

# EXPLOITER LES SIGNATURES DE LA MATIÈRE GRÂCE À L'IMAGERIE HYPERSPECTRALE COMPUTATIONNELLE

Clémence GENTNER<sup>1</sup>, Hilton B. DE AGUIAR<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire Kastler Brossel, ENS-Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Collège de France, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France

\*[h.aguiar@lkb.ens.fr](mailto:h.aguiar@lkb.ens.fr)



<https://doi.org/10.1051/photon/202312047>

Article publié en accès libre sous les conditions définies par la licence Creative Commons Attribution License CC-BY (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0>), qui autorise sans restrictions l'utilisation, la diffusion, et la reproduction sur quelque support que ce soit, sous réserve de citation correcte de la publication originale.

Tandis qu'une image classique reproduit l'aspect visuel d'une scène, l'imagerie hyperspectrale peut en révéler d'autres facettes cachées. Il s'agit d'un moyen de sonder, sans contact, des objets physiquement inaccessibles dans une dimension supplémentaire. Néanmoins, cette augmentation de dimensionnalité s'accompagne d'obstacles : la lenteur et le volume des données générées par ces méthodes constituaient jusqu'alors une limitation cruciale pour les applications nécessitant un haut débit. Des avancées récentes ont cependant permis de réaliser des observations spatio-spectrales en temps réel, telles que des cartographies dynamiques de la composition chimique d'échantillons vivants.

**D**e la même manière que la vision humaine, les images traditionnelles encodent l'information de couleur sur trois canaux (rouge, vert, bleu) pour chaque pixel de l'espace. Cependant, le spectre électromagnétique ne se résume pas qu'à trois canaux mais est continu, et s'étend bien au-delà de la plage visible par l'œil humain. Les spectres de la lumière véhiculent de riches informations sur

la matière avec laquelle elle a interagi : la structure atomique est partiellement révélée lorsque les longueurs d'onde correspondant à des niveaux d'énergie sont absorbées et réémises. Par conséquent, encoder ces signatures spectrales dans une dimension supplémentaire d'une image est un moyen d'enrichir la caractérisation de l'objet.

Divers processus d'absorption et d'émission lumineuses sont en jeu, variant de mécanismes cohérents à incohérents, et régis par une multitude

de processus physiques aux échelles atomiques, moléculaires, ou même microscopiques. Ainsi, le champ des possibles est vaste et l'utilisation de l'imagerie hyperspectrale s'étend à de nombreux domaines. Les géologues y ont par exemple recours, dans la gamme visible ou ultraviolette, pour détecter la présence de pétrole ou d'hydrocarbures. En astrophysique, l'entièreté du spectre électromagnétique est exploitée pour analyser l'état et le comportement des ●●●

objets cosmiques. On retrouve même l'imagerie hyperspectrale dans les contrôles des bagages dans les aéroports. Plus couramment, il s'agit d'un moyen d'analyser de manière non invasive la composition chimique d'échantillons, un aspect intéressant également en science des matériaux, ou encore en analyse d'œuvres d'art ou même de spécimens vivants, ouvrant des perspectives pour le diagnostic médical.

### PROCESSUS OPTIQUES DE CONTRASTE CHIMIQUE

En principe, l'ensemble du spectre électromagnétique peut porter une forme de caractérisation, mais nous nous concentrons ici sur ce que l'on appelle les processus chimico-sélectifs. Pour identifier les composants chimiques, la spectroscopie infrarouge sonde principalement les vibrations des liaisons chimiques au sein d'une molécule, tandis que la spectroscopie térahertz est plutôt sensible aux mouvements collectifs des molécules dans un échantillon. L'inconvénient des méthodes spectroscopiques infrarouge et térahertz est qu'elles utilisent des radiations de grandes longueurs d'onde, limitant la résolution d'imagerie microscopique au mieux à plusieurs micromètres. La spectroscopie Raman est un cas particulier de spectroscopie vibrationnelle qui combine une haute sélectivité chimique avec des longueurs

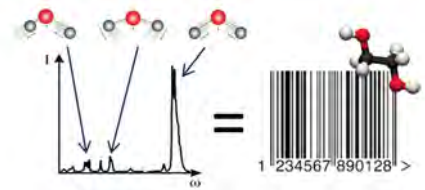
d'onde d'excitation et de détection dans le visible, apportant à la fois une haute résolution et une grande sensibilité de détection. Son principe se base sur le fait que l'excitation des modes vibrationnels de la molécule par l'illumination provoque une diffusion inélastique de la lumière.

### ENJEUX POUR L'IMAGERIE BIOMÉDICALE

Le décodage chimique non-invasif permis par l'imagerie hyperspectrale présente un grand intérêt notamment pour des applications biomédicales. En effet, pour évaluer de manière précise des tissus à l'échelle microscopique, les chercheurs et les cliniciens ont besoin d'images comportant une spécificité chimique. L'imagerie hyperspectrale Raman est donc une candidate pertinente, mais des solutions suffisamment performantes ne sont pas encore assez répandues. C'est

Chaque mode de vibration de chaque type de liaison chimique ayant une fréquence spécifique, le spectre Raman constitue une véritable signature de la molécule éclairée.

Décoder ces signatures moléculaires en chaque pixel d'une zone permet de reconstruire une cartographie de composition chimique.



pourquoi la pratique largement dominante consiste plutôt à exploiter des marqueurs moléculaires exogènes, par exemple en utilisant des colorants fluorescents qui se fixent spécifiquement sur certains types de molécules pour révéler leur présence. Bien que des avancées récentes d'imagerie multiplexée permettent de détecter simultanément des dizaines d'espèces, les marqueurs exogènes présentent divers inconvénients majeurs (perturbation du système, développements complexes, longues procédures dans les parcours cliniques, ...).

### DÉFIS DE L'IMAGERIE HYPERSPECTRALE

Une image hyperspectrale peut être représentée par un cube de données formé par les deux dimensions spatiales plus la dimension spectrale (voir Fig.1, droite). Elle peut soit être acquise en balayant le long d'une ou plusieurs de ces dimensions indépendamment, soit être prise instantanément, par exemple *via* des systèmes d'imagerie à champ large. Le choix de l'approche est motivé par des paramètres tels que les contraintes imposées par la configuration optique, ainsi que les exigences en termes de vitesse et de sélectivité spectrale. À cause de l'ajout de la dimension spectrale, les volumes de données constituant les images hyperspectrales sont considérables et leur acquisition exige des stratégies astucieuses. Le premier défi est la durée d'acquisition de l'ensemble des données, un problème notoire

**Figure 1.** Représentation d'une image à mono-bande spectrale

(par exemple : image en niveaux de gris), multispectrale (par exemple : 3 canaux rouge, vert et bleu), et hyperspectrale (où un grand nombre de bandes échantillonnent un spectre continu).

Figure sous licence Creative Commons Attribution - Share Alike 4.0 International

image mono-bande

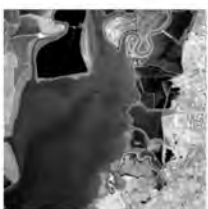


image multispectrale

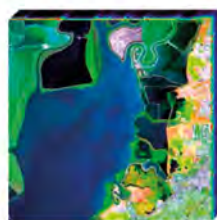
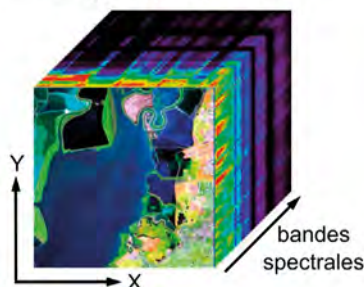


image hyperspectrale



pour les applications dynamiques. Les approches à champ large permettant l'acquisition instantanée du cube de données sont conceptuellement les plus rapides. Cependant, les méthodes à balayage sont généralement préférées pour l'imagerie en profondeur. En effet, ces approches permettent un sectionnement en profondeur confocal et donc l'imagerie en milieux épais, au détriment du temps d'acquisition qui peut être crucialement limité par la vitesse de balayage.

Indépendamment de la méthode d'acquisition, la gestion du volume des données est une problématique souvent négligée. Bien que les ordinateurs deviennent de plus en plus puissants, ils ne peuvent toujours pas supporter les débits élevés en jeu dans les acquisitions hyperspectrales dynamiques, sans même mentionner les problèmes de consommation d'énergie liée au stockage. Typiquement, une bande passante de 4 Go/s serait nécessaire pour l'imagerie spectrale de 512 canaux à une résolution VGA (video graphics array). Ce problème représente un véritable goulot d'étranglement, parmi d'autres encore venant s'ajouter lors de l'étape d'analyse des données.

Pour ces raisons, les applications de l'imagerie hyperspectrale se répandent plus lentement que l'imagerie mono-bande conventionnelle dans les domaines qui demandent un débit élevé tels que l'imagerie en temps réel pour les contrôles de qualité en ligne, les études biologiques dynamiques ou les diagnostics pathologiques.

### DES MÉTHODES COMPUTATIONNELLES OUVRENT DE NOUVELLES PERSPECTIVES

De récentes avancées abordent ces limitations. De nouvelles stratégies d'acquisition consistent à combiner des hyperspectromètres programmables avec des méthodes de reconstruction computationnelle qui permettent d'optimiser la prise



**Figure 2 :** Illustration de la reconstruction computationnelle de l'hyperspectre complet à partir de sa mesure sous-échantillonnée.

de données et ainsi d'accélérer l'acquisition. Ces méthodes sont basées sur le compressive sensing, un cadre mathématique qui permet de reconstruire l'information complète à partir de seulement quelques points de données. Ainsi, au lieu d'acquérir chaque composant de l'hyperspectre, certains sont abandonnés de manière à considérablement accélérer la mesure.

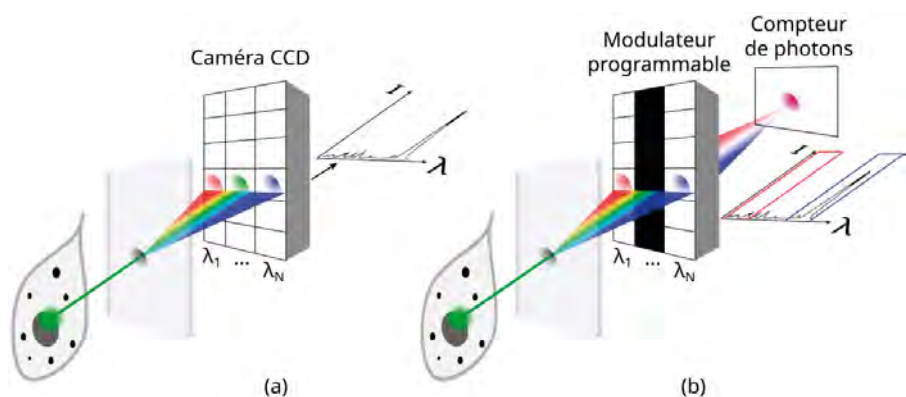
La reconstruction de données à partir de mesures échantillonnées fonctionne sous certaines conditions, la principale étant le caractère lacunaire des données. Autrement dit, la plupart des points de l'hyperspectre doivent être nuls. Ce prérequis est particulièrement validé dans le cas des spectres Raman. Dans ces cas, on peut concevoir une expérience en mesurant moins de données que ce

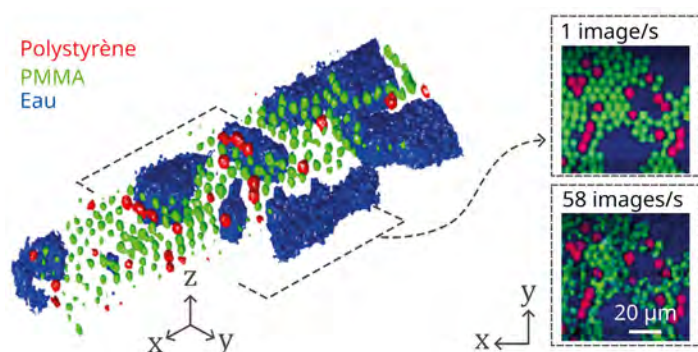
qui serait classiquement nécessaire, puis en utilisant des algorithmes pour combler les données qui n'ont pas été prises. Pour optimiser la vitesse, les points de données sont acquis simultanément, créant un signal multiplexé qui est ensuite détecté par un capteur puis démixé de manière computationnelle.

Deux types de détecteurs peuvent être utilisés dans un imageur hyperspectral computationnel : un détecteur à un seul pixel ou à plusieurs pixels (soit une caméra). Les approches à pixel unique sont les méthodes les moins coûteuses, ce qui peut être avantageux par rapport à des détecteurs multi-pixels complexes ou coûteux à fabriquer (par exemple des démodulateurs à lock-in intégré à chaque pixel), bien que ces derniers ont l'avantage d'effectuer l'ensemble de l'acquisition en une seule fois.

Au-delà de la simplicité de l'instrumentation, la spectroscopie à pixel unique est exploitée dans certaines approches d'imagerie hyperspectrale compressive pour des applications exigeant une très bonne sélectivité chimique. Un spectromètre à pixel unique est composé d'un modulateur spectral rapide basé sur un dispositif numérique à micro-miroirs (digital micromirror device, DMD). ●●●

**Figure 3 :** (a) Illustration d'un spectromètre conventionnel : les composantes spectrales du signal sont dispersées par un réseau de diffraction sur une caméra CCD. (b) Illustration d'un spectromètre computationnel : la caméra est remplacée par un modulateur de lumière programmable qui sélectionne des composantes spectrales selon l'algorithme de reconstruction choisi, pour les diriger vers un capteur mono-pixel.





**Figure 4 :** Imagerie Raman compressive d'un mélange de microbilles de polystyrène et de PMMA dans de l'eau. Trois filtres spectraux appliqués par le spectromètre programmable permettent d'identifier les trois espèces chimiques, représentées chacune par une couleur différente. L'image 3D résulte de la superposition de sections confocales en profondeur. A droite, une portion 2D est présentée pour deux vitesses d'acquisition différentes. On constate une baisse de résolution spatiale mais toujours une très haute sélectivité chimique lorsque la vitesse augmente, jusqu'à atteindre des cadences vidéos. Image adaptée de [2].

Les milliers de micro-miroirs bistables du DMD permettent de créer des masques spectraux de haute résolution ajustables à grande vitesse (typiquement des dizaines de kHz), déverrouillant les possibilités d'imagerie à haut débit.

Un tel spectromètre programmable permet donc de mettre en œuvre une imagerie Raman compressive, afin de bénéficier de la haute sélectivité chimique et de la haute résolution spatiale tout en résolvant le problème de la vitesse d'acquisition [1]. De plus, au lieu d'utiliser la traditionnelle procédure de post-traitement informatique, l'analyse des données peut être directement implémentée pendant la mesure. Cette prouesse rend l'imagerie Raman extrêmement rapide en utilisant seulement une "pincée de photons". En effet, en utilisant comme détecteur à pixel unique un compteur de photons digital (tel qu'un SPAD, *single-photon avalanche diode*), le temps d'acquisition d'une image de  $512^2$  pixels peut atteindre 0,1 seconde [2].

### PERSPECTIVES

Bien que les vitesses d'acquisition aient considérablement augmenté avec l'avènement de l'imagerie hyperspectrale compressive, l'analyse rapide des données reste un défi majeur. Un résultat très récent a montré que l'imagerie à cadence vidéo au moyen de méthodes de contraste chimique à bas coût (le processus Raman spontané) est à portée de main [2], mais nécessite toujours de connaître au préalable les spectres des espèces chimiques de l'échantillon. Lorsqu'aucun a priori

sur l'échantillon n'est disponible, l'imagerie chimique aveugle a également été accélérée par une approche compressive utilisant le même formalisme mathématique que la plateforme Netflix pour reconstruire une matrice de données (recommandations de films ou spectres chimiques) à partir de quelques informations (notations de films ou mesures de points spatio-spectraux) [3].

À l'ère du Big Data, les réseaux neuronaux représentent une possibilité de stratégie d'analyse des données. En effet, un succès remarquable d'une telle méthode a été démontré, conduisant à l'acquisition et au traitement de données hyperspectrales compressées à une cadence vidéo, en ne reposant que sur des a priori minimes sur le système [4].

### CONCLUSION

L'imagerie hyperspectrale aborde divers domaines d'application allant de la recherche fondamentale aux applications. Son intérêt provient du haut degré de caractérisation rendu possible. Néanmoins, l'augmentation de la dimension des

données qu'elle entraîne amène des difficultés, en particulier en raison du grand nombre de données générées. Avec la croissance de la capacité de calcul des ordinateurs modernes, des méthodes d'imagerie computationnelle émergent pour relever ces défis. Nous avons brièvement introduit le domaine émergent de l'imagerie Raman compressive, qui ouvre la voie à l'imagerie microscopique à haut débit en accélérant l'ensemble du processus d'imagerie hyperspectrale. En effet, au lieu d'un instrument hyperspectral passif, le système optique conçu opère un déchiffrement chimique intelligent, transférant l'analyse en post-traitement directement à l'étape d'acquisition. L'imagerie Raman compressive promet la mise à disposition d'un dispositif rentable d'imagerie hyperspectrale en temps réel, avec des perspectives pour des domaines incluant l'imagerie biomédicale dynamique, l'imagerie ultrarapide de réactions chimiques dans des matériaux, ou encore les contrôles de qualité en ligne de recyclage ou de production pharmaceutique [5]. ●

### RÉFÉRENCES

- [1] H. Lin and H. B. de Aguiar, "Compressive Raman microspectroscopy," in *Stimulated Raman Scattering Microscopy: Techniques and Applications*, Elsevier (2021)
- [2] C. Gentner et al., arXiv:2301.07709 (2023)
- [3] F. Soldevila et al., *Optica* 6, 3, 341 (2019)
- [4] M. Yako et al., *Nature Photonics* 17, 218 (2023)
- [5] C. Grand et al., *Anal. Chem.* 94, 16632–16637 (2022)