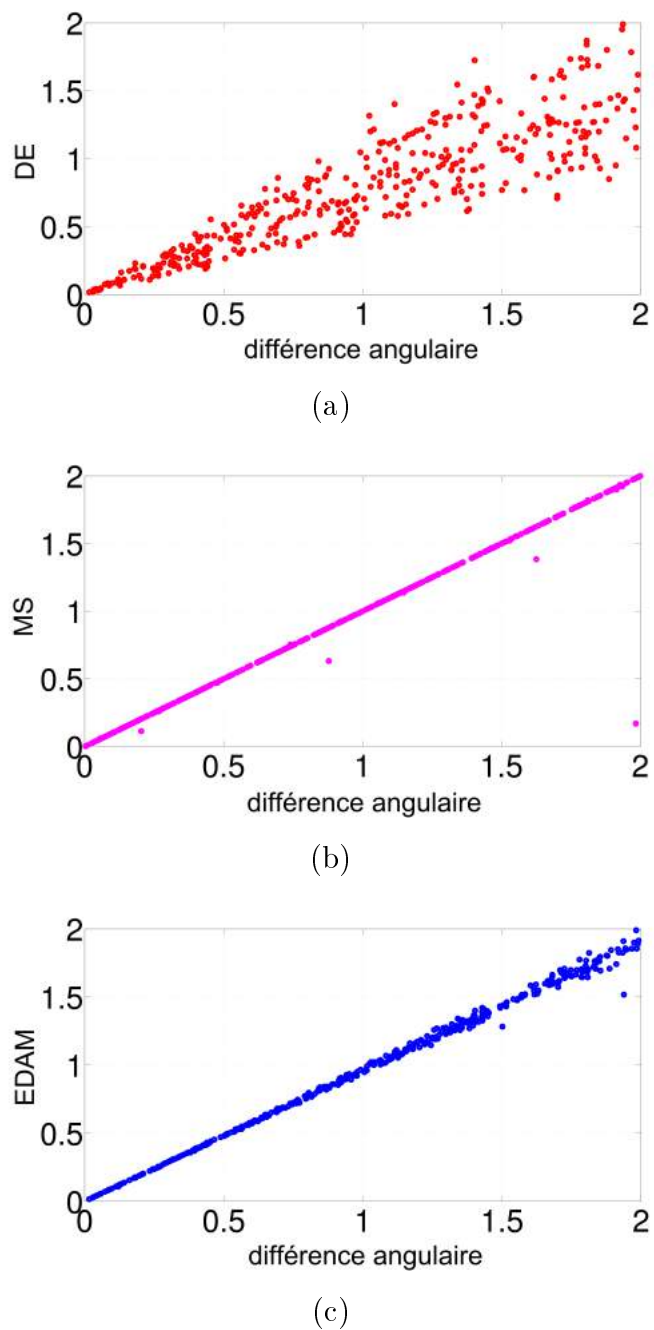


Figure 4.3: Première expérimentation (cas local) : dispersion de la DE (a), de la MS (b) et de l'EDAM (c) entre deux projections voisines en 2D pour image de 128^2 pixels. La DE est normalisée dans $[0^\circ, 2^\circ]$.

projections (au contraire de l'EDAM et de la MS). Afin de comparer la dispersion de la distance euclidienne avec les autres mesures sur la figure 4.3, la distance euclidienne est normalisée dans l'intervalle de la différence angulaire testée ($[0^\circ, 2^\circ]$ pour cette première expérimentation). De plus, comme l'estimateur \widehat{X} dans le calcul de $\bar{\varepsilon}$ doit être mesuré avec la même échelle de X , nous n'avons pas calculé $\bar{\varepsilon}$ pour la distance euclidienne.

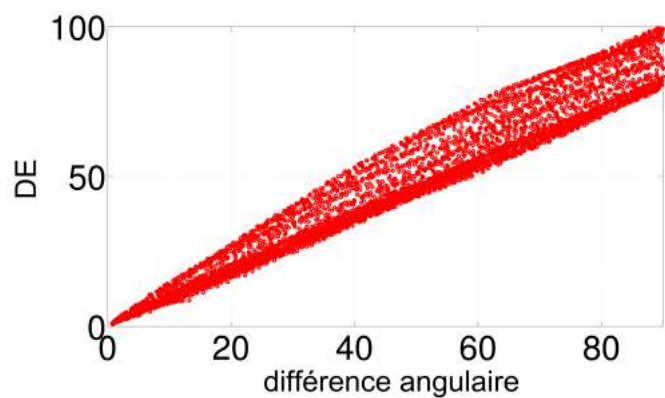
Les résultats quantitatifs en fonction des différentes résolutions des images sont présentés dans le tableau 4.1 (cas local). On voit que les valeurs de $\bar{\varepsilon}$ de l'EDAM et de la MS sont inférieures à 5.2% pour toutes les résolutions.

Tableau 4.1: Première expérimentation (cas local) : $\bar{\varepsilon}$ (%) de la MS et de l'EDAM en 2D pour différentes résolutions (en pixels) dans le cas sans bruit. Test pour deux projections voisines.

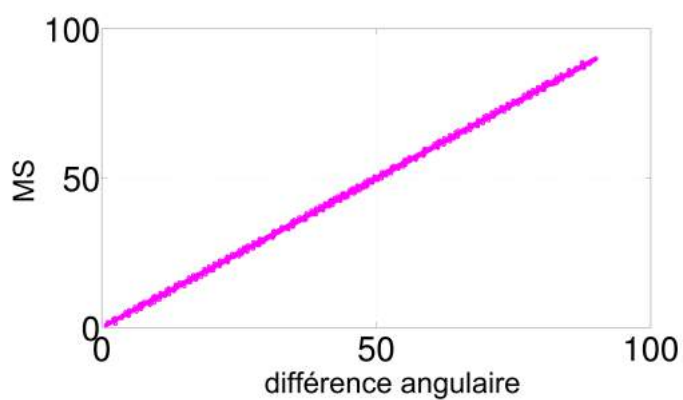
	32^2	64^2	128^2	256^2
MS	5.2 ± 2.8	4.1 ± 1.5	4.0 ± 1.6	3.9 ± 1.5
EDAM	5.2 ± 2.5	5.1 ± 2.0	5.0 ± 1.6	4.5 ± 1.3

4.1.1.2 Estimation de la différence angulaire entre deux projections quelconques

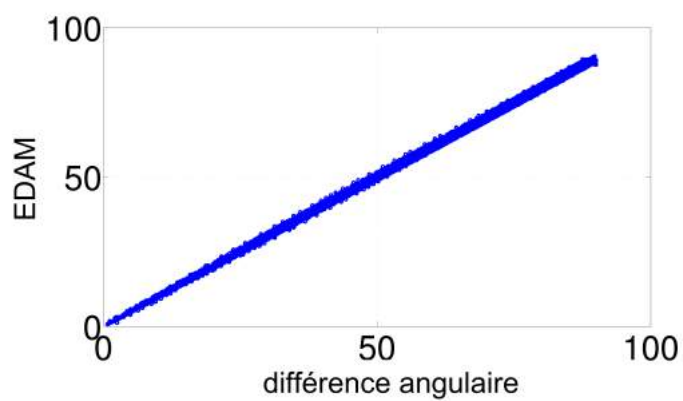
Dans la deuxième expérimentation, l'estimation de la différence angulaire entre deux projections quelconques est testée. Pour cela, 200 angles $\theta \in [-90^\circ, 90^\circ[$ sont générés aléatoirement selon une loi uniforme pour chaque image 2D. Les projections correspondantes $\mathcal{P}(\theta)$ sont ensuite calculées. Les différences angulaires entre deux projections quelconques sont estimées en utilisant l'EDAM avec l'algorithme 1, la DE et la MS sont aussi appliquées et comparées avec l'EDAM. Comme illustré sur la figure 4.4, la dispersion (resp. la linéarité) de la DE (figure 4.4a) est encore beaucoup plus élevée (resp. moins forte) que celle de la MS (figure 4.4b) et de l'EDAM (figure 4.4c). Les dispersions de la MS et



(a)



(b)



(c)

Figure 4.4: Deuxième expérimentation (cas global) : la dispersion de la DE (a), de la MS (b) et de l'EDAM (c) entre deux projections quelconques en 2D pour une image de 128^2 pixels.

de l'EDAM ne sont pas très différentes. Notons que la DE dans le cas global est calculée par l'algorithme de Dijkstra à partir des DE entre des projections voisines. Les résultats d'estimation pour différentes résolutions sont présentés dans le tableau 4.2 (cas global). On voit que les valeurs de $\bar{\varepsilon}$ de la MS et de l'EDAM sont inférieures à 1% pour toutes les résolutions.

Tableau 4.2: Deuxième expérimentation (cas global) : $\bar{\varepsilon}$ (%) de la MS et de l'EDAM en 2D pour différentes résolutions (en pixels) dans le cas sans bruit. Le test pour deux projections quelconques.

	32^2	64^2	128^2	256^2
MS	0.5 ± 0.5	0.4 ± 0.3	0.7 ± 1.8	0.3 ± 0.3
EDAM	0.7 ± 0.4	0.6 ± 0.2	0.9 ± 1.7	0.5 ± 0.2

Notons aussi que la valeur de $\bar{\varepsilon}$ dans le cas global diminue significativement par rapport au cas local. Ceci peut être expliqué par le fait que l'algorithme du plus court chemin en 2D nous permet de réduire les erreurs globales. Comme montré sur la figure 4.5, les points S_1, \dots, S_5 sont les orientations des projections $\mathcal{P}_1, \dots, \mathcal{P}_5$ distribuées sur un cercle et les arêtes relient les orientations des projections voisines. En utilisant l'algorithme du plus court chemin, l'angle $\widehat{S_1OS_5}$ peut être calculé par la somme d'angles $\widehat{S_1OS_4}$ et $\widehat{S_4OS_5}$ plutôt que la somme d'angles $\widehat{S_1OS_2}, \widehat{S_2OS_3}, \dots, \widehat{S_4OS_5}$. Ceci permet de réduire l'erreur accumulée pour le calcul global de la différence angulaire. De plus, les erreurs locales portant sur la somme peuvent aussi se compenser (erreurs négatives et positives). Le comportement de la somme d'erreurs peut être expliqué par le théorème central limite [65]. Supposons que les erreurs locales $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$ soient des variables indépendantes et distribuées selon une loi quelconque de moyen 0 et de l'écart-type σ , la somme d'erreurs locales suit une loi normale de moyen 0 et de l'écart-type $\sigma\sqrt{n}$ quand n tend vers l'infini.

Les deux premières expérimentations montrent que notre méthode et la méthode de

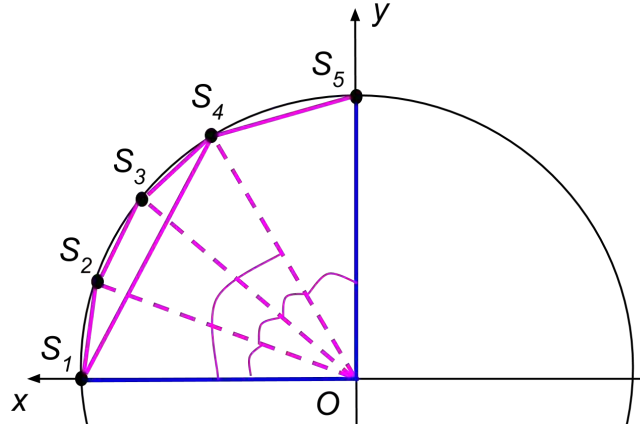


Figure 4.5: Explication du comportement des erreurs locales et globales en 2D.

Salzman ont une dispersion par rapport à l'orientation de projection (resp. linéarité par rapport à la différence angulaire) beaucoup plus petite (resp. forte) que celle de la distance euclidienne. En plus, comme l'EDAM est obtenue par une approximation de la MS, le résultat de la MS est meilleur que celui de l'EDAM dans le cas sans bruit. Néanmoins, notre approximation permet d'avoir une meilleure robustesse dans le cas bruité comme nous allons le voir dans la partie suivante.

4.1.2 Cas bruité

4.1.2.1 Estimation des moments extrêmes par le maximum de vraisemblance

La robustesse au bruit de la MS et l'EDAM est maintenant testée. Dans cette troisième expérimentation, aucune des méthodes de débruitage décrites dans la partie 3.3.3 n'est appliquée. Le bruit gaussien est ajouté aux projections avec différentes valeurs du rapport signal à bruit (RSB). Ensuite, une procédure similaire à celle utilisée dans la deuxième expérimentation est appliquée. En outre, nous testons aussi dans cette expérimentation une variante de l'EDAM dans laquelle les arêtes du graphe de voisinage G sont pondérées par la formule de Salzman 2.12 au lieu de sa linéarisation. Cette nouvelle version est nommée EDAMS pour la distinguer de la version originale. L'estimation des moments extrêmes $\hat{\mu}_2^{min}$ et $\hat{\mu}_2^{max}$ est obtenue par maximum de vraisemblance (partie 2.4.2). Pour cela, nous

supposons $\widehat{\mu}_2^{min} \in [\min \widehat{M}, \text{med } \widehat{M}]$ et $\widehat{\mu}_2^{max} \in]\text{med } \widehat{M}, \max \widehat{M}]$ selon l'observation illustrée sur la figure 2.14, où \widehat{M} est l'ensemble des moments bruités. Ensuite, les candidats pour $\widehat{\mu}_2^{min}$ et $\widehat{\mu}_2^{max}$ sont choisis selon l'équation (2.44). Notons aussi que, l'intégrale dans l'équation (2.43) est approchée par la fonction *integral()* de MATLAB.

La figure 4.6 montre les valeurs de $\bar{\varepsilon}$ de la MS, l'EDAMS et l'EDAM pour un RSB variant de 40 dB à 5 dB (a) sans (b) avec l'estimation des moments extrêmes par le maximum de vraisemblance. Des bruits plus importants seront testés dans l'expérimentation suivante.

Sur la figure 4.6a, on voit que la valeur de $\bar{\varepsilon}$ de la MS est nettement plus élevée que celles de l'EDAMS et de l'EDAM lorsque l'estimation des moments extrêmes par maximum de vraisemblance n'est pas utilisée. En particulier, la valeur de $\bar{\varepsilon}$ de la MS est beaucoup plus élevée que les autres lorsque le RSB est inférieur à 25 dB. Notons aussi que la valeur de $\bar{\varepsilon}$ de l'EDAM est plus petite que celle de l'EDAMS. Ceci montre que la linéarisation de la formule de Salzman nous donne un meilleur résultat dans le cas bruité. Dans le cas avec estimation par maximum de vraisemblance des moments extrêmes (figure 4.6b), la valeur de $\bar{\varepsilon}$ de toutes les méthodes –la MS, l'EDAMS, l'EDAM– sont plus petites que dans le cas sans estimation ($\sim 2\%$) et la dispersion de la MS est à nouveau plus élevée que celles de l'EDAM et de l'EDAMS. Encore une fois, l'EDAM est meilleure que l'EDAMS en particulier pour un RSB inférieur à 10 dB. Dans le tableau 4.3, la valeur de $\bar{\varepsilon}$ de chacune des méthodes pour différentes résolutions sont données pour un RSB de 25 dB. La valeur de $\bar{\varepsilon}$ de l'EDAM pour toutes les résolutions est la plus petite. La comparaison entre l'EDAM et l'EDAMS montre que la linéarisation de la formule de Salzman permet d'améliorer le résultat d'estimation lorsque les données sont bruitées.

4.1.3 Comparaison avec la méthode de Singer-Wu

Nous avons montré la meilleure performance de l'EDAM en 2D par rapport à la DE et à la MS. La différence angulaire peut aussi être obtenue au moyen d'une estimation des angles des projections. La méthode de Singer-Wu développée dans [58] est considérée comme une bonne méthode pour estimer les angles des projections (partie 2.5). La valeur de $\bar{\varepsilon}$ de la méthode EDAM et de la méthode de Singer-Wu en fonction du niveau de

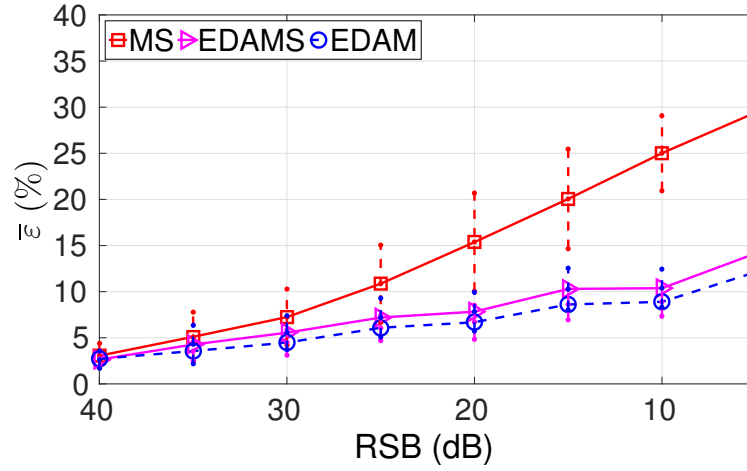
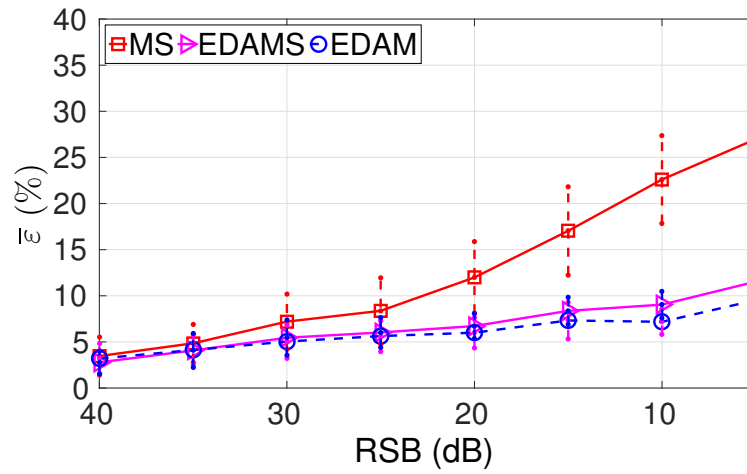
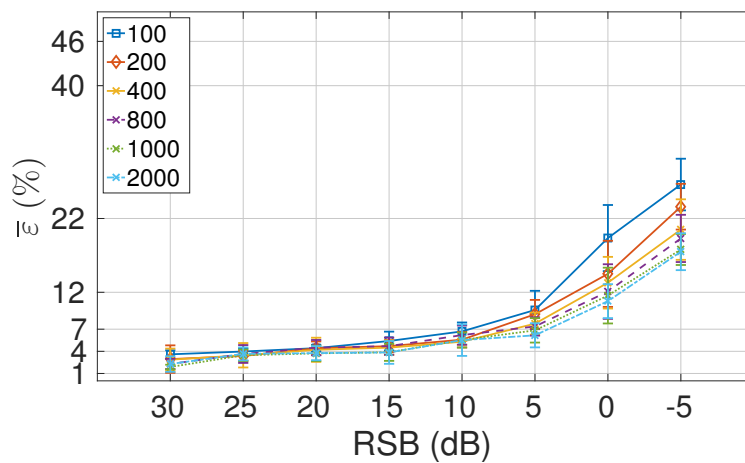
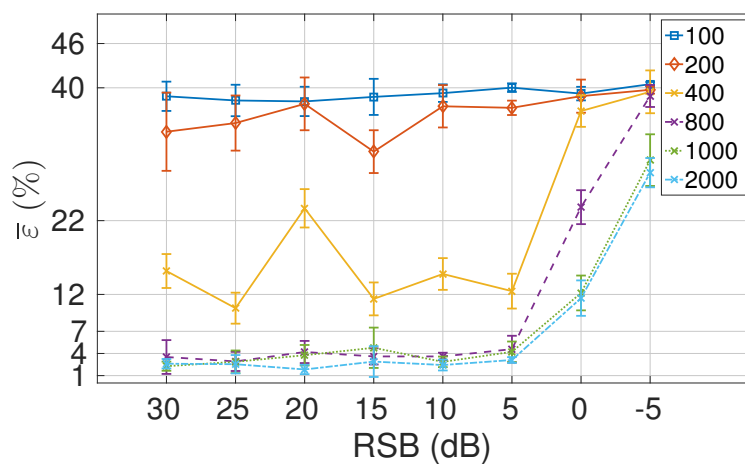

 (a) Sans l'estimation de $\hat{\mu}_2^{min}$ et $\hat{\mu}_2^{max}$

 (b) Avec l'estimation de $\hat{\mu}_2^{min}$ et $\hat{\mu}_2^{max}$

Figure 4.6: Troisième expérimentation (cas global bruité) : $\bar{\varepsilon}$ (%) de la MS, de l'EDAMS et de l'EDAM en fonction du RSB en 2D. Test avec des images de 128^2 pixels (a) sans (b) avec l'estimation par maximum de vraisemblance des moments extrêmes $\hat{\mu}_2^{min}$ et $\hat{\mu}_2^{max}$.



(a) EDAM



(b) Méthode de Wu

Figure 4.7: Troisième expérimentation (cas global bruité) : $\bar{\varepsilon}$ (%) (a) de l'EDAM (b) de la méthode de Wu [58] en fonction du RSB et du nombre de projections pour des images de 256^2 pixels.

Tableau 4.3: Troisième expérimentation (cas global bruité) : $\bar{\varepsilon}$ (%) pour la MS, l'EDAMS, l'EDAM en 2D pour différentes résolutions (en pixels). Test pour le RSB = 25 dB, les moments extrêmes μ_2^{min} et μ_2^{max} sont estimés par maximum de vraisemblance.

	32^2	64^2	128^2	256^2
MS	14.1 ± 5.6	10.2 ± 4.7	8.3 ± 3.0	7.5 ± 4.7
EDAMS	6.7 ± 1.2	6.1 ± 1.9	6.0 ± 1.7	4.9 ± 1.6
EDAM	6.4 ± 1.1	5.8 ± 1.8	5.6 ± 1.6	4.6 ± 1.5

bruit et pour différents nombres de projections est représentée sur la figure 4.7. Il est à noter que toutes les étapes de l'EDAM décrites dans la partie 3.3.3 sont maintenant appliquées. On voit que notre méthode fonctionne globalement mieux que la méthode de Singer-Wu, en particulier lorsque le nombre de projections est petit. Pour un grand nombre de projections (≥ 1000), la méthode de Singer-Wu est un peu plus robuste que l'EDAM lorsque le bruit est faible avec un RSB ≥ 5 dB. Cependant, quand le niveau du bruit augmente, la valeur de $\bar{\varepsilon}$ de la méthode de Singer-Wu augmente plus vite que celle de l'EDAM.

En conclusion, les expérimentations en 2D montrent que la méthode EDAM fonctionne mieux que la distance euclidienne, que la méthode de Salzman dans le cas de bruit et que la méthode de Wu pour un nombre de projections, ou un RSB petit. La linéarisation de la formule de Salzman (2.12) combinée avec l'estimation des moments extrêmes est utile lorsque les données sont bruitées. Ces étapes de pré-traitement nous permettent d'obtenir un bon résultat d'estimation.

4.2 Expérimentations en 3D

La méthode EDAM est maintenant testée en 3D. Un ensemble de 50 images 3D en niveau de gris de différentes résolutions — 32^3 , 64^3 , 128^3 et 256^3 voxels — est généré. Des exemples de ces images 3D et de leurs projections 2D sont montrés sur la figure 4.8 et la figure 4.9.

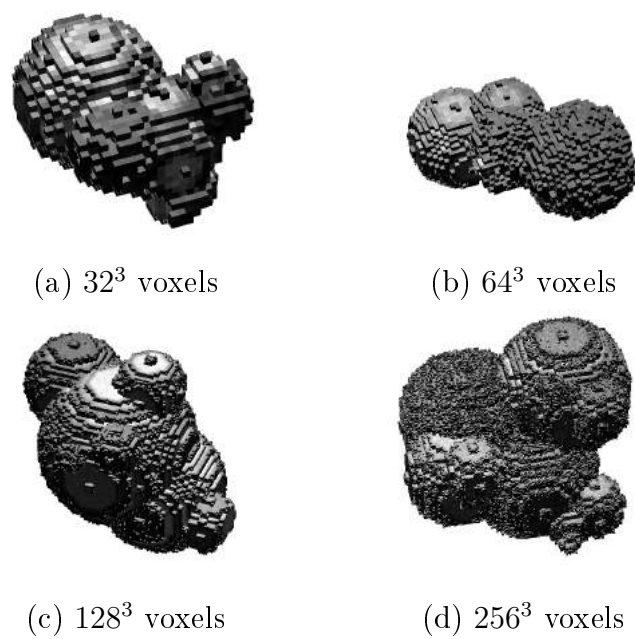


Figure 4.8: Exemples d'images 3D selon différentes résolutions.

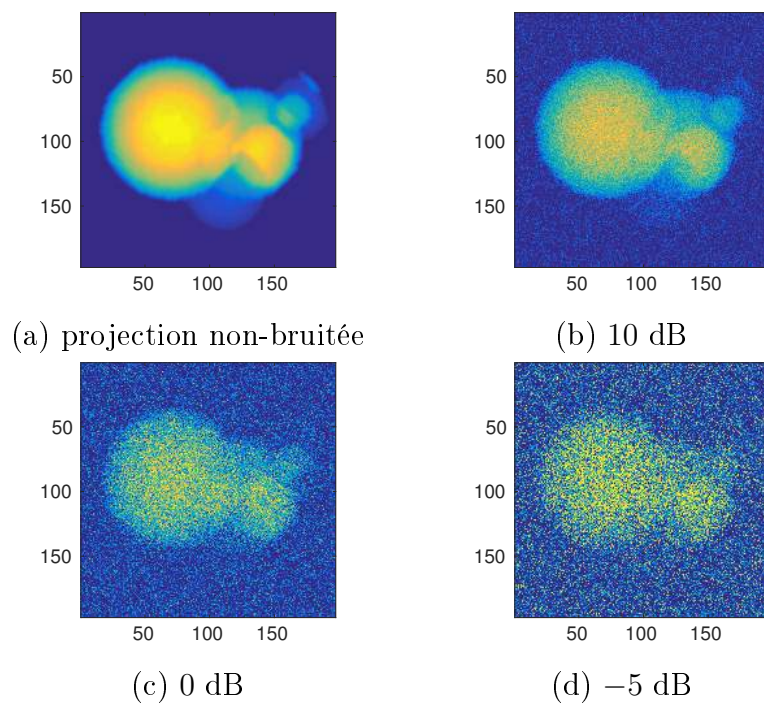


Figure 4.9: Exemples de projections 2D à différents niveaux du bruit.

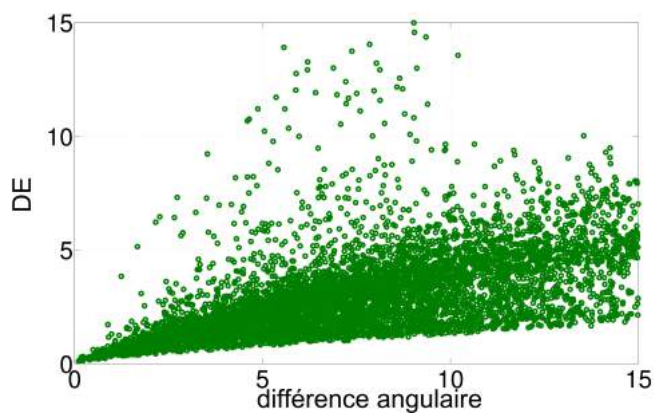
4.2.1 Cas sans bruit

Dans cette quatrième expérimentation, un ensemble de 1000 triplets (φ, θ, ψ) est généré aléatoirement et uniformément sur la demi-sphère pour chaque image 3D avec $\varphi, \theta, \psi \in [-90^\circ, 90^\circ[$. L'ensemble des projections correspondantes et leurs moments $\mu_{c,d}(\varphi, \theta, \psi)$ sont ensuite calculés. Les valeurs extrêmes de $\mu_{c,d}(\varphi, \theta, \psi)$ sont prises dans l'ensemble des moments de l'échantillon. Les voisins de chaque projection sont trouvés en utilisant le seuillage des moments de Hu définis par l'équation (3.16). Les différences angulaires entre ces projections voisines sont ensuite estimées par la formule (3.18). Enfin, les différences angulaires entre deux projections quelconques sont obtenues par l'algorithme de Dijkstra sur le graphe de voisinage. Les résultats sont comparés avec ceux fournis par la DE en terme de dispersion.

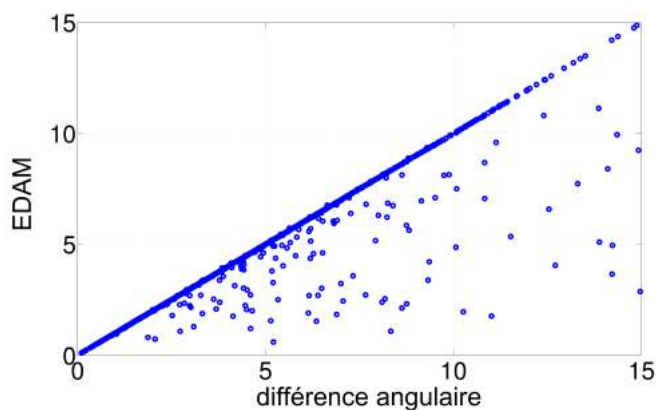
Les résultats sont regroupés sur la figure 4.10 pour deux projections voisines (cas local) et sur la figure 4.11 pour deux projections quelconques (cas global). On voit que la DE (figures 4.10a et 4.11a) varie en fonction de l'orientation beaucoup plus que l'EDAM (figures 4.10b et 4.11b) dans les deux cas. De plus, la linéarité de l'EDAM est aussi plus forte que celle de la DE. Notons aussi que les erreurs d'estimation les plus importantes de l'EDAM affichées sur la figure 4.10b sont le résultat d'estimation de deux projections dont les orientations se situent dans deux octants différents de la demi-sphère. Le nombre de cas erronés est petit avec 2,7% du nombre total de cas estimés.

Comme illustré dans le tableau 4.4, la valeur de $\bar{\varepsilon}$ de l'EDAM est inférieure à 5,5% pour le cas local et à 6,9% pour le cas global.

Notons aussi que la valeur de $\bar{\varepsilon}$ dans le cas global n'est pas inférieure à celle dans le cas local contrairement à ce qui est observé en 2D. Une des raisons est que l'algorithme du plus court chemin ne fonctionne pas bien en 3D où les orientations sont distribuées sur la sphère plutôt que le cercle comme en 2D. Comme montré sur la figure 4.12, les points S_1, \dots, S_5 sont les orientations des projections $\mathcal{P}_1, \dots, \mathcal{P}_5$ distribuées uniformément sur la sphère et les arêtes relient les orientations des projections voisines. L'algorithme du plus court chemin calcule l'angle $\widehat{S_1OS_5}$ par la somme d'angles $\widehat{S_1OS_2}, \dots, \widehat{S_4OS_5}$. Cette somme ne donne pas une bonne approximation de $\widehat{S_1OS_5}$ comme en 2D (à comparer avec

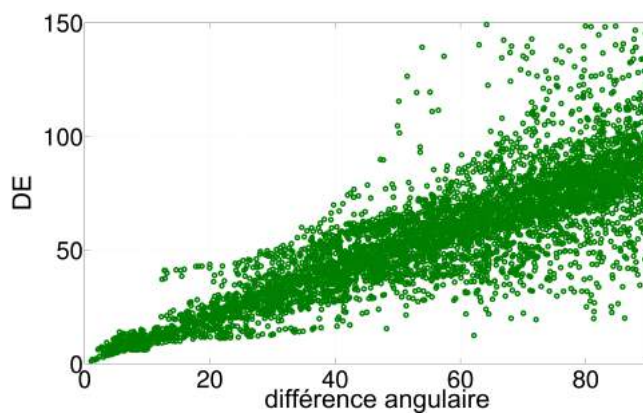


(a)

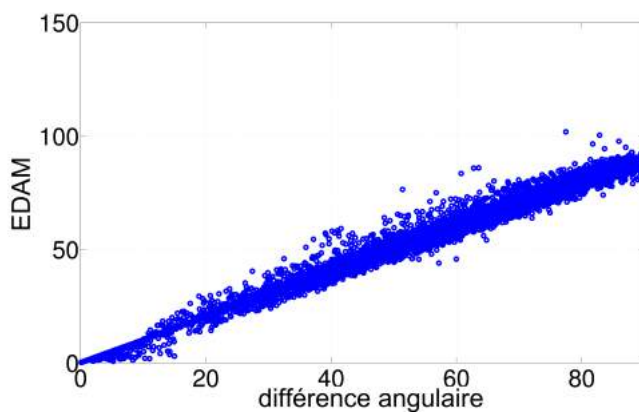


(b)

Figure 4.10: Quatrième expérimentation (cas local) : la dispersion de la différence angulaire entre deux projections voisines en 3D pour une image de 128^3 voxels, (a) la DE, (b) l'EDAM. La DE est normalisée dans $[0^\circ, 15^\circ]$.



(a)



(b)

Figure 4.11: Quatrième expérimentation (cas global) : la dispersion de la différence angulaire entre deux projections quelconques en 3D pour une image de 128^3 voxels, (a) la DE, (b) l'EDAM.

Tableau 4.4: Quatrième expérimentation : $\bar{\varepsilon}$ (%) de l'EDAM en 3D pour différentes résolutions (en voxels) dans le cas sans bruit. Le cas local est celui des paires de projections voisines. Le cas global est celui des paires de projections quelconques.

	32^3	64^3	128^3	256^3
Local	5.4 ± 2.2	4.7 ± 1.2	4.2 ± 1.3	4.0 ± 1.2
Global	6.8 ± 2.3	6.4 ± 1.5	6.1 ± 1.7	6.1 ± 1.6

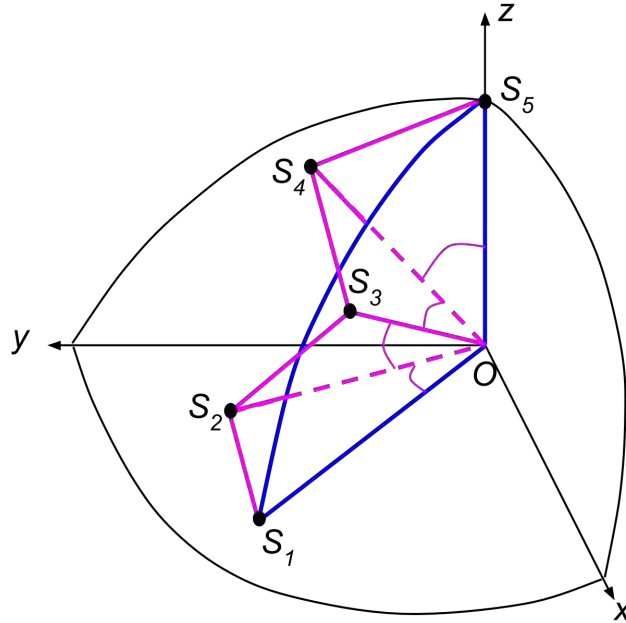


Figure 4.12: Explication du comportement des erreurs locales et globales en 3D.

la figure 4.5). De plus, il existe aussi des erreurs d'octants portant sur des calculs locaux. Le comportement des erreurs globales en 3D est donc plus compliqué que celui en 2D.

Cette quatrième expérimentation montre que la DE en 3D possède une dispersion (resp. linéarité) élevée (resp. faible) par rapport à l'orientation de projection (resp. différence angulaire entre deux projections), tandis que l'EDAM permet d'estimer la différence angulaire avec une petite dispersion (resp. forte linéarité).

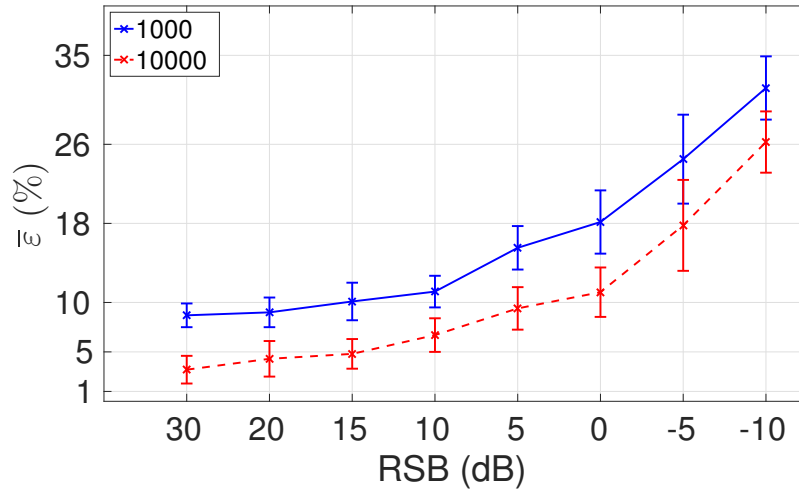


Figure 4.13: Cinquième expérimentation : $\bar{\varepsilon}$ (%) de l'EDAM en 3D pour différents niveaux du bruit et pour différents nombres de projections. Le test est réalisé avec des images de 128^3 voxels. La méthode de Singer-Wu est utilisée pour débruiter les projections.

4.2.2 Cas bruité

La robustesse au bruit de l'EDAM en 3D est ensuite évaluée dans une cinquième expérimentation. Un bruit gaussien est ajouté aux projections. Le filtre de Singer-Wu et l'indice de Jaccard sont utilisés pour débruiter les projections. Les résultats d'estimation pour différents nombres de projections et pour différents niveaux du bruit sont montrés sur la figure 4.13 pour des images de 128^3 voxels. La valeur de $\bar{\varepsilon}$ est inférieure à 10% pour un RSB supérieur à 10 dB dans le cas de 1000 projections et pour un RSB supérieur à 0 dB dans le cas de 10000 projections.

4.2.3 Comparaison avec la méthode de Singer-Zhao et la méthode de Shkolnisky-Singer

Comme en 2D, la différence angulaire en 3D peut aussi être calculée après avoir estimé les orientations des projections. En particulier, la méthode de Singer-Zhao développée

dans [63] (partie 3.4.1) donne une bonne estimation de l'orientation des projections. Selon les résultats obtenues dans [63], cette méthode peut estimer les orientations des projections très bruitées (pour un RSB ≤ -10 dB) et surpasse le résultat de l'EDAM dans le cas d'un RSB inférieur à 0 dB. Cependant, l'avantage de notre méthode est qu'elle peut être utilisée avec un petit nombre de projections, tandis que la méthode de Singer-Zhao a besoin d'un grand nombre de projections (≥ 10000) afin d'obtenir un bon résultat.

Une autre famille de méthodes d'estimation des orientations est basée sur la technique de la ligne commune [66, 67, 49, 68]. Une des méthodes donne les meilleurs résultats est la méthode de Shkolnisky-Singer [64] évoquée dans la partie 3.4.2. Cette méthode est combinée avec plusieurs techniques de débruitage qui améliorent significativement le résultat de l'estimation. Selon les résultats obtenus dans [64], la méthode de Shkolnisky-Singer peut estimer les orientations des projections pour un petit nombre de projections (≥ 10) et avec un bruit important (RSB ≤ -10 dB). Cependant, un des inconvénients des méthodes basées sur la ligne commune est le temps de calcul. Le temps de calcul de la méthode de Shkolnisky-Singer est en $O(p^3 n^2 + n^3)$, où p est la taille de la projection et n est le nombre de projections. Au contraire, le temps calcul de notre méthode est beaucoup plus rapide avec une complexité en $O(p^2 n + n^2)$. Plus précisément, la méthode EDAM calcule les moments des projections en $O(p^2 n)$, cherche les projections voisines en $O(n^2)$ et exécute l'algorithme de Dijkstra en $O(n^2)$. L'étape de pré-traitement est réalisée en $O(p^2 n + n^2)$ avec $O(p^2 n)$ pour la décomposition de l'ACP, $O(n)$ pour le filtre de Singer-Wu et $O(n^2)$ pour la construction d'une matrice des indices de Jaccard. Globalement, l'EDAM est exécutée en $O(p^2 n + n^2)$.

Tous les expérimentations dans cette partie sont réalisées sur une machine Linux équipée d'un processeur Xeon 3.20 GHz et 16 GB de RAM. Les étapes de notre méthode ne sont pas parallélisées. Le langage MATLAB est utilisé pour les expérimentations. Le temps de calculs pour tester notre méthode sur chaque image 2D ou 3D est présenté dans les tableaux 4.5 et 4.6. Il est à noter que le temps de calculs de la méthode de Shkolnisky sur une image 3D de taille 128^3 pixels avec 1000 projections est à 16277 secondes (voir [64]) qui est beaucoup plus long que celui de notre méthode avec 476 secondes.

Tableau 4.5: Temps de calculs de l'EDAM pour une image 2D pour différentes résolutions et pour différents nombres de projections.

	32²	64²	128²	256²
100	3 <i>s</i>	3 <i>s</i>	3 <i>s</i>	3 <i>s</i>
500	78 <i>s</i>	78 <i>s</i>	79 <i>s</i>	79 <i>s</i>
1000	376 <i>s</i>	377 <i>s</i>	381 <i>s</i>	394 <i>s</i>

Tableau 4.6: Temps de calculs de l'EDAM pour une image 3D pour différentes résolutions et pour différents nombres de projections.

	32³	64³	128³	256³
1000	457 <i>s</i>	460 <i>s</i>	476 <i>s</i>	510 <i>s</i>
5000	807 <i>s</i>	912 <i>s</i>	1001 <i>s</i>	1318 <i>s</i>
10000	1360 <i>s</i>	1651 <i>s</i>	2183 <i>s</i>	3429 <i>s</i>

4.3 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre la performance de la méthode EDAM en réalisant plusieurs tests sur une base d'images simulées à différentes résolutions en 2D et 3D. Les comparaisons entre l'EDAM et la distance euclidienne, la méthode de Salzman, la méthode de Singer-Wu, la méthode de Singer-Zhao et la méthode de Shkolnisky-Singer ont été effectuées. Sur les tests que nous avons faits, l'EDAM

- a une dispersion par rapport à l'orientation de projection (resp. linéarité par rapport à la différence angulaire) nettement inférieure (resp. forte) à la distance euclidienne même pour les projections voisines
- est meilleure que la méthode de Salzman dans le cas de bruit

- est meilleure que la méthode de Singer-Wu en général
- est meilleure que la méthode de Singer-Zhao sauf pour le cas où on a un grand nombre de projections très bruitées.
- est meilleure que la méthode de Shkolnisky-Singer pour le temps de calcul.

Sur les tests 2D réalisés, la linéarisation de l'équation de Salzman et l'estimation des moments extrêmes sont utiles lorsque les données sont bruitées.

Conclusion générale

Bilan

Nous avons étudié dans cette thèse les mesures de la dissimilarité entre deux projections utilisées pour la reconstruction tomographique d'un objet à partir de ses projections non-orientées. Parmi les mesures entre deux projections, la distance euclidienne est couramment utilisée pour la classification et le raffinement des projections. Cependant, nous avons montré que la dispersion de la distance euclidienne par rapport à l'orientation de la projection est grande même pour deux projections proches. Ceci peut conduire à des erreurs pour la classification ou le raffinement des projections.

Une méthode a été proposée pour l'estimation de la différence angulaire entre deux projections en 2D et 3D. Le principe de notre méthode –EDAM– est basé sur la construction d'un graphe de voisinage dont les sommets sont les projections, dont les arêtes relient des projections voisines et sont pondérées par une approximation locale de la différence angulaire. Le calcul de ces poids est basé sur les propriétés des moments de projection. La détermination des projections voisines est réalisée dans l'espace des moments de projection en utilisant un seuillage adaptatif. Les seuils sont développés en fonction du nombre de projections et de la distribution des orientations des projections. Une fois construit le graphe de voisinage, la différence angulaire entre deux projections est estimée en utilisant un algorithme du plus court chemin sur le graphe de voisinage. Des méthodes de pré-traitement des projections et du graphe de voisinage sont utilisées afin d'améliorer la

robustesse au bruit de notre méthode.

La performance de l'EDAM est testée sur des images simulées de différentes résolutions. Les tests ont montré que la dispersion de l'EDAM par rapport l'orientation de la projection est beaucoup plus petite que celle de la distance euclidienne. La robustesse au bruit de l'EDAM montre que notre méthode peut fonctionner pour un RSB jusqu'à -5 dB. l'EDAM est aussi comparée avec d'autres méthodes s'appuyant sur l'estimation des orientations telles que la méthode de Salzman basée sur le calcul exact des orientations, la méthode de Singer-Wu, la méthode de Singer-Zhao et la méthode de Shkolnisky-Singer reposant sur la décomposition spectrale afin de réduire des données de grande dimension dans une base de dimension inférieure (2 ou 3). Les tests ont montré que L'EDAM est meilleure que la méthode de Salzman dans le cas bruité, meilleure que la méthode de Singer-Wu en global, meilleure que la méthode de Singer-Zhao sauf pour un grand nombre de projections très bruitées et meilleure que la méthode de Shkolnisky-Singer pour le temps d'exécution.

Perspective

Il reste plusieurs points à améliorer dans la méthode EDAM.

Premièrement, nous devons accroître la robustesse au bruit de l'EDAM en 3D. Pour cela, la linéarisation de la formule d'estimation de la différence angulaire entre deux projections voisines, l'estimation des moments extrêmes peuvent être réalisées comme en 2D. En outre, l'extension de l'EDAM en utilisant les techniques basées sur la ligne commune est intéressante car plusieurs méthodes de débruitage et d'estimation des orientations ont été développées sur cette technique.

Deuxièmement, il faudrait comparer la robustesse de l'EDAM avec la méthode de Singer-Zhao et la méthode de Shkolnisky-Singer sur une même base d'images (en raison du temps, les tests quantitatifs n'ont pas été réalisés).

Troisièmement, il est nécessaire de tester l'EDAM sur des données réelles. Sachant que la distribution des orientations des projections peut être non-uniforme, le dévelop-

pement de l'EDAM indépendamment de la distribution des orientations est importante en pratique. De plus, nous avons supposé dans cette thèse que la projection est centrée à l'origine. Cependant, chaque projection dispose toujours une translation inconnue dans son plan projeté. L'estimation de la différence angulaire pour les projections non-alignées est aussi à étudier.

Quatrièmement, il faudrait tester l'application de l'EDAM dans les étapes de classification et de raffinement des projections durant la reconstruction de l'objet. Par exemple en 2D, l'EDAM peut être utilisée pour remplacer la distance euclidienne dans les méthodes de reconstructions [58, 4, 3]. En 3D, l'utilisation de l'EDAM au lieu de la distance euclidienne dans la méthode de Zhao peut produire une meilleure reconstruction de l'objet.

Liste des figures

1.1	a) le scanner d'IRM ; b) le principe d'acquisition des images 2D (projections) en IRM sous différentes orientations. Le volume 3D du cerveau est obtenu par la superposition des coupes [15].	12
1.2	Représentation de la transformée de Radon.	15
1.3	Exemple pour la tomographie continue : (a) la fonction $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, (b) la projection $p_\theta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$	16
1.4	Exemple pour la tomographie discrète : (a) la fonction $f : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \{0,1\}$, (b) la projection verticale $p_\theta : \mathbb{Z} \rightarrow \{0,1, \dots, 255\}$	18
1.5	a) Le dispositif en Cryo-ME ; b) la modalité d'acquisition des images projetées d'une structure complexe : un faisceau d'électrons d'une source traverse un échantillon contenant plusieurs copies d'une même structure, puis plusieurs projections de cette structure sont obtenues sur le détecteur [31].	19
1.6	a) l'identification des images projetées ; b) l'alignement et la classification des images, puis le moyennage pour augmenter le RSB [31].	22
1.7	Schéma des techniques d'analyse des particules isolées.	24
1.8	Les images obtenues par la technique RCT [43] : a) la grille d'échantillons est non-inclinée ; b) la grille d'échantillons est inclinée d'un angle $\theta = 45^\circ$	25

1.9	Le principe de la technique de RCT [43] : a) la représentation conique des projections dans la grille inclinée ; b) les projections dans l'espace de Fourier.	26
1.10	La représentation de la ligne commune entre deux projections dans l'espace de Fourier [37].	27
1.11	La recherche de ligne commune entre deux projections dans l'espace de Fourier [37].	28
1.12	Méthode d'inversion de Fourier directe : a) transformée de Fourier de la projection ; b) ensemble des projections dans l'espace de Fourier ; c) transformée de Fourier inverse.	31
1.13	Reconstruction par rétro-projections [23] : a) : image initiale ; b) trois projections ; c) nombreuse projections.	31
1.14	Reconstruction par rétro-projections filtrées [23] : a) : image initiale ; b) trois projections filtrées ; c) nombreuse projections.	32
1.15	Géométrie des méthodes algébriques : la matrice à reconstruire contient M pixels f_j ; les projections sont divisées en N rayons p_i ; les contributions des pixels f_j sur les rayons de projections sont données par une matrice pondérée W , où w_{ji} est la contribution du pixel f_j sur le rayon de projection p_i	33
1.16	Méthode itérative pour résoudre le système d'équations linéaires dans le cas de deux pixels et deux rayons.	34
2.1	En 2D, la projection \mathcal{P}_f est obtenue de deux manières alternatives : soit (a) en tournant xOy d'un angle $-\theta$ et projetant orthogonalement f sur l'axe Ox' , soit (b) en tournant f d'un angle θ et projetant orthogonalement f' sur l'axe Ox	41
2.2	a) objet 2D, b) sinogramme de l'objet : chaque colonne correspond à une projection à un angle θ spécifié, c) projection à l'angle 10° , d) projection suivant l'angle $190^\circ = 10^\circ + 180^\circ$. Ces deux projections sont symétriques. .	42

2.3	Le sinogramme pour des angles inconnus. Les colonnes du sinogramme sont permutées.	43
2.4	Moment $\mu_d(\mathcal{P}_f(\theta))$ de la projection $\mathcal{P}_f(\theta)$ en 2D, $\theta \in [-\pi, \pi]$: les cas de a), c), e) et g) sont des moments d'ordres pairs pour $d = 2, 4, 6, 8$. Les cas de b), d), f) et h) sont des moments d'ordres impairs pour $d = 1, 3, 5, 7$	45
2.5	La pente élevée de la fonction $\arcsin \sqrt{x}$ pour x proche de 0 ou 1. La courbe rouge est pour le cas sans bruit, la courbe bleue est pour le cas de bruit. . .	48
2.6	Distribution des projections de l'image sur la figure 2.2a en fonction des angles dans l'espace des moments. Les angles sont distribués uniformément.	49
2.7	Recherche des voisins de chaque projection dans l'espace de moments par les k -plus proches voisins (a,b,c) et par seuillage adaptatif (d).	51
2.8	Erreur d'estimation de la différence angulaire par les trois formules dans la définition 2.	55
2.9	Positions relatives entre μ_2^{min} , μ_2^{max} , $\tilde{\mu}_2^{min}$, $\tilde{\mu}_2^{max}$, $a(M)$ et $b(M)$	56
2.10	l'ACP pour les données de 2 dimensions : (a) les données sont analysées selon deux composantes ; (b) les données sont transformées selon ces deux composantes.	58
2.11	L'ACP du sinogramme sur la figure 2.2b : les 20 premières valeurs propres de la matrice de covariance pour différents niveaux du bruit.	59
2.12	Débruitage par le filtre de Singer-Wu pour différents niveaux du bruit. (a) sans bruit. (b), (d), (f) sinogramme bruité. (c), (e), (g) résultat débruité correspondant	62
2.13	Densité de probabilité du moment μ_2 pour différents niveaux de bruit sous l'hypothèse d'une distribution uniforme des angles de projection.	64
2.14	Positions relatives de μ_2^{min} , μ_2^{max} , $\tilde{\mu}_2^{min}$, $\tilde{\mu}_2^{max}$, $a(M)$ et $b(M)$ dans le cas bruité.	65

2.15	Débruitage du graphe de voisinage G . (a) le graphe est perturbé par du bruit, (b) après avoir appliqué le filtre de Singer-Wu et estimé les moments extrêmes, (c) après avoir utilisé l'indice de Jaccard.	67
3.1	Projections en 3D : (a) un objet de \mathbb{R}^3 , (b) – (d) trois projections de l'objet.	73
3.2	Représentation des quatre possibilités pour le vecteur d'orientation sur les quatre octants de la demi-sphère (vue de dessus) en raison des signes inconnus dans l'équation (3.12).	76
3.3	Distribution de moments de Hu en fonction des angles φ et θ	80
3.4	représentation des orientations sur la demi-sphère (vue dessus) : les quatre octants sont divisés par les bandes violettes, la zone entre des bandes rouges est la zone ambiguë.	82
3.5	La relation des lignes communes dans l'espace de Fourier [64].	85
4.1	Exemples des images 2D pour différentes résolutions.	88
4.2	Projections 1D avec différents niveaux de bruit de l'image présentée sur la figure 4.1 à la résolution 128^2 pixels.	89
4.3	Première expérimentation (cas local) : dispersion de la DE (a), de la MS (b) et de l'EDAM (c) entre deux projections voisines en 2D pour image de 128^2 pixels. La DE est normalisée dans $[0^\circ, 2^\circ]$	91
4.4	Deuxième expérimentation (cas global) : la dispersion de la DE (a), de la MS (b) et de l'EDAM (c) entre deux projections quelconques en 2D pour une image de 128^2 pixels.	93
4.5	Explication du comportement des erreurs locales et globales en 2D.	95
4.6	Troisième expérimentation (cas global bruité) : $\bar{\varepsilon}$ (%) de la MS, de l'EDAMS et de l'EDAM en fonction du RSB en 2D. Test avec des images de 128^2 pixels (a) sans (b) avec l'estimation par maximum de vraisemblance des moments extrêmes $\hat{\mu}_2^{min}$ et $\hat{\mu}_2^{max}$	97

4.7	Troisième expérimentation (cas global bruité) : $\bar{\varepsilon}$ (%) (a) de l'EDAM (b) de la méthode de Wu [58] en fonction du RSB et du nombre de projections pour des images de 256^2 pixels.	98
4.8	Exemples d'images 3D selon différentes résolutions.	100
4.9	Exemples de projections 2D à différents niveaux du bruit.	100
4.10	Quatrième expérimentation (cas local) : la dispersion de la différence angulaire entre deux projections voisines en 3D pour une image de 128^3 voxels, (a) la DE, (b) l'EDAM. La DE est normalisée dans $[0^\circ, 15^\circ]$	102
4.11	Quatrième expérimentation (cas global) : la dispersion de la différence angulaire entre deux projections quelconques en 3D pour une image de 128^3 voxels, (a) la DE, (b) l'EDAM.	103
4.12	Explication du comportement des erreurs locales et globales en 3D.	104
4.13	Cinquième expérimentation : $\bar{\varepsilon}$ (%) de l'EDAM en 3D pour différents niveaux du bruit et pour différents nombres de projections. Le test est réalisé avec des images de 128^3 voxels. La méthode de Singer-Wu est utilisée pour débruiter les projections.	105

Liste des tableaux

4.1	Première expérimentation (cas local) : $\bar{\varepsilon}$ (%) de la MS et de l'EDAM en 2D pour différentes résolutions (en pixels) dans le cas sans bruit. Test pour deux projections voisines.	92
4.2	Deuxième expérimentation (cas global) : $\bar{\varepsilon}$ (%) de la MS et de l'EDAM en 2D pour différentes résolutions (en pixels) dans le cas sans bruit. Le test pour deux projections quelconques.	94
4.3	Troisième expérimentation (cas global bruité) : $\bar{\varepsilon}$ (%) pour la MS, l'EDAMS, l'EDAM en 2D pour différentes résolutions (en pixels). Test pour le RSB = 25 dB, les moments extrêmes μ_2^{min} et μ_2^{max} sont estimés par maximum de vraisemblance.	99
4.4	Quatrième expérimentation : $\bar{\varepsilon}$ (%) de l'EDAM en 3D pour différentes résolutions (en voxels) dans le cas sans bruit. Le cas local est celui des paires de projections voisines. Le cas global est celui des paires de projections quelconques.	104
4.5	Temps de calculs de l'EDAM pour une image 2D pour différentes résolutions et pour différents nombres de projections.	107
4.6	Temps de calculs de l'EDAM pour une image 3D pour différentes résolutions et pour différents nombres de projections.	107

Annexe **A**

Démonstrations en 2D

A.1 Estimation de l'angle par la méthode de Salzman

On rappelle le moment d'ordre (2,0) de la fonction f_θ

$$\mu_{2,0}(f_\theta) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} x^2 y^0 f_\theta(x,y) dx dy. \quad (\text{A.1})$$

En changeant les variables $(x,y)^T = R_{-\theta}(x,y)^T = (\cos \theta x + \sin \theta y, -\sin \theta x + \cos \theta y)^T$, on obtient

$$\mu_{2,0}(f_\theta) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} (\cos \theta x + \sin \theta y)^2 f(x,y) dx dy \quad (\text{A.2})$$

$$= \cos^2 \theta \mu_{2,0}(f) + \sin^2 \theta \mu_{0,2}(f) + 2 \sin \theta \cos \theta \mu_{1,1}(f). \quad (\text{A.3})$$

Si f est centrée à l'origine, on a $\mu_{1,1}(f) = 0$. De plus, sans perte de généralité, on peut choisir le repère de référence tel que

$$\mu_{2,0}(f) = \max_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_{2,0}(f_\theta). \quad (\text{A.4})$$

On déduit de la propriété 1

$$\mu_{2,0}(f) = \max_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_{2,0}(f_\theta) = \max_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_2(\mathcal{P}_f(\theta)). \quad (\text{A.5})$$

Comme la somme des $\mu_{2,0}(f_\theta)$ et $\mu_{0,2}(f_\theta)$ est une constante pour tout θ (propriété 2). Alors,

$$\mu_{0,2}(f) = \min_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_{2,0}(f_\theta) = \min_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_2(\mathcal{P}_f(\theta)). \quad (\text{A.6})$$

On pose

$$\mu_{f,2}^{max} = \max_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_2(\mathcal{P}_f(\theta)), \quad \mu_{f,2}^{min} = \min_{\theta \in \mathbb{R}} \mu_2(\mathcal{P}_f(\theta)). \quad (\text{A.7})$$

L'équation (A.3) devient

$$\mu_{2,0}(f_\theta) = \mu_2(\mathcal{P}_f(\theta)) = \cos^2 \theta \mu_{f,2}^{max} + \sin^2 \theta \mu_{f,2}^{min} \quad (\text{A.8})$$

$$= \mu_{f,2}^{max} - (\mu_{f,2}^{max} - \mu_{f,2}^{min}) \sin^2 \theta. \quad (\text{A.9})$$

A.2 Rappel de l'inégalité de Bernstein

Théorème 3 (Inégalité de Bernstein [69]). Soit $f(x) = \sum_{i=0}^n a_i \cos(ix) + b_i \sin(ix)$, un polynôme trigonométrique de degré n . On a

$$\max_{x \in \mathbb{R}} \left\{ \left| \frac{df}{dx} \right| \right\} \leq n \max_{x \in \mathbb{R}} \{|f(x)|\}. \quad (\text{A.10})$$

A.3 Démonstration de la proposition 1

La proposition 1 est basée sur le lemme 1 qui donne, pour une probabilité donnée, la distance maximale entre deux angles successifs à partir d'un ensemble d'angles distribués uniformément sur le cercle $\mathbb{R}/\pi\mathbb{Z}$.

Lemme 1. Soient $\theta_1, \dots, \theta_i, \dots, \theta_n$ des variables indépendantes et distribuées uniformément dans $[-\pi/2, \pi/2)$. Soit¹ $Z_{i,j} = \min(|\theta_i - \theta_j|, \pi - |\theta_i - \theta_j|)$. Alors, pour $i \in [1, n]$,

$$\text{Prob} \left(\min_{j \neq i} Z_{i,j} \leq \delta \right) > p \iff \delta \geq \frac{\pi}{2} \left(1 - (1-p)^{\frac{1}{n-1}} \right). \quad (\text{A.11})$$

1. La variable $Z_{i,j}$ est la distance entre les variables θ_i et θ_j sur le cercle $\mathbb{R}/\pi\mathbb{Z}$.

Démonstration. Soient $(X_i)_{i=1}^n$ des variables indépendantes et distribuées uniformément dans $[0,1]$. On pose $Y_{i,j} = |X_i - X_j|$ pour toute couple (i,j) , $i \neq j$. Soit $p \in (0,1)$. Nous voulons trouver un nombre réel positif δ le plus petit possible tel que, pour chaque $i \in [1,n]$, $\exists j \neq i$, $\min(Y_{i,j,1} - Y_{i,j}) \leq \delta$ avec une probabilité supérieure ou égale p .

Notons que pour un $i \in [1,n]$ fixé, les variables aléatoires $Y_{i,j}$, $1 \leq j \leq n$, $j \neq i$, sont indépendantes. En outre, nous rappelons que la différence absolue entre deux variables uniformes a une distribution triangulaire dont la fonction de répartition est $x \mapsto 1 - (1 - x)^2$, pour $x \in [0,1]$.

Pour chaque $i \in [1,n]$, on a

$$\begin{aligned}
\text{Prob} \left(\min_{j \neq i} \left(\min(Y_{i,j,1} - Y_{i,j}) \right) \leq \delta \right) &> p \\
\iff \prod_{j \neq i} \text{Prob} \left(\min(Y_{i,j,1} - Y_{i,j}) > \delta \right) &\leq 1 - p \\
\iff \prod_{j \neq i} \text{Prob}(\delta < Y_{i,j} < 1 - \delta) &\leq 1 - p \tag{A.12} \\
\iff (1 - \delta)^2 - \delta^2 &\leq (1 - p)^{\frac{1}{n-1}} \\
\iff \delta \geq \frac{1}{2} \left(1 - (1 - p)^{\frac{1}{n-1}} \right). &
\end{aligned}$$

On conclut en prenant $X_i = 1/\pi(\theta_i + \pi/2)$. □

Démonstration de la prop. 1. On obtient, à partir du théorème des accroissements finis et de l'inégalité de Bernstein, pour tous θ, θ' :

$$\left| \frac{|\mu_d(\theta)| - |\mu_d(\theta')|}{\theta - \theta'} \right| \leq \max_{\theta \in \mathbb{R}} \left\{ \left| \frac{d\mu_d}{d\theta} \right| \right\} \leq d \max_{\theta \in \mathbb{R}} \{ |\mu_d(\theta)| \}. \tag{A.13}$$

On déduit à partir du lemme 1 et l'équation (A.13) la formule

$$\varepsilon_d = \frac{\pi}{2} \left(1 - (1 - p)^{\frac{1}{n-1}} \right) \times d \max_{\theta \in \mathbb{R}} \{ |\mu_d(\theta)| \} \tag{A.14}$$

qui assure que, pour tout angle θ , on peut trouver avec une probabilité supérieure à p au moins un moment $|\mu_d(\theta')|$, $\theta' \neq \theta$, dans l'intervalle $|\mu_d(\theta)| \pm \varepsilon_d$. □

A.4 Démonstration de la proposition 3

Démonstration. Soient $\Pi = \{\theta_1, \dots, \theta_n\}$ où $\theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_n$ et $M = \{\mu_2(\theta) \mid \theta \in \Pi\}$. On pose

$$\begin{aligned}\Delta_{1,n} &= \max_{\mu \in M} \min_{\mu' \neq \mu} |\mu - \mu'|, \\ \Delta_{2,n} &= \max\{\mu_2^{max} - \tilde{\mu}_2^{max}, \tilde{\mu}_2^{min} - \mu_2^{min}\} \quad \text{et} \\ \Delta_{3,n} &= \max\{\theta_{i+1} - \theta_i \mid 0 \leq i < n\} \quad \text{où } \theta_0 = \theta_n.\end{aligned}\tag{A.15}$$

Notons que

$$\Delta_{1,n} \leq \Delta_{3,n} \max_{\theta \in \mathbb{R}} \left| \frac{d\mu_2}{d\theta} \right|.\tag{A.16}$$

(c'est à dire $\Delta_{1,n} = O(\Delta_{3,n})$). En effet,

$$\Delta_{1,n} = \min_{\mu' \in M \text{ et } \mu' \neq \mu_2(\theta_k)} |\mu_2(\theta_k) - \mu'| \tag{A.17}$$

$$= |\mu_2(\theta_k) - \mu_2(\theta_l)| \tag{A.18}$$

pour certains $\theta_k, \theta_l \in \Pi$.

Il y a donc deux cas :

- $k < l$ (on peut supposer que $\mu_2(\theta_k) \neq \mu_2(\theta_{k+1})$ car si $\mu_2(\theta_k) = \mu_2(\theta_{k+1})$, puis on prend $k+1$ au lieu de k), puis

$$|\mu_2(\theta_k) - \mu_2(\theta_l)| \leq |\mu_2(\theta_k) - \mu_2(\theta_{k+1})| \tag{A.19}$$

$$< (\theta_{k+1} - \theta_k) \max_{\theta \in \mathbb{R}} \left| \frac{d\mu_2}{d\theta} \right|.\tag{A.20}$$

- le cas où $l < k$ est montré de façon symétrique

On obtient donc, pour tous les cas, $\Delta_{1,n} \leq \Delta_{3,n} \max_{\theta \in \mathbb{R}} \left| \frac{d\mu_2}{d\theta} \right|$.

En outre, selon la proposition 2, $\Delta_{2,n} = O(\Delta_{3,n}^2)$.

On a aussi de l'hypothèse,

$$C\Delta_{1,n}^\alpha \leq \tilde{\mu}_2^{max} - b(M), \quad a(M) - \tilde{\mu}_2^{min} \leq D\Delta_{1,n}^\alpha, \tag{A.21}$$

pour certains $C, D > 0$ et $0 < \alpha < 2/3$.

Ensuite, comme $\mu_2^{max} - \mu_2^{min} = (\mu_2^{max} - \tilde{\mu}_2^{max}) + (\tilde{\mu}_2^{max} - b(M)) + b(M) - a(M) + (a(M) - \tilde{\mu}_2^{min}) + (\tilde{\mu}_2^{min} - \mu_2^{min})$, on déduit

$$\begin{aligned} b(M) - a(M) &\geq \mu_2^{max} - \mu_2^{min} - 2\Delta_{2,n} - 2D\Delta_{1,n}^\alpha \\ &\geq \mu_2^{max} - \mu_2^{min} - O(\Delta_{3,n}^2) - O(\Delta_{3,n}^\alpha). \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

En supposant que $\Delta_{3,n} \rightarrow 0$ pour $n \rightarrow 0$ et n suffisamment grand, on peut affirmer qu'il existe une borne inférieure strictement positive pour $b(M) - a(M)$.

Le calcul ci-dessous suppose que $\Delta_{1,n}, \Delta_{2,n}, \Delta_{3,n}$ sont petits (inférieur à 1). Pour cela, on peut simplement prendre n suffisamment grand.

Soient θ_i, θ_j dans Θ tels que $|\theta_i - \theta_j| = O(\Delta_{3,n})$. Tout d'abord, on considère le cas dans lequel θ_i ou θ_j est entre $a(M)$ et $b(M)$.

On définit $\xi \in \{i, j\}$ tel que $|\mu_2(\theta_\xi) - \frac{\tilde{\mu}_2^{max} + \tilde{\mu}_2^{min}}{2}|$ est le minimum (ainsi, $\theta_\xi \in [a(M), b(M)]$).

On obtient de la série de Taylor de μ_2 en θ_ξ

$$\theta_i - \theta_j = \left(\mu_2(\theta_i) - \mu_2(\theta_j) + O(|\theta_i - \theta_j|^2) \right) \left(\frac{d\mu_2}{d\theta}(\theta_\xi) \right)^{-1}. \quad (\text{A.23})$$

On déduit de l'équation (2.12)

$$\left| \frac{d\mu_2}{d\theta}(\theta_\xi) \right| = 2(\mu_2^{max} - \mu_2^{min}) |\sin(\theta_\xi)| \cos(\theta_\xi) = 2\sqrt{f(\mu_2(\theta_\xi))}, \quad (\text{A.24})$$

où $f(x) = (\mu_2^{max} - x)(x - \mu_2^{min})$. Posons aussi $\tilde{f}(x) = (\tilde{\mu}_2^{max} - x)(x - \tilde{\mu}_2^{min})$. On obtient

$$f(\mu_2(\theta_\xi)) = \tilde{f}(\mu_2(\theta_\xi)) + O(\Delta_{2,n}) \quad (\text{A.25})$$

et, comme $\theta_\xi \in [a(M), b(M)]$,

$$\tilde{f}(\mu_2(\theta_\xi)) \geq \min(\tilde{f}(a(M)), \tilde{f}(b(M))) \geq k(b(M) - a(M))\Delta_{1,n}^\alpha. \quad (\text{A.26})$$

On en déduit

$$\left| \frac{d\mu_2}{d\theta} \right|^{-1} = \frac{1}{2} (\tilde{f}(\mu_2(\theta_\xi)))^{-1/2} + O(\Delta_{2,n} \Delta_{1,n}^{-3\alpha/2}), \quad (\text{A.27})$$

où la constante dans le grand O dépend de f et k .

On déduit des équations (A.23) et (A.27)

$$\begin{aligned}
\frac{|\mu_2(\theta_i) - \mu_2(\theta_j)|}{2\sqrt{\tilde{f}(\mu_2(\theta_\xi))}} &= |\theta_i - \theta_j| + O(\Delta_{2,n} \Delta_{1,n}^{-3\alpha/2}) + O(\Delta_{3,n}^2 \Delta_{1,n}^{-\alpha/2}) \\
&= |\theta_i - \theta_j| + O(\Delta_{3,n}^2 \Delta_{1,n}^{-3\alpha/2}) \\
&= |\theta_i - \theta_j| + O(\Delta_{3,n}^{2-3\alpha/2}).
\end{aligned} \tag{A.28}$$

Nous rappelons que $\alpha < 2/3$, alors $2 - 3\alpha/2 > 1$ et on a fini.

Ensuite, nous développons la formule d'estimation de $|\theta|$ dans le cas de $\mu_2(\theta) > b(M)$ (le cas $\mu_2(\theta) < a(M)$ est similaire). On obtient de l'équation (2.12),

$$\sqrt{\frac{\mu_2^{max} - \mu_2(\theta)}{\mu_2^{max} - \mu_2^{min}}} = |\sin(\theta)|. \tag{A.29}$$

Alors,

$$\left| \sqrt{\frac{\mu_2^{max} - \mu_2(\theta_i)}{\mu_2^{max} - \mu_2^{min}}} - \sqrt{\frac{\mu_2^{max} - \mu_2(\theta_j)}{\mu_2^{max} - \mu_2^{min}}} \right| = \left| |\sin(\theta_i)| - |\sin(\theta_j)| \right|. \tag{A.30}$$

Comme $||a| - |b|| \leq |a - b|$ pour tous a, b , on déduit de l'équation (A.30) que

$$\begin{aligned}
\left| \sqrt{\frac{\mu_2^{max} - \mu_2(\theta_i)}{\mu_2^{max} - \mu_2^{min}}} - \sqrt{\frac{\mu_2^{max} - \mu_2(\theta_j)}{\mu_2^{max} - \mu_2^{min}}} \right| \\
\leq |\sin(\theta_i) - \sin(\theta_j)| \leq \left| 2 \sin \frac{\theta_i - \theta_j}{2} \right| \leq |\theta_i - \theta_j|.
\end{aligned} \tag{A.31}$$

Comme on suppose $|\theta_i - \theta_j| \in O(\Delta_{3,n})$, on a prouvé le deuxième résultat de la proposition 3. □

Démonstrations en 3D

B.1 Démonstration du corollaire 2

Démonstration. L'équation (3.8) est ré-écrite :

$$\begin{pmatrix} \mu_{2,0,0}(f_s) - \lambda_j & 0 & \mu_{1,0,1}(f_s) \\ 0 & \mu_{0,2,0}(f_s) - \lambda_j & \mu_{0,1,1}(f_s) \\ \mu_{1,0,1}(f_s) & \mu_{0,1,1}(f_s) & \mu_{0,0,2}(f_s) - \lambda_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{1j} \\ R_{2j} \\ R_{3j} \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{B.1})$$

où R_{ij} est un élément de la matrice R_s^{-1} et $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (\mu_{2,0,0}(f_{s_0}), \mu_{0,2,0}(f_{s_0}), \mu_{0,0,2}(f_{s_0}))$ sont les valeurs propres de la matrice d'inertie $T_f(s)$, $1 \leq i, j \leq 3$ puis

$$\begin{cases} (\mu_{2,0,0}(f_s) - \lambda_j)R_{1j} + \mu_{1,0,1}(f_s)R_{3j} = 0 \\ (\mu_{0,2,0}(f_s) - \lambda_j)R_{2j} + \mu_{0,1,1}(f_s)R_{3j} = 0 \\ \mu_{1,0,1}(f_s)R_{1j} + \mu_{0,1,1}(f_s)R_{2j} + (\mu_{0,0,2}(f_s) - \lambda_j)R_{3j} = 0 \end{cases} . \quad (\text{B.2})$$

Étant donné que l'orientation $v_{\mathcal{P}}$ de la projection \mathcal{P} correspond à la troisième ligne de la matrice de rotation R_s^{-1} , noté $v_{\mathcal{P}} = (v_{\mathcal{P}}^1, v_{\mathcal{P}}^2, v_{\mathcal{P}}^3)^T$ et on a aussi $R_{3j} = v_{\mathcal{P}}^j$, alors l'équation (B.2) devient

$$\begin{cases} R_{1j} = \frac{-\mu_{1,0,1}(f_s)}{\mu_{2,0,0}(f_s) - \lambda_j} v_{\mathcal{P}}^j \\ R_{2j} = \frac{-\mu_{0,1,1}(f_s)}{\mu_{0,2,0}(f_s) - \lambda_j} v_{\mathcal{P}}^j \\ R_{3j} = v_{\mathcal{P}}^j \end{cases} . \quad (\text{B.3})$$

Sachant que $R_{1j}^2 + R_{2j}^2 + R_{3j}^2 = 1$, on obtient à partir de l'équation (B.3)

$$\left(\frac{\mu_{1,0,1}^2(f_s)}{(\mu_{2,0,0}(f_s) - \lambda_j)^2} + \frac{\mu_{0,1,1}^2(f_s)}{(\mu_{0,2,0}(f_s) - \lambda_j)^2} + 1 \right) (v_{\mathcal{P}}^j)^2 = 1. \quad (\text{B.4})$$

De plus, le théorème 2 donne

- $\mu_{2,0,0}(f_s) = \mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s))$ et $\mu_{0,2,0}(f_s) = \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s))$
- $\mu_{1,0,1}(f_s) = \pm \left(\frac{(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu^{max})(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu^{med})(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu^{min})}{\mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s))} \right)^{1/2}$
- $\mu_{0,1,1}(f_s) = \pm \left(\frac{(\mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu^{max})(\mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu^{med})(\mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu^{min})}{\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)) - \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s))} \right)^{1/2}$
- $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = (\mu^{max}, \mu^{med}, \mu^{min})$

et

- $\mu^{max} = \max_{s \in \mathbb{R}^3} \max(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)))$
- $\mu^{med} = \max_{s \in \mathbb{R}^3} \min(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s))) = \min_{s \in \mathbb{R}^3} \max(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)))$
- $\mu^{min} = \min_{s \in \mathbb{R}^3} \min(\mu_{2,0}(\mathcal{P}_f(s)), \mu_{0,2}(\mathcal{P}_f(s)))$.

Alors, on résout l'équation (B.4) pour obtenir $v_{\mathcal{P}}^1, v_{\mathcal{P}}^2$ et $v_{\mathcal{P}}^3$. □

B.2 Démonstration de la proposition 4

Démonstration. En rappelant la formule du moment de projection en 3D :

$$\mu_{c,d}(\varphi, \theta, \psi) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} x^c y^d \mathcal{P}_f(\varphi, \theta, \psi)(x, y) dx dy. \quad (\text{B.5})$$

Soit $R_{(\varphi, \theta, \psi)} = (r_{ji})_{1 \leq i, j \leq 3}$. L'équation (B.5) est ré-écrite par

$$\mu_{c,d}(\varphi, \theta, \psi) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \alpha_1^c \alpha_2^d g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) d\alpha_1 d\alpha_2 d\alpha_3, \quad (\text{B.6})$$

où $g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = f \left(\sum_{j=1}^3 r_{1j} \alpha_j, \sum_{j=1}^3 r_{2j} \alpha_j, \sum_{j=1}^3 r_{3j} \alpha_j \right)$. En changeant les variables

$$\beta_i = \sum_{j=1}^3 r_{ij} \alpha_j \quad (1 \leq i \leq 3), \quad (\text{B.7})$$

puis en inversant (B.7) par

$$\alpha_j = \sum_{i=1}^3 r_{ij} \beta_i \quad (1 \leq j \leq 3), \quad (\text{B.8})$$

on obtient

$$\mu_{c,d}(\varphi, \theta, \psi) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \left(\sum_{i=1}^3 r_{i1} \beta_i \right)^c \left(\sum_{i=1}^3 r_{i2} \beta_i \right)^d f(\beta_1, \beta_2, \beta_3) d\beta_1 d\beta_2 d\beta_3. \quad (\text{B.9})$$

En utilisant la formule du trinôme de Newton et la notation des indices multiples avec $r_j = (r_{1j}, r_{2j}, r_{3j})$ et $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$, on obtient pour $j \in \{1, 2\}$ et n :

$$\left(\sum_{i=1}^3 r_{ij} \beta_i \right)^n = \sum_{|k|=n} \binom{n}{k} r_j^k \beta^{n-k}. \quad (\text{B.10})$$

L'équation (B.9) est ensuite ré-écrite sous la forme

$$\begin{aligned} \mu_{c,d}(\varphi, \theta, \psi) &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \sum_{|k|=c} \sum_{|l|=d} \binom{c}{k} \binom{d}{l} r_1^k r_2^l \beta^{n-(k+l)} f(\beta) d\beta \\ &= \sum_{|k|=c} \sum_{|l|=d} \binom{c}{k} \binom{d}{l} r_1^k r_2^l \mu_{f, n-(k+l)}, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

où $\mu_{f, n-(k+l)}$ est le moment de f à l'ordre $n - (k + l)$.

Comme les coefficients r_{ij} sont des polynômes trigonométriques, on a fini. \square

B.3 Démonstration de la proposition 5

Démonstration. On suppose que la distribution des orientations de projections est uniforme sur la sphère. On détermine d'abord la distribution de φ et $\theta \in [-\pi/2, \pi/2)$. La surface élémentaire de la sphère est

$$dS = d\theta \cos \theta d\varphi. \quad (\text{B.12})$$

Elle doit être constante afin d'obtenir une distribution uniforme sur la sphère. Cependant, dS dans (B.12) est une fonction de $\cos \theta$ et n'est pas constant si φ et θ sont distribués uniformément dans $[-\pi/2, \pi/2]$. Pour cela, φ et θ peuvent être générés comme suit :

$$\varphi = \pi u - \pi/2, \quad \theta = \arcsin(2v - 1), \quad (\text{B.13})$$

où u, v sont distribués uniformément dans $[0, 1]$. Alors, dS est uniforme :

$$dS = d(\sin \theta) d\varphi = 2\pi dv du. \quad (\text{B.14})$$

Maintenant, pour la simplification, on écrit \mathcal{M} au lieu de \mathcal{M}^h , où $h \in \{1, \dots, 7\}$, car les étapes suivantes sont similaires pour tous les moments de Hu. Soit un intervalle fermé K de $[-\pi/2, \pi/2]^2$ et deux moments de Hu $\mathcal{M}(\varphi, \theta)$ et $\mathcal{M}(\varphi', \theta')$ où (φ, θ) et (φ', θ') sont dans K . On a

$$|\mathcal{M}(\varphi', \theta') - \mathcal{M}(\varphi, \theta)| \leq \max_{(\varphi, \theta) \in K} \left(\max \left(\left| \frac{d\mathcal{M}}{d\varphi} \right|, \left| \frac{d\mathcal{M}}{d\theta} \right| \right) \right) (|\delta_\varphi| + |\delta_\theta|), \quad (\text{B.15})$$

où $\delta_\varphi = \varphi' - \varphi$ et $\delta_\theta = \theta' - \theta$.

Soient u, v tels que $\varphi = \pi u - \pi/2$, $\theta = \arcsin(2v - 1)$ et soit δ_u, δ_v tels que $\varphi + \delta_\varphi = \pi(u + \delta_u) - \pi/2$, $\theta + \delta_\theta = \arcsin(2(v + \delta_v) - 1)$.

Alors, $|\delta_\varphi| = \pi |\delta_u|$ et, en observant la pente de la courbe sinus,

$$|\delta_v| = \frac{1}{2} |\sin(\theta + \delta_\theta) - \sin(\theta)| \geq \frac{1}{2} (\sin(-\pi/2 + \delta_\theta) - \sin(-\pi/2)) = \sin^2(\delta_\theta/2) \geq \frac{1}{\pi^2} |\delta_\theta|^2. \quad (\text{B.16})$$

On en déduit

$$|\mathcal{M}(\varphi', \theta') - \mathcal{M}(\varphi, \theta)| \leq \pi \max_{(\varphi, \theta) \in K} \left(\max \left(\left| \frac{d\mathcal{M}}{d\varphi} \right|, \left| \frac{d\mathcal{M}}{d\theta} \right| \right) \right) (|\delta_u| + \sqrt{|\delta_v|}). \quad (\text{B.17})$$

Alors,

$$\text{Prob}(|\mathcal{M}(\varphi', \theta') - \mathcal{M}(\varphi, \theta)| < \varepsilon) \geq \text{Prob}(|\delta_u| + h(|\delta_v|) < \delta), \quad (\text{B.18})$$

où $h(x) = \sqrt{x}$ et $\delta = \varepsilon / \left(\pi \max_{(\varphi, \theta) \in K} \left(\max \left(\left| \frac{d\mathcal{M}}{d\varphi} \right|, \left| \frac{d\mathcal{M}}{d\theta} \right| \right) \right) \right)$.

Maintenant, étant données $2n$ variables indépendantes et aléatoires $(U_i, V_i)_{i=1}^n$, qui sont

distribuées uniformément dans $[0,1]$ et un nombre réel $p \in (0,1)$, nous voulons trouver un nombre réel positif δ le plus petit possible tel que, pour chaque $i \in [1,n]$, $\exists j \neq i, |U_i - U_j| + h(|V_i - V_j|) \leq \delta$ avec une probabilité supérieure ou égale à p . Nous rappelons que la différence absolue entre deux variables uniformes a une distribution triangulaire dont la fonction de densité est $g : x \mapsto 2(1-x)$, for $x \in [0,1]$. Alors

$$\begin{aligned}
& \text{Prob} \left(\min_{j \neq i} (|U_i - U_j| + h(|V_i - V_j|)) \leq \delta \right) \geq p \\
& \iff \prod_{j \neq i} \text{Prob}(|U_i - U_j| + h(|V_i - V_j|) > \delta) < 1 - p \\
& \iff \int_0^\delta (g * ((g/h') \circ h^{-1}))(t) dt \geq 1 - (1-p)^{\frac{1}{n-1}} \tag{B.19} \\
& \iff \frac{4}{3} \delta^3 \left(1 - \frac{\delta}{20} (5 + 6\delta - \delta^2)\right) \geq 1 - (1-p)^{\frac{1}{n-1}} \\
& \iff \delta^3 \geq 1 - (1-p)^{\frac{1}{n-1}} \quad \text{en supposant } \delta < 1/2 \\
& \iff \delta \geq \left(1 - (1-p)^{\frac{1}{n-1}}\right)^{\frac{1}{3}}.
\end{aligned}$$

Il reste à établir une borne pour

$$\max_{(\varphi, \theta)} \left(\max \left(\left| \frac{d\mathcal{M}}{d\varphi} \right|, \left| \frac{d\mathcal{M}}{d\theta} \right| \right) \right). \tag{B.20}$$

L'inégalité de Bernstein est maintenant appliquée afin d'obtenir un majorant pour $|d\mathcal{M}/d\varphi|$ et $|d\mathcal{M}/d\theta|$:

$$\max \left(\left| \frac{d\mathcal{M}}{d\varphi} \right|, \left| \frac{d\mathcal{M}}{d\theta} \right| \right) \leq k \max_{(\varphi, \theta) \in \mathbb{R}} |\mathcal{M}(\varphi, \theta)|, \tag{B.21}$$

où k est l'ordre de \mathcal{M} .

Finalement, on pose

$$\varepsilon = k\pi \max_{1 \leq i \leq n} (|\mathcal{M}(\varphi_i, \theta_i)|) \left(1 - (1-p)^{\frac{1}{n-1}}\right)^{\frac{1}{3}}. \tag{B.22}$$

□

Continuité des moments par rapport aux angles

Dans cette partie, nous supposons que pour tous $n \in \mathbb{N}^*$, ν_n (resp. d_n) est la mesure de Lebesgue (resp. la distance euclidienne) sur \mathbb{R}^n .

Soit $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$, alors \mathcal{S}_g correspond au support de la fonction g , autrement dit \mathcal{S}_g est l'adhérence de l'ensemble $\{x \in \mathbb{R}^n \mid g(x) \neq 0\}$.

On note $L_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ l'espace des fonctions $g : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ telle que $g \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ et \mathcal{S}_g est un ensemble compact de \mathbb{R}^n .

Pour $r > 0$, $\mathcal{B}_n(r)$ (resp. $\mathcal{B}'_n(r)$) dénote la boule fermée (resp. ouverte) de \mathbb{R}^n de rayon r et de centre l'origine O .

Lemme 2 (Lemme d'Urysohn : [70]). *Soient K un ensemble compact et V un ensemble ouvert de \mathbb{R}^n tel que $K \subset V$. Alors, il existe une fonction continue $g : \mathbb{R}^n \mapsto [0,1]$ telle que pour tous $x \in K$, $g(x) = 1$, \mathcal{S}_g est un ensemble compact et $\mathcal{S}_g \subset V$.*

Le lemme suivant donne une approximation d'une fonction mesurable par une fonction continue. La démonstration d'un résultat plus général que celui donné dans le lemme suivant se trouve dans [71].

Lemme 3 ([71]). Soient $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ une fonction mesurable et $\varepsilon > 0$. Il existe une fonction continue $\phi_\varepsilon : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ telle que :

$$\nu_n(\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq \phi_\varepsilon(x)\}) < \varepsilon. \quad (\text{C.1})$$

Remarque 5.

- Si $\varepsilon' < \varepsilon$, alors on peut supposer que $\mathcal{S}_{\phi_\varepsilon} \subseteq \mathcal{S}_{\phi_{\varepsilon'}}$.
- Supposons que $K = \mathcal{S}_f$ un ensemble compact et posons $V = K \oplus \mathcal{B}'_n(1)$. D'après le Lemme 2, il existe une fonction continue $g : \mathbb{R}^n \mapsto [0,1]$ telle que pour tous $x \in K$, $g(x) = 1$, \mathcal{S}_g est un ensemble compact et $\mathcal{S}_g \subset V$. Posons $\phi'_\varepsilon = g \times \phi_\varepsilon$. Donc on a pour tous $x \in \mathcal{S}_f$, $\phi'_\varepsilon(x) = \phi_\varepsilon(x)$ et pour tous $x \in (\mathbb{R}^n \setminus \mathcal{S}_f)$ si $\phi_\varepsilon(x) = 0$, alors $\phi'_\varepsilon(x) = 0$. Donc, $\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq \phi'_\varepsilon(x)\} \subseteq \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq \phi_\varepsilon(x)\}$. Par conséquent, ϕ'_ε est une fonction continue, $\mathcal{S}_{\phi'_\varepsilon} \subset \mathcal{S}_f \oplus \mathcal{B}'_n(1)$, $\mathcal{S}_{\phi'_\varepsilon}$ est un ensemble compact et

$$\nu_n(\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq \phi'_\varepsilon(x)\}) < \varepsilon. \quad (\text{C.2})$$

Alors, on peut supposer dans toute la suite que $\mathcal{S}_{\phi_\varepsilon} \subset \mathcal{S}_f \oplus \mathcal{B}'_n(1)$ et $\mathcal{S}_{\phi_\varepsilon}$ est un ensemble compact.

- Si $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$, alors ϕ_ε peut être choisi de telle façon que $\phi_\varepsilon \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ et $\|\phi_\varepsilon\|_\infty \leq \|f\|_\infty$.

Dans le lemme suivant, nous montrons que la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^n est invariante par les isométries de \mathbb{R}^n .

Lemme 4. Soit A un ensemble mesurable de \mathbb{R}^n et soit R une isométrie de \mathbb{R}^n . Alors,

$$\nu_n(R(A)) = \nu_n(A). \quad (\text{C.3})$$

Démonstration. Soit $A \subseteq \mathbb{R}^n$ un ensemble mesurable et soit $R : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ une isométrie.

$$\nu_n(R(A)) = \int_{\mathbb{R}^n} \chi_A(R^{-1}(x_1, \dots, x_n)) dx_1 \dots dx_n \quad (\text{C.4})$$

$$= \int_{R^{-1}(\mathbb{R}^n)} \chi_A(x_1, \dots, x_n) \frac{1}{\det(R^{-1})} dx_1 \dots dx_n \quad (\text{C.5})$$

$$= \nu_n(A). \quad (\text{C.6})$$

□

Théorème 4. Soit $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$ une fonction mesurable avec un support compact et telle que $f \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$, $R : I \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ est une fonction continue où $I = (\mathbb{R}/\mathbb{Z})^\ell$ (c'est à dire I est un tore de dimension ℓ) telle que pour tous $\theta \in I$, $R(\theta, \cdot)$ est une transformation orthogonale sur \mathbb{R}^n et $K : \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}$ est une fonction continue avec $m < n$. Pour tous $\theta \in I$ et $(x_1, \dots, x_m) \in \mathbb{R}^m$, posons :

$$P_f(\theta)(x_1, \dots, x_m) = \int_{\mathbb{R}^{n-m}} f(R(\theta, (x_1, \dots, x_n))) dx_{m+1} \dots dx_n, \quad (\text{C.7})$$

et

$$\mu_K(P_f(\theta)) = \int_{\mathbb{R}^m} K(x_1, \dots, x_m) P_f(\theta)(x_1, \dots, x_m) dx_1 \dots dx_m. \quad (\text{C.8})$$

Alors, $(f, \theta) \mapsto \mu_K(P_f(\theta))$ est une fonction continue de $I \times L_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ dans \mathbb{R} .

Démonstration. Soient $f, f_1 \in L_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ tels que $\mathcal{S}_{f_1} \subset \mathcal{S}_f \oplus \mathcal{B}'_n(1)$ et $\theta, \theta' \in I$.

$$\mu_K(P_f(\theta')) - \mu_K(P_{f_1}(\theta)) = \mu_K(P_f(\theta')) - \mu_K(P_f(\theta)) + \mu_K(P_f(\theta)) - \mu_K(P_{f_1}(\theta)). \quad (\text{C.9})$$

– Premièrement, développons $\mu_K(P_f(\theta')) - \mu_K(P_f(\theta))$:

$$\begin{aligned} \mu_K(P_f(\theta')) - \mu_K(P_f(\theta)) &= \int_{\mathbb{R}^m} K(x_1, \dots, x_m) (P_f(\theta')(x_1, \dots, x_m) - P_f(\theta)(x_1, \dots, x_m)) dx_1 \dots dx_m \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} K(x_1, \dots, x_m) (f(R(\theta', (x_1, \dots, x_n))) - f(R(\theta, (x_1, \dots, x_n)))) dx_1 \dots dx_n. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Soit $\varepsilon \in (0, 1]$. Alors, selon le lemme 3, il existe une fonction continue ϕ_ε telle que,

$$\nu_n(\{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq \phi_\varepsilon(x)\}) < \varepsilon.$$

Posons $A_\varepsilon = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) \neq \phi_\varepsilon(x)\}$ et $A_{\vartheta, \varepsilon} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(R(\vartheta, x)) \neq \phi_\varepsilon(R(\vartheta, x))\}$.

Comme $\nu_n(A_\varepsilon) < \varepsilon$ et $A_{\vartheta, \varepsilon} = R(\vartheta, \cdot)^{-1}(A_\varepsilon)$, alors en utilisant le Lemme 4, on obtient

$$\nu_n(A_{\vartheta, \varepsilon}) < \varepsilon \text{ for all } \vartheta \in I.$$

Posons $B = \mathcal{S}_f \oplus \mathcal{B}'_n(1)$ et $B' = \bigcup_{\vartheta \in I} R(\vartheta, \cdot)^{-1}(B)$.

Comme $\mathcal{S}_f \subseteq B$ et $\mathcal{S}_{\phi_\varepsilon} \subseteq B$, alors $\bigcup_{\vartheta \in I} R(\vartheta, \cdot)^{-1}(\mathcal{S}_f) \subseteq B'$ et $\bigcup_{\vartheta \in I} R(\vartheta, \cdot)^{-1}(\mathcal{S}_{\phi_\varepsilon}) \subseteq B'$.

De plus, B' est un ensemble borné. En effet, B est un ensemble compact et pour tous $x, y \in B'$, il existe $\theta_1, \theta_2 \in I$ et $x_1, y_2 \in B$ tels que $x_1 = R(\theta_1, x)$ et $y_2 = R(\theta_2, y)$. Ainsi on a $d_n(x, y) \leq d_n(x, O) + d_n(O, y) = d_n(x_1, O) + d_n(O, y_2) \leq 2 \max_{z \in B} d_n(O, z)$ où O est l'origine.

D'autre part, comme $A_\varepsilon \subseteq B$, alors pour tous $\vartheta \in I$, $A_{\vartheta, \varepsilon} = R(\vartheta, \cdot)^{-1}(A_\varepsilon) \subseteq B'$.

Comme ϕ_ε est une fonction uniformément continue (car ϕ_ε est une fonction continue à support compact). Alors il existe $\delta > 0$ tel que

$$\forall x, x' \in \mathbb{R}^n, d_n(x, x') < \delta \implies |\phi_\varepsilon(x) - \phi_\varepsilon(x')| < \varepsilon.$$

Comme $R : I \times \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ est une fonction continue et B' est un ensemble borné, alors R est une fonction uniformément continue sur $I \times B'$ et il existe donc $\delta_1 > 0$ tel que

$$\forall (\theta, x), (\theta', x') \in I \times B', d'_{\ell, n}((\theta, x), (\theta', x')) < \delta_1 \implies d_n(R(\theta, x), R(\theta', x')) < \delta$$

où $d'_{\ell, n}$ est la distance induite par la distance euclidienne sur le produit cartésien du tore de dimension ℓ et de \mathbb{R}^n .

Pour tous $\theta, \theta' \in I$ et pour tous $x \in \mathbb{R}^n$ on a :

$$\begin{aligned} f(R(\theta', x)) - f(R(\theta, x)) &= f(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta', x)) + \phi_\varepsilon(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta, x)) + \\ &\quad \phi_\varepsilon(R(\theta, x)) - f(R(\theta, x)). \end{aligned} \tag{C.11}$$

Alors,

$$\begin{aligned}
|\mu_K(P_f(\theta')) - \mu_K(P_f(\theta))| &\leq \int_{\mathbb{R}^n} |K(x_1, \dots, x_m)| |f(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta', x))| dx_1 \dots dx_n \\
&+ \int_{\mathbb{R}^n} |K(x_1, \dots, x_m)| |\phi_\varepsilon(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta, x))| dx_1 \dots dx_n \\
&+ \int_{\mathbb{R}^n} |K(x_1, \dots, x_m)| |\phi_\varepsilon(R(\theta, x)) - f(R(\theta, x))| dx_1 \dots dx_n \\
&\leq \int_{A_{\theta', \varepsilon}} |K(x_1, \dots, x_m)| |f(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta', x))| dx_1 \dots dx_n \\
&+ \int_{B'} |K(x_1, \dots, x_m)| |\phi_\varepsilon(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta, x))| dx_1 \dots dx_n \\
&+ \int_{A_{\theta, \varepsilon}} |K(x_1, \dots, x_m)| |\phi_\varepsilon(R(\theta, x)) - f(R(\theta, x))| dx_1 \dots dx_n \\
&\leq 2\|f\|_\infty \int_{A_{\theta', \varepsilon}} |K(x_1, \dots, x_m)| dx_1 \dots dx_n \\
&+ \int_{B'} |K(x_1, \dots, x_m)| |\phi_\varepsilon(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta, x))| dx_1 \dots dx_n \\
&+ 2\|f\|_\infty \int_{A_{\theta, \varepsilon}} |K(x_1, \dots, x_m)| dx_1 \dots dx_n. \\
&\leq 2\|f\|_\infty \|K\|_{\infty, B'} (\nu_n(A_{\theta', \varepsilon}) + \nu_n(A_{\theta, \varepsilon})) \\
&+ \|K\|_{\infty, B'} \int_{B'} |\phi_\varepsilon(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta, x))| dx_1 \dots dx_n \\
&\leq 4\|f\|_\infty \|K\|_{\infty, B'} \nu_n(A_\varepsilon) \\
&+ \|K\|_{\infty, B'} \int_{B'} |\phi_\varepsilon(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta, x))| dx_1 \dots dx_n.
\end{aligned}$$

Où $\|K\|_{\infty, B'} = \max(\{|K(x_1, \dots, x_m)| \mid (x_1, \dots, x_m) \in B'\})$ est un nombre fini car K est une fonction continue sur \mathbb{R}^m et B' est une ensemble borné.

Soit d'_ℓ la distance géodésique sur le tore de dimension ℓ induite par la distance euclidienne. Si $d'_\ell(\theta', \theta) < \delta_1$, et donc $d'_{\ell, n}((\theta', x), (\theta, x)) < \delta_1$, alors $d_n(R(\theta', x), R(\theta, x)) < \delta$. Par conséquent, $|\phi_\varepsilon(R(\theta', x)) - \phi_\varepsilon(R(\theta, x))| < \varepsilon$.

Donc,

$$|\mu_K(P_f(\theta')) - \mu_K(P_f(\theta))| \leq (4\|f\|_\infty \|K\|_{\infty, B'} + \|K\|_{\infty, B'} \nu_n(B')) \varepsilon \quad (\text{C.12})$$

– Deuxièmement, développons $\mu_K(P_f(\theta)) - \mu_K(P_{f_1}(\theta))$:

$$\begin{aligned}
\mu_K(P_f(\theta)) - \mu_K(P_{f_1}(\theta)) &= \int_{\mathbb{R}^m} K(x_1, \dots, x_m) (P_f(\theta)(x_1, \dots, x_m) - P_{f_1}(\theta)(x_1, \dots, x_m)) \, dx_1 \dots dx_m \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} K(x_1, \dots, x_m) (f(R(\theta, (x_1, \dots, x_n))) - f_1(R(\theta, (x_1, \dots, x_n)))) \, dx_1 \dots dx_n. \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} K(R^{-1}(\theta, x_1, \dots, x_m)) (f(x_1, \dots, x_n) - f_1(x_1, \dots, x_n)) \, dx_1 \dots dx_n. \\
&\leq \|f - f_1\|_{L^\infty} \int_{\mathcal{S}_f \oplus \mathcal{B}'_n(1)} |K(R^{-1}(\theta, x_1, \dots, x_m))| \, dx_1 \dots dx_n.
\end{aligned}$$

□

Bibliographie

- [1] D. J. De Rosier, A. Klug, Reconstruction of Three Dimensional Structures from Electron Micrographs, *Nature* 217 (5124) (1968) 130–134. doi:10.1038/217130a0.
- [2] R. R. Coifman, Y. Shkolnisky, F. J. Sigworth, A. Singer, Graph laplacian tomography from unknown random projections, *IEEE Trans Image Process* 17 (10) (2008) 1891–1899. doi:10.1109/TIP.2008.2002305.
- [3] Y. Fang, M. Sun, S. Vishwanathan, K. Ramani, sLLE : Spherical locally linear embedding with applications to tomography, in : 2011 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2011, pp. 1129–1136. doi:10.1109/CVPR.2011.5995563.
- [4] Y. Fang, S. Murugappan, K. Ramani, Estimating view parameters from random projections for Tomography using spherical MDS, *BMC Medical Imaging* 10 (1) (2010) 12. doi:10.1186/1471-2342-10-12.
- [5] M. Van Heel, Multivariate statistical classification of noisy images (randomly oriented biological macromolecules), *Ultramicroscopy* 13 (1) (1984) 165–183. doi:10.1016/0304-3991(84)90066-4.
- [6] P. A. Penczek, R. A. Grassucci, J. Frank, The ribosome at improved resolution : new techniques for merging and orientation refinement in 3d cryo-electron microscopy of biological particles, *Ultramicroscopy* 53 (3) (1994) 251–270. doi:10.1016/0304-3991(94)90038-8.

- [7] M. Van Heel, Angular reconstitution : a posteriori assignment of projection directions for 3d reconstruction, *Ultramicroscopy* 21 (2) (1987) 111–123. doi:10.1016/0304-3991(87)90078-7.
- [8] J. Frank, *Three-dimensional electron microscopy of macromolecular assemblies : visualization of biological molecules in their native state*, Oxford Univ. Press, 2006. doi:10.1093/acprof:oso/9780195182187.001.0001.
- [9] B. Ben Cheikh, E. Baudrier, G. Frey, A tomographical reconstruction method from unknown direction projections for 2d gray-level images, in : 2014 IEEE 11th Int Symp on Biomed Imaging (ISBI), 2014, pp. 209–212. doi:10.1109/ISBI.2014.6867846.
- [10] D. B. Salzman, A method of general moments for orienting 2d projections of unknown 3d objects, *Comput Vision Graph* 50 (2) (1990) 129–156. doi:10.1016/0734-189X(90)90038-W.
- [11] S. Basu, Y. Bresler, Feasibility of tomography with unknown view angles., *IEEE Trans Image Process* 9 (6) (2000) 1107–22. doi:10.1109/83.846252.
- [12] S. Basu, Y. Bresler, Uniqueness of tomography with unknown view angles., *IEEE transactions on image processing* 9 (6) (2000) 1094–106. doi:10.1109/83.846251.
- [13] A. B. Goncharov, M. S. Gelfand, Determination of mutual orientation of identical particles from their projections by the moments method, *Ultramicroscopy* 25 (4) (1988) 317–327. doi:10.1016/0304-3991(88)90006-X.
- [14] B. Vainshtein, A. Goncharov, Determination of the spatial orientation of arbitrarily arranged identical particles of an unknown structure from their projections, in : 11th International Congress on Electron Microscopy, 1986, pp. 459–460.
- [15] B. Ben Cheikh, *Reconstruction tomographique à partir de projections non-orientées : cas continu*, Tech. rep., Strasbourg University (2014).
- [16] R. H. Bossi, G. E. Georgeson, The application of X-ray computed tomography to materials development, *JOM* 43 (9) (1991) 8–15. doi:10.1007/BF03222228.
- [17] A. Daurat, *Convexité dans le plan discret. Application à la tomographie*, phdthesis, Université Paris-Diderot - Paris VII (Dec. 2000).

- [18] F. Abdmouleh, Reconstitution tomographique de propriétés qualitatives et quantitatives d'images, phdthesis, Université de Strasbourg (Nov. 2013).
- [19] R. Irving, M. Jerrum, Three-dimensional Statistical Data Security Problems, *SIAM Journal on Computing* 23 (1) (1994) 170–184. doi:10.1137/S0097539790191010.
- [20] F. Jarray, Résolution de problèmes de tomographie discrète. Applications à la planification de personnel, Ph.D. thesis, CNAM, CEDRIC Laboratory, Paris, France (2004).
- [21] Y. Zhao, N. Patwari, J. M. Phillips, S. Venkatasubramanian, Radio Tomographic Imaging and Tracking of Stationary and Moving People via Kernel Distance, in : *Proceedings of the 12th International Conference on Information Processing in Sensor Networks, IPSN '13*, ACM, New York, NY, USA, 2013, pp. 229–240. doi:10.1145/2461381.2461410.
- [22] J. Wilson, N. Patwari, Radio Tomographic Imaging with Wireless Networks, *IEEE Transactions on Mobile Computing* 9 (5) (2010) 621–632. doi:10.1109/TMC.2009.174.
- [23] S. W. Smith, *The Scientist & Engineer's Guide to Digital Signal Processing*, 1st Edition, California Technical Pub, San Diego, Calif, 1997.
- [24] R. Marabini, G. T. Herman, J. M. Carazo, 3d reconstruction in electron microscopy using ART with smooth spherically symmetric volume elements (blobs), *Ultramicroscopy* 72 (1–2) (1998) 53–65. doi:10.1016/S0304-3991(97)00127-7.
- [25] P. Penczek, M. Radermacher, J. Frank, Three-dimensional reconstruction of single particles embedded in ice, *Ultramicroscopy* 40 (1) (1992) 33–53.
- [26] G. T. Herman, A. Kuba (Eds.), *Advances in Discrete Tomography and Its Applications*, Applied and Numerical Harmonic Analysis, Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2007.
- [27] C. Fillion, Reconstitution tomographique d'une macromolécule à l'aide de ses projections par cryo-microscopie électronique, Tech. Rep. 0, ISEM, Brest (2011).
- [28] A. Nicolas, Modélisation discrète de la transformée de Radon en 2d et 3d, implémentation., Tech. rep., Strasbourg University (2012).

- [29] M. Carroni, H. R. Saibil, Cryo electron microscopy to determine the structure of macromolecular complexes, *Methods* doi:10.1016/j.ymeth.2015.11.023.
- [30] E. Nogales, The development of cryo-EM into a mainstream structural biology technique, *Nature Methods* 13 (1) (2016) 24–27. doi:10.1038/nmeth.3694.
- [31] G. D. Pintilie, Segmentation and registration of molecular components in 3-dimensional density maps from cryo-electron microscopy, Thesis, Massachusetts Institute of Technology (2010).
- [32] B. Böttcher, S. A. Wynne, R. A. Crowther, Determination of the fold of the core protein of hepatitis B virus by electron cryomicroscopy, *Nature* 386 (6620) (1997) 88–91. doi:10.1038/386088a0.
- [33] M. G. Campbell, D. Veessler, A. Cheng, C. S. Potter, B. Carragher, 2.8 Å resolution reconstruction of the *Thermoplasma acidophilum* 20s proteasome using cryo-electron microscopy, *eLife* 4 (2015) e06380. doi:10.7554/eLife.06380.
- [34] M. Radermacher, T. Wagenknecht, A. Verschoor, J. Frank, Three-dimensional reconstruction from a single-exposure, random conical tilt series applied to the 50s ribosomal subunit of *Escherichia coli*, *Journal of Microscopy* 146 (Pt 2) (1987) 113–136.
- [35] A. E. Leschziner, E. Nogales, The orthogonal tilt reconstruction method : An approach to generating single-class volumes with no missing cone for ab initio reconstruction of asymmetric particles, *Journal of Structural Biology* 153 (3) (2006) 284–299. doi:10.1016/j.jsb.2005.10.012.
- [36] R. A. Crowther, L. A. Amos, J. T. Finch, D. J. De Rosier, A. Klug, Three Dimensional Reconstructions of Spherical Viruses by Fourier Synthesis from Electron Micrographs, *Nature* 226 (5244) (1970) 421–425. doi:10.1038/226421a0.
- [37] a. Singer, Y. Shkolnisky, Three-Dimensional Structure Determination from Common Lines in Cryo-EM by Eigenvectors and Semidefinite Programming., *SIAM journal on imaging sciences* 4 (2) (2011) 543–572. doi:10.1137/090767777.
- [38] G. Tang, L. Peng, P. R. Baldwin, D. S. Mann, W. Jiang, I. Rees, S. J. Ludtke, EMAN2 : An extensible image processing suite for electron microscopy, *Journal of Structural Biology* 157 (1) (2007) 38–46. doi:10.1016/j.jsb.2006.05.009.

- [39] M. van Heel, R. Portugal, A. Rohou, C. Linnemayr, C. Bebeacua, R. Schmidt, T. Grant, M. Schatz, Four-dimensional cryo-electron microscopy at quasi-atomic resolution : *IMAGIC 4D*, in : International Tables for Crystallography, Wiley, 2012, pp. 624–628.
- [40] D. Elmlund, H. Elmlund, SIMPLE : Software for ab initio reconstruction of heterogeneous single-particles, *Journal of Structural Biology* 180 (3) (2012) 420–427. doi:10.1016/j.jsb.2012.07.010.
- [41] S. H. W. Scheres, M. Valle, R. Nuñez, C. O. S. Sorzano, R. Marabini, G. T. Herman, J.-M. Carazo, Maximum-likelihood multi-reference refinement for electron microscopy images, *Journal of Molecular Biology* 348 (1) (2005) 139–149. doi:10.1016/j.jmb.2005.02.031.
- [42] S. H. Scheres, A Bayesian View on Cryo-EM Structure Determination, *Journal of Molecular Biology* 415 (2-4) (2012) 406–418. doi:10.1016/j.jmb.2011.11.010.
- [43] T. R. Shaikh, H. Gao, W. T. Baxter, F. J. Asturias, N. Boisset, A. Leith, J. Frank, SPIDER image processing for single-particle reconstruction of biological macromolecules from electron micrographs, *Nature Protocols* 3 (12) (2008) 1941–1974. doi:10.1038/nprot.2008.156.
- [44] S. Jonić, C. O. S. Sorzano, N. Boisset, Comparison of single-particle analysis and electron tomography approaches : an overview., *Journal of microscopy* 232 (3) (2008) 562–79. doi:10.1111/j.1365-2818.2008.02119.x.
- [45] P. A. Penczek, R. Renka, H. Schomberg, Gridding-based direct Fourier inversion of the three-dimensional ray transform, *Journal of the Optical Society of America. A, Optics, Image Science, and Vision* 21 (4) (2004) 499–509.
- [46] A. C. Kak, M. Slaney, Principles of Computerized Tomographic Imaging, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2001.
- [47] M. Radermacher, Weighted Back-Projection Methods, in : J. Frank (Ed.), *Electron Tomography*, Springer US, 1992, pp. 91–115. doi:10.1007/978-1-4757-2163-8_5.
- [48] B. B. Cheikh, E. Baudrier, G. Frey, Joint direction and volume tomographical Ab-initio reconstruction for electron microscopy, in : 2015 IEEE 12th International Sym-

- posium on Biomedical Imaging (ISBI), 2015, pp. 1040–1043. doi:10.1109/ISBI.2015.7164049.
- [49] P. A. Penczek, J. Zhu, J. Frank, A common-lines based method for determining orientations for $N > 3$ particle projections simultaneously, *Ultramicroscopy* 63 (3) (1996) 205–218. doi:10.1016/0304-3991(96)00037-X.
- [50] M. R. Anderberg, *Cluster analysis for applications*, Academic Press, 1973.
- [51] M. A. Wong, A Hybrid Clustering Method for Identifying High-Density Clusters, *Journal of the American Statistical Association* 77 (380) (1982) 841–847. doi:10.1080/01621459.1982.10477896.
- [52] D. B. Marghitu, M. Dupac, *Advanced Dynamics*, Springer New York, New York, NY, 2012.
- [53] F. Natterer, *The Mathematics of Computerized Tomography*, SIAM, 2001.
- [54] E. W. Dijkstra, A note on two problems in connexion with graphs, *Numerische Mathematik* 1 (1) (1959) 269–271. doi:10.1007/BF01386390.
- [55] K. Pearson, On lines and planes of closest fit to systems of points in space, *Philosophical Magazine* 2 (6) (1901) 559–572.
- [56] S. Kritchman, B. Nadler, Determining the number of components in a factor model from limited noisy data, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 94 (1) (2008) 19–32. doi:10.1016/j.chemolab.2008.06.002.
- [57] N. Wiener, *Extrapolation, Interpolation, and Smoothing of Stationary Time Series : With Engineering Applications*, The MIT Press, Cambridge, Mass., 1964.
- [58] A. Singer, H. T. Wu, Two-Dimensional Tomography from Noisy Projections Taken at Unknown Random Directions, *SIAM Journal on Imaging Sciences* 6 (1) (2013) 136–175. doi:10.1137/090764657.
- [59] D. J. C. MacKay, *Information Theory, Inference and Learning Algorithms*, Cambridge University Press, Cambridge, UK ; New York, 2003.
- [60] D. Donoho, C. Chui, R. R. Coifman, S. Lafon, Special Issue : Diffusion Maps and Wavelets Diffusion maps, *Applied and Computational Harmonic Analysis* 21 (1) (2006) 5–30. doi:10.1016/j.acha.2006.04.006.

- [61] T. R. Kane, D. A. Levinson, Dynamics : Theory and Applications, f first edition edition Edition, Mcgraw-Hill College, New York, 1985.
- [62] M.-K. Hu, Visual pattern recognition by moment invariants, IRE Transactions on Information Theory 8 (2) (1962) 179–187. doi:10.1109/TIT.1962.1057692.
- [63] A. Singer, Z. Zhao, Y. Shkolnisky, R. Hadani, Viewing Angle Classification of Cryo-Electron Microscopy Images Using Eigenvectors, SIAM Journal on Imaging Sciences 4 (2) (2011) 723–759. doi:10.1137/090778390.
- [64] Y. Shkolnisky, A. Singer, Viewing Direction Estimation in Cryo-EM Using Synchronization, SIAM Journal on Imaging Sciences 5 (3) (2012) 1088–1110. doi:10.1137/120863642.
- [65] Mémoires de la classe des sciences mathématiques et physiques de l’Institut National de France, Institut National de France, 1809.
- [66] M. Van Heel, E. Orlova, G. Harauz, Angular reconstitution in three-dimensional electron microscopy : historical and theoretical aspects, Microscopy 11 (1997) 195–210. doi:10.1.1.391.100.
- [67] N. A. Farrow, E. P. Ottensmeyer, A posteriori determination of relative projection directions of arbitrarily oriented macromolecules, J. Opt. Soc. Am. A 9 (10) (1992) 1749–1760. doi:10.1364/JOSAA.9.001749.
- [68] S. Mallick, S. Agarwal, D. Kriegman, S. Belongie, B. Carragher, C. Potter, Structure and view estimation for tomographic reconstruction : A bayesian approach, in : 2006 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Vol. 2, 2006, pp. 2253–2260. doi:10.1109/CVPR.2006.295.
- [69] Q. I. Rahman, Q. M. Tariq, On bernstein’s inequality for entire functions of exponential type, Journal of Mathematical Analysis and Applications 359 (1) (2009) 168–180. doi:10.1016/j.jmaa.2009.05.035.
- [70] W. Rudin, Real and Complex Analysis. Third Edition, McGraw-Hill, 1987.
- [71] J. M. ALDAZ, On the approximation of measurable functions by continous functions, RENDICONTI DEL CIRCOLO MATEMATICO DI PALERMO (1996) 289–302.

- [72] G. Castiglione, A. Restivo, 9th International Workshop on Combinatorial Image Analysis Reconstruction of L-convex Polyominoes, *Electronic Notes in Discrete Mathematics* 12 (2003) 290–301. doi:10.1016/S1571-0653(04)00494-9.
- [73] A. Frosini, S. Rinaldi, K. Tawbe, L. Vuillon, Reconstruction of 2-convex polyominoes, lama.univ-savoie.fr (2010).
- [74] S. W. Golomb, *Polyominoes : Puzzles, Patterns, Problems, and Packings*, Princeton University Press, 1996.
- [75] K. J. Batenburg, A. Nagy, M. Nivat, S. Brunetti, A. Daurat, Discrete Tomography and Digital Geometry : In memory of Attila Kuba Reconstruction of convex lattice sets from tomographic projections in quartic time, *Theoretical Computer Science* 406 (1) (2008) 55–62. doi:10.1016/j.tcs.2008.06.003.
- [76] E. Barucci, A. Del Lungo, M. Nivat, R. Pinzani, Reconstructing convex polyominoes from horizontal and vertical projections, *Theoretical Computer Science* 155 (2) (1996) 321–347. doi:10.1016/0304-3975(94)00293-2.
- [77] E. Barucci, S. Brunetti, A. D. Lungo, M. Nivat, Reconstruction of Discrete Sets from Three or More X-Rays, in : G. Bongiovanni, R. Petreschi, G. Gambosi (Eds.), *Algorithms and Complexity*, no. 1767 in *Lecture Notes in Computer Science*, Springer Berlin Heidelberg, 2000, pp. 199–210, dOI : 10.1007/3-540-46521-9_17.
- [78] G. H. Woeninger, G. H. Woeninger. The reconstruction of polyominoes from horizontal and vertical projections, Tech. rep., SFB-65, TU Graz (1996).
- [79] R. J. Gardner, P. Gritzmann, Uniqueness and complexity in discrete tomography, in : *Discrete tomography*, Birkhäuser Boston, 1999, pp. 85–113.
- [80] H. J. Ryser, *Combinatorial mathematics*, Mathematical Association of America ; distributed by Wiley [New York, 1963.
- [81] M. Shatsky, R. J. Hall, E. Nogales, J. Malik, S. E. Brenner, Automated multi-model reconstruction from single-particle electron microscopy data, *Journal of Structural Biology* 170 (1) (2010) 98–108. doi:10.1016/j.jsb.2010.01.007.
- [82] R. J. Hall, B. Siridechadilok, E. Nogales, Cross-Correlation of Common Lines : A Novel Approach for Single-Particle Reconstruction of a Structure Containing

- a Flexible Domain, *Journal of structural biology* 159 (3) (2007) 474–482. doi:10.1016/j.jsb.2007.05.007.
- [83] A. Singer, R. R. Coifman, F. J. Sigworth, D. W. Chester, Y. Shkolnisky, Detecting Consistent Common Lines in Cryo-EM by Voting, *Journal of structural biology* 169 (3) (2010) 312–322. doi:10.1016/j.jsb.2009.11.003.
- [84] D. S. Goldberg, F. P. Roth, Assessing experimentally derived interactions in a small world, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 100 (8) (2003) 4372–4376. doi:10.1073/pnas.0735871100.
- [85] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, M. P. Vecchi, Optimization by simulated annealing, *Science (New York, N.Y.)* 220 (4598) (1983) 671–680. doi:10.1126/science.220.4598.671.
- [86] H. Friedrich, P. E. de Jongh, A. J. Verkleij, K. P. de Jong, Electron Tomography for Heterogeneous Catalysts and Related Nanostructured Materials, *Chemical Reviews* 109 (5) (2009) 1613–1629. doi:10.1021/cr800434t.
- [87] G. Herman, A. Kuba, Discrete tomography in medical imaging, *Proceedings of the IEEE* 91 (10) (2003) 1612–1626. doi:10.1109/JPROC.2003.817871.
- [88] A. M. Bronstein, M. M. Bronstein, R. Kimmel, Numerical Geometry of Non-Rigid Shapes, *Monographs in Computer Science*, Springer New York, New York, NY, 2009.
- [89] I. T. Jolliffe, *Principal component analysis*, Springer, New York, 2002.
- [90] G. T. Herman, *Fundamentals of Computerized Tomography : Image Reconstruction from Projections*, Springer, 2009. doi:10.1007/978-1-84628-723-7.
- [91] S. Bernstein, *Leçons sur les propriétés extrémales et la meilleure approximation des fonctions analytiques d’une variable réelle*, Gauthier-Villar, 1926.
- [92] S. Bernstein, *Sur l’ordre de la meilleure approximation des fonctions continues par des polynômes de degré donné*, *Mémoires de l’Académie Royale de Belgique* 2 (4) (1912) 1–103.
- [93] M. S. Phan, E. Baudrier, L. Mazo, M. Tajine, Angular difference measure between tomographic projections taken at unknown directions in 2d, in : 2014 IEEE

International Conference on Image Processing (ICIP), 2014, pp. 1738–1742. doi:
10.1109/ICIP.2014.7025348.

- [94] F. Natterer, *The Mathematics of Computerized Tomography*, SIAM, 2001.
- [95] C. Fillion, A. Daurat, B. Naegel, G. Frey, E. Baudrier, A new ab initio reconstruction method from unknown-direction projections of 2d binary set, in : 2013 20th IEEE International Conference on Image Processing (ICIP), 2013, pp. 1031–1035. doi:
10.1109/ICIP.2013.6738213.

Contribution à l'estimation de la similarité dans un ensemble de projections tomographiques non-orientées

Résumé

La cryo-microscopie électronique est une technique tomographique permettant de reconstituer la structure 3D d'un objet complexe en biologie à partir d'un jeu d'acquisitions. Ces images de l'objet complexe sont appelées les projections et sont acquises sous orientations inconnues. Un des avantages de la cryo-microscopie électronique est l'obtention d'un modèle 3D de très haute résolution de l'objet dans un état naturel. La procédure de reconstruction comporte plusieurs étapes telles que l'alignement, la classification des projections, l'estimation de leurs orientations et le raffinement des projections. Lors de ces étapes, la distance entre deux projections est fréquemment mesurée.

Le travail réalisé au cours de cette thèse s'organise autour de la recherche théorique d'une distance entre des projections non-orientées avec comme objectif l'amélioration de la procédure de reconstruction tomographique en cryo-microscopie électronique. La contribution de ce travail de thèse est une méthode permettant d'estimer la différence angulaire entre deux projections dans les cas 2D et 3D. Notre méthode est basée sur la construction d'un graphe de voisinage dont les sommets sont les projections, dont les arêtes relient des projections voisines et sont pondérées par une approximation locale de la différence angulaire. Le calcul de ces poids repose sur les propriétés des moments de projection. Notre méthode est testée sur des images simulées de différentes résolutions et de différents niveaux du bruit. La comparaison avec des autres méthodes d'estimation de la différence angulaire est aussi réalisée.

Mots clés : *cryo-microscopie électronique, reconstruction tomographique, distance euclidienne, différence angulaire, orientations inconnues, moments de projections, graphe de voisinage.*

Résumé en anglais

Cryo-electron microscopy is a tomographic technique allowing to reconstruct a 3D model of complex structure in biology from a set of acquired images. These images are known as the tomographic projections and are taken at unknown directions. The advantage of the cryo-electron microscopy is the 3D reconstruction at very high resolution. The reconstruction procedure consists of many steps such as projection alignment, projection classification, orientation estimation and projection refinement. During these steps, the distance between two projections is frequently measured.

The work in this thesis aims at studying the distances measured between two unknown-direction projections with the objective of improving the reconstruction result in the cryo-electron microscopy. The contribution of this thesis is the development of a method for estimating the angular difference between two projections in 2D and 3D. Our method is based on the construction of a neighborhood graph whose vertices are the projections, whose edges link the projection neighbors and are weighted by a local approximation of the angular difference. The calculation of the weights relies on the projection moment properties. The proposed method has been tested on simulated images with different resolutions and at different noise levels. The comparison with others estimation methods of angular difference has been realised.

Keywords: *cryo-electron microscopy, tomographic reconstruction, Euclidean distance, angular difference, unknown directions, projection moments, neighborhood graph.*

