

SEGMENTATION D'IMAGES SPECTRALES À L'AIDE D'UN ALGORITHME HIÉRARCHIQUE AVEC CONTRAINTE SPATIALE

Agnès Grimaud¹ & Gilles Celeux² & Serge Cohen³

¹ *Laboratoire de Mathématiques de Versailles, UVSQ, CNRS, Université Paris-Saclay, 78035 Versailles, France, agnes.grimaud@uvsq.fr*

² *Inria Saclay-Île-de-France, IMO campus d'Orsay 91405 Orsay, gilles.celeux@inria.fr*

³ *IPANEMA, CNRS, ministère de la Culture, UVSQ, MNHN, USR3461, Université Paris-Saclay, 91192 Gif-sur-Yvette, France, serge.cohen@ipanema.fr*

Résumé. La caractérisation des matériaux anciens conduit à l'exploitation de données d'imagerie spectrale. La richesse d'information fournie par l'acquisition et l'exploitation d'un spectre complet est déterminante pour caractériser les détails des matériaux anciens, hétérogènes et d'une grande complexité. Ces images font souvent plusieurs GO, voire dizaine de GO et il importe d'avoir des algorithmes d'analyse performants. Nous proposons une procédure de classification hiérarchique des dissimilarités spectrales permettant de prendre en compte les proximités spatiales des pixels. Cette procédure est appliquée sur une image spectrale d'un fossile de poisson.

Mots-clés. Segmentation d'images spectrales, critère de Ward, contrainte spatiale, matériaux anciens, fluorescence de rayon X.

Abstract. The characterization of ancient materials leads to the exploitation of spectral imagery data. Spectral images are quite useful to describe the complex details of ancient materials. But, the size of spectral images is several GO and efficient algorithms are required to analyze them. A hierarchical classification procedure of spectral dissimilarities allowing to take into account the spatial proximities between the pixels is proposed. This algorithm is applied to a fish fossil spectral image.

Keywords. Spectral Image Segmentation, Ward criterion, spatial constraint, ancient material, X-ray fluorescence

1 Contexte de l'imagerie spectrale de matériaux anciens

En fluorescence de rayon X (*XRF*), on mesure l'énergie des photons émis par le matériau quand celui-ci est soumis à un rayonnement incident monochromatique. Le détecteur utilisé quantifie l'énergie de chacun des photons reçu et produit donc un histogramme en effectif de photons. Les classes de cet histogramme sont appelés canaux ou canaux d'énergie puisque les photons sont discriminés suivant le critère de leur énergie ; et l'histogramme lui même est appelé spectre. Le signal *XRF* est avant tout caractéristique de la composition élémentaire de l'élément de volume

illuminé par le rayon incident et l'imagerie de XRF permet donc d'obtenir une information spatialisé de la composition des matériaux constituant le matériaux. Pour obtenir ces images, le rayon incident balaye l'échantillon, pixel par pixel, de sorte qu'on obtient un spectre en chaque pixel.

Parce que le phénomène de fluorescence est un processus stochastique, le spectre mesuré est l'estimation empirique de la loi de ce processus. Au lieu d'analyser le signal à l'aide d'outils « génériques » pour les espaces euclidiens, il est avantageux de transformer les spectres en lois empiriques, par mise à l'échelle, et d'utiliser les outils développés pour les lois de probabilités. Pour autant ces données sont trop massives pour pouvoir être exploitées avec les outils les plus standard ; typiquement les spectres comprennent quelques milliers de canaux et une image plusieurs dizaines de milliers de pixels. En utilisant le lexique de la statistique, cela revient à traiter d'un problème avec plusieurs dizaines de milliers d'individus, chacun caractérisé par quelques milliers de variables.

2 La méthode proposée

2.1 Notations et définitions

Une image spectrale est constituée de N pixels. Chaque pixel $i \in \{1, \dots, N\}$ est caractérisé par un spectre noté $\mathcal{S}_i = (s_i(p))_{p \in \{1, \dots, P\}}$, où $s_i(p)$ représente le nombre de coups dans le canal p pour le pixel i .

Pour $i \in \{1, \dots, N\}$ et $p \in \{1, \dots, P\}$, nous considérons

$$f_{i,p} = \frac{s_i(p)}{s_{i.}} \text{ et } t_p^i = \frac{s_i(p)}{s_{i.}} \text{ où } s_{i.} = \sum_{p=1}^P s_i(p) \text{ et } s_{..} = \sum_{i=1}^N s_{i.}.$$

Nous souhaitons classer les distributions conditionnelles (ou profils) des pixels $((t_p^i)_{p \in \{1, \dots, P\}}, i \in \{1, \dots, N\})$ par une méthode hiérarchique, le pixel i étant pondéré par $f_{i.} = s_{i.}/s_{..}$, $i \in \{1, \dots, N\}$. Les profils étant des distributions de probabilité, ils sont comparés à l'aide de la distance du χ^2 .

Et pour deux pixels i et j , on a donc

$$d_{\chi^2}^2(\mathcal{S}_i, \mathcal{S}_j) = \sum_{p=1}^P \frac{(t_p^i - t_p^j)^2}{f_{.p}}$$

$$\text{avec } f_{.p} = \sum_{i=1}^N f_{i,p} = \frac{1}{s_{..}} \sum_{i=1}^N s_i(p).$$

2.2 Le critère de Ward

L'espace des spectres associés aux pixels étant muni de la distance du χ^2 , le critère d'agrégation de Ward (1963) δ_{χ^2} est utilisé pour effectuer la classification ascendante hiérarchique. Ce critère

minimise l'inertie intra-classe à chaque étape. Pour deux classes C et C' il s'écrit

$$\delta_{\chi^2}(C, C') = \frac{\mu_C \mu_{C'}}{\mu_C + \mu_{C'}} d_{\chi^2}^2(S_{g_C}, S_{g_{C'}}) \quad (1)$$

avec $\mu_C = \sum_{i \in C} f_i$, le poids de la classe C et S_{g_C} son centre de gravité.

2.3 Prise en compte de la contrainte spatiale

Dans le cas des images spectrales étudiées, la dimension de la matrice des dissimilarités est trop grande pour pouvoir construire directement la hiérarchie avec le critère de Ward. De plus, il est souhaitable que les classes finales soient des unions de sous-classes spatialement connexes. Aussi, dans un premier temps, un algorithme hiérarchique, proposé par Lebart (1978), est utilisé. Celui-ci impose de n'agréger que des classes spatialement voisines. Plus précisément, un pixel a 8 voisins (sauf si il est au bord de l'image) et deux classes C et C' sont spatialement voisines s'il existe $(i, i') \in C \times C'$ tel que i et i' sont des pixels voisins. Ainsi, à chaque étape, seul un petit nombre de dissimilarités doit être calculé.

L'algorithme est donc le suivant :

- Initialisation : calcul des distances entre deux spectres uniquement pour les pixels voisins spatialement.
- À la première étape, les deux pixels voisins ayant la plus petite distance du χ^2 sont agrégés.
- Puis itérer :
 - (i) Mise à jour de la matrice des dissimilarités à l'aide de la formule (1) (pour les classes spatialement voisines).
 - (ii) Agréger les deux classes spatialement voisines ayant le plus petit critère de Ward.

L'utilisation complète de cet algorithme produit à chaque étape des classes spatialement connexes. Cependant, dans les dernières étapes, il n'est pas souhaitable d'imposer cette contrainte. En effet, les classes pertinentes du point de vue paléontologique n'ont aucune raison d'être spatialement connexes. Aussi, nous levons cette contrainte après que J classes spatialement connexes aient été obtenues. Le choix de J fait l'objet de la section suivante. Indiquons simplement ici que J doit être grand.

Pour finir, à partir de ces J classes, nous proposons d'utiliser une classification hiérarchique ascendante standard à l'aide du critère de Ward. Les classes finales proposées au paléontologue seront donc des unions de classes spatialement connexes.

3 Choix de l'étape J de basculement

Pour choisir l'étape J où la contrainte spatiale est levée dans l'algorithme hiérarchique, nous avons proposé un critère réalisant un compromis entre conservation de l'inertie inter-classe et

homogénéité des classes.

Ce critère consiste à maximiser la fonction suivante : $F(J) = B(J) + \alpha C(J)$, avec $\alpha \in \mathbb{R}_+$, $B(J)$ l'inertie inter-classe de la partition des pixels en J classes et $C(J)$ une mesure de l'homogénéité spatiale de cette partition. Comme Ambroise et Govaert (1998), nous considérons

$$C(J) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_{ik} c_{jk} v_{ij}$$

où $v_{ij} = 1$ si i et j sont spatialement voisins, et 0 sinon (avec $v_{ii} = 0$ par convention) et $c_{ik} = 1$ si $i \in C_k$ et 0 sinon.

Le scalaire α règle l'équilibre entre $B(J)$ et $C(J)$. Si la partition a N classes, nous obtenons $C(N) = 0$ et à l'autre extrême $C(1) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N v_{ij} \approx \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N 8 = 4N$. (Nous nous plaçons ici dans la situation simplifiée où chaque pixel a 8 voisins.)

Supposant l'équilibre entre ces deux situations extrêmes, $F(N) = F(1)$ conduit à $\alpha = \frac{T}{4N}$, T étant l'inertie totale de l'ensemble des pixels. Ainsi, le critère s'écrit

$$F(J) = B(J) + \frac{T}{4N} C(J).$$

Cependant, ce choix pour α conduit à choisir $J_{\max}$ (valeur de J maximisant F) trop grand, comme nous avons pu le constater dans l'étude du jeu de données de l'image d'un fossile de poisson. Pour obtenir un choix de J plus pertinent, la règle du *un écart type* proposée par Breiman et al. (1984) est utilisée pour couper un arbre de décision judicieusement. Cette procédure consiste à calculer $F(K)$ pour $K = N, \dots, 1$, puis à calculer l'écart type $\text{sd}(F)$ des $(F(K))_{K=N, \dots, 1}$ et à choisir le plus petit $\hat{J}$ tel que

$$F(\hat{J}) \geq F(J_{\max}) - \text{sd}(F).$$

Sur le jeu de données, ce critère sera comparé avec une règle du coude.

4 Étude sur un jeu de données

L'algorithme proposé a été implanté sous R puis appliqué à un jeu de données constitué d'une image spectrale de fossile plat d'un poisson du Crétacé datant d'environ 100 millions d'années. Cette image est constituée de $N = 241 \times 211 = 50851$ pixels et pour chaque pixel, le spectre associé contient $P = 1780$ valeurs. Les données sont stockées dans un fichier de 1.7 Go.

À la figure 1, se trouvent les résultats obtenus pour 6 classes finales. L'image de gauche a été obtenue en effectuant une classification à l'aide de l'algorithme proposé en ne regroupant que des classes spatialement voisines tout au long des étapes. Sur l'image de droite, se trouvent les

résultats obtenus à l'aide de l'algorithme proposé en agrégeant des classes spatialement voisines jusqu'à l'itération 45 000 (cela correspondant à $J = 5851$). Puis une classification standard à l'aide du critère de Ward a été effectuée jusqu'à la fin.

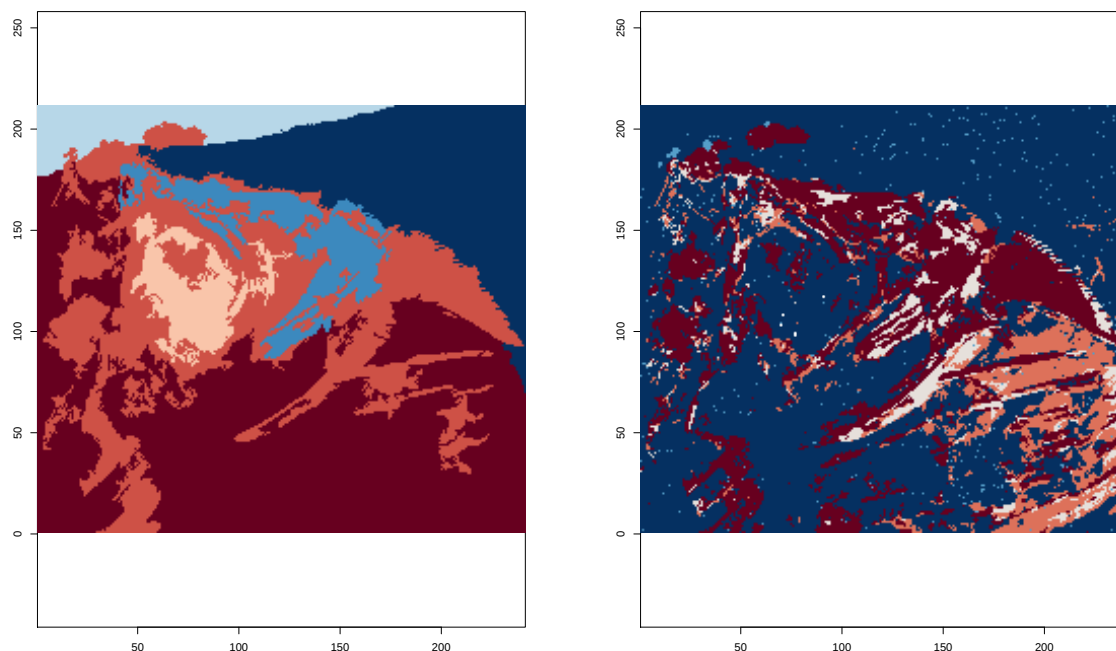


FIGURE 1 – Résultats obtenus pour six classes finales. À gauche : regroupement uniquement de classes spatialement voisines. À droite : fin de l'algorithme proposé avec critère de Ward standard.

Bibliographie

- Ambroise, M. et Govaert, G. (1998), Convergence of an EM-type algorithm for spatial clustering, *Pattern recognition letters*, 19, 919–927.
- Breiman L., Friedman J., Stone C. J. et Olshen R. A. (1984) *Classification and Regression Trees*, Taylor & Francis.
- Lebart, L. (1978), Programme d'agrégation avec contrainte, *Cahiers de l'analyse des Données*, 3, 275–287.
- Ward, J. H. (1963), Hierarchical grouping to optimize an objective function, *Journal of the American Statistical Association*, 58, 236–244.