

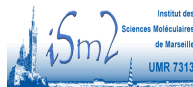
# Régularisation mixte et parcimonie pour la séparation aveugle de sources en spectroscopie RMN 2D

Afef CHERNI<sup>\*</sup>, Caroline CHAUX <sup>\*</sup>

<sup>\*</sup> Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, I2M, Marseille, France.

Projet: A\*midex BIFROST

**GRETSI 2019, Lille 26-29 Aout.**



## En collaboration avec



E. PIERSANTI\*



M. YEMLOUL\*



L. SHINTU\*

\* Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, iSM2, Marseille, France.

# Plan

- Introduction
- Séparation de sources
- Approche proposée
- Résultats expérimentaux
- Conclusion & perspectives

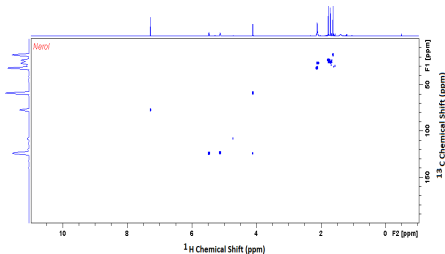
# Introduction

## ■ RMN 2D de type HSQC :

- Résonance Magnétique Nucléaire : une méthode d'analyse de la matière.
- Déterminer la structure et la composition moléculaire d'un mélange donné.
- HSQC : Heteronuclear Single Quantum Coherence spectroscopy.

## ■ Utilités :

- Chimie organique
- Diagnostic médical
- Analyse pharmaceutique
- etc.



Exemple du spectre RMN 2D.

# Introduction

## ■ Problématique :

✗ Les spectres RMN sont caractérisés par un degré de parcimonie élevé.

✗ La composition compliqué du mélange produit un spectre RMN chevauché.

✗ La grande dimension des spectres RMN 2D présente une complexité de calcul importante.

## ■ Objectif :

✓ Identifier **efficacement** les sources à partir du mélange composé.

# Modélisation du problème

$$\mathbf{X} = \mathbf{AS} + \mathbf{B} \quad (1)$$

- $\mathbf{X} = (x_{m,\ell}) \in \mathbb{R}^{M \times L}$  : Mélanges observés
- $\mathbf{S} = (s_{n,\ell}) \in \mathbb{R}^{N \times L}$  : Sources à estimer
- $\mathbf{A} = (a_{m,n}) \in \mathbb{R}^{M \times N}$  : Matrice de mélange à estimer
- $\mathbf{B} = (b_{m,\ell}) \in \mathbb{R}^{M \times L}$  : Bruit d'acquisition

$$x_{m,\ell} = \sum_{n=1}^N a_{m,n} s_{n,\ell} + b_{m,\ell} \quad (2)$$

✗  $a_{m,n} > 0$  : concentration relative de la source  $n$  dans le mélange  $m$   
 ⇒ Contrainte de positivité  $\mathbf{A} \geq 0$

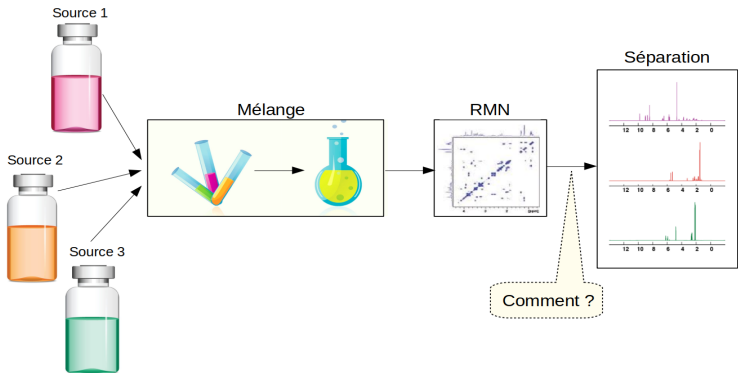
✗  $s_{n,\ell} > 0$  : coefficient de la source  $n$  de  $K$  échantillons non nuls  
 ⇒ Contrainte de parcimonie :  $\text{supp}(\mathbf{S}) = K \ll L$

✗ Indéterminations du problème : Si  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{S}$  existent :

$$(\exists \Lambda \in \mathbb{R}^{M \times M}) \quad \mathbf{A}' = \mathbf{A}\Lambda \quad \text{et} \quad \mathbf{S}' = \Lambda^{-1}\mathbf{S}$$

# Séparation de sources

## ■ Principe [Comon and Jutten, 2010]



# Séparation de sources

## ■ Méthodes proposées :

- ▶ **NMF** : Factorisation par matrices nonnégatives  
[Lee and Seung, 1999]

$$\underset{\mathbf{A}, \mathbf{S}}{\text{minimiser}} \quad \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{AS}\|_F^2 \quad \text{tel que } \mathbf{A} \geq 0, \mathbf{S} \geq 0 \quad (3)$$

- ▶ Approche variationnelle

$$\underset{\mathbf{A}, \mathbf{S}}{\text{minimiser}} \quad \underbrace{\frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{AS}\|_F^2}_{\text{Terme de fidélité}} + \underbrace{\lambda_{\mathbf{A}} \Psi_{\mathbf{A}}(\mathbf{A})}_{\text{Régularisation sur } \mathbf{A}} + \underbrace{\lambda_{\mathbf{S}} \Psi_{\mathbf{S}}(\mathbf{S})}_{\text{Régularisation sur } \mathbf{S}} \quad (4)$$



# Choix classiques

## ■ Positivité :

- Fonction indicatrice

$$(\forall \mathbf{Z} = (z_i) \in \mathbb{R}^L) \quad \ell_+ : z_i \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{si } z_i \geq 0 \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

## ■ Parcimonie :

- Pseudo-norme  $\ell_0$

$$\ell_0(\mathbf{Z}) = \#\{i, z_i \neq 0\}$$

- Norme  $\ell_p$  ( $p > 0$ )

$$\ell_p(\mathbf{Z}) = \sum_i |z_i|^p$$

- Entropie

$$\text{Ent}(z_i) = \begin{cases} z_i \log z_i & \text{si } z_i > 0, \\ 0 & \text{si } z_i = 0, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

# Nouvelle proposition

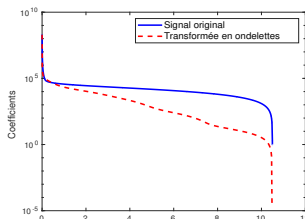
- Principe : Régularisation hybride  
[Cherni et al., 2016, Cherni et al., 2017]

$$\underset{\mathbf{A}, \mathbf{S}}{\text{minimiser}} \quad \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{AS}\|_F^2 + \Psi_{\mathbf{A}}(\mathbf{A}) + \Psi_{\mathbf{S}}(\mathbf{S}) \quad (5)$$

$$\text{tel que : } \begin{cases} \Psi_{\mathbf{A}}(\mathbf{A}) &= \iota_+(\mathbf{A}) \\ \Psi_{\mathbf{S}}(\mathbf{S}) &= \lambda_{\mathbf{S},1} \ell_1(\mathbf{WS}) + \lambda_{\mathbf{S},2} \text{Ent}(\mathbf{S}) \end{cases}$$

où  $\mathbf{W}$  : transformée en ondelettes.

- ▶  $\iota_+$  : régularisation efficace de positivité.
- ▶  $\ell_1$  : norme de parcimonie convexe.
- ▶  $\mathbf{W}$  : la transformée en ondelettes renforce la parcimonie.



# Outils d'optimisation

## ■ Forme générique d'optimisation alternée :

Pour  $k = 0, 1, \dots$

$$\left[ \begin{array}{l} \mathbf{A}_{k+1} = \underset{\mathbf{A}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{A}\mathbf{S}_k\|_F^2 + \Psi_{\mathbf{A}}(\mathbf{A}) \end{array} \right. \quad (I)$$

$$\left[ \begin{array}{l} \mathbf{S}_{k+1} = \underset{\mathbf{S}}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{A}_{k+1}\mathbf{S}\|_F^2 + \Psi_{\mathbf{S}}(\mathbf{S}) \end{array} \right. \quad (II)$$

$$\left[ \begin{array}{l} \text{Si } \|\mathbf{A}_{k+1}\mathbf{S}_{k+1} - \mathbf{X}\|^2 \leq \epsilon : \hat{\mathbf{A}} = \mathbf{A}_{k+1} \text{ et } \hat{\mathbf{S}} = \mathbf{S}_{k+1} \end{array} \right.$$

▷ L'algorithme BC-VMFB [Chouzenoux et al., 2016]  
[Cherni et al., 2019]

## Opérateur proximal

Soit  $\Psi : \mathbb{R} \rightarrow ]-\infty, +\infty]$  une fonction propre, semi-continue inférieurement, non nécessairement convexe. L'opérateur proximal de  $\Psi$  en  $v \in \mathbb{R}^N$  relatif à la métrique notée  $\mathbf{P}$  est donné par [Moreau, 1965]

$$\operatorname{prox}_{\Psi, \mathbf{P}} : v \rightarrow \underset{w \in \mathbb{R}^N}{\operatorname{Argmin}} \left( \Psi(w) + \frac{1}{2} \|w - v\|_{\mathbf{P}}^2 \right) \quad (6)$$

# Outils d'optimisation

## (I) : Estimer $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A}_{k+1} = \text{prox}_{\Psi_{\mathbf{A}}} (\mathbf{A}_k - \gamma(\mathbf{A}_k \mathbf{S}_k - \mathbf{X}) \mathbf{S}_k^T) \quad (7)$$

- $\gamma$  pas du gradient.
- $(.)^T$  : opérateur transposé.
- ✓  $\text{prox}_{\ell_+} = \Pi_+$  : projection sur l'espace des réels non-négatifs.

## (II) : Estimer $\mathbf{S}$

$$\mathbf{S}_{k+1} = \text{prox}_{\gamma^{-1}\mathbf{P}, \Psi_{\mathbf{S}}} (\mathbf{S}_k - \gamma \mathbf{A}_{k+1}^T (\mathbf{A}_{k+1} \mathbf{S}_k - \mathbf{X})) \quad (8)$$

○  $\mathbf{P}$  : .

✗  $\text{prox}_{\gamma^{-1}\mathbf{P}, \Psi_{\mathbf{S}}}$  : non-explicite

- ▷ L'algorithme PPXA (Parallel Proximal algorithm)  
[Combettes and Pesquet, 2011]

# Application

## ■ Jeux de données :

- 4 sources (**S**) : (S1) Limonene, (S2) Nerol, (S3)  $\alpha$ -Terpinolene, (S4)  $\beta$ -Caryophyllene.
- Chaque source ( $S_i$  ( $i=1\dots 4$ )) de dimension ( $1024 \times 2048$ )
- Matrice de mélange **A** de dimension ( $5 \times 4$ ).
- Mélanges simulés selon le modèle ( $\mathbf{X} = \mathbf{AS} + \mathbf{B}$ ) de dimension ( $5 \times 1024 \times 2048$ ).

## ■ Paramètres :

- Technique de matricisation (3 dimensions  $\Rightarrow$  2 dimensions)
- Nombre d'itérations de BCVMFB :
- Initialisation du BCVMFB : JADE (Joint Approximate Diagonalization of Eigen matrices) [Pham, 2001]
- Nombre d'itérations du PPXA :

# Résultats

- SIR (Source to Interferences Ratio) [Vincent et al., 2006]
- SDR (Source to Distortion Ratio) [Vincent et al., 2006]

		$\Psi_S$ avec $(\lambda_{S,1}, \lambda_{S,2})$			
Source		$\lambda_{S,1} = 0$	$\lambda_{S,1} < \lambda_{S,2}$	$\lambda_{S,1} = \lambda_{S,2}$	$\lambda_{S,2} = 0$
SIR	1	42.91	42.72	43.03	39.35
	2	44.04	44.44	45.67	39.51
	3	33.19	33.32	35.40	37.32
	4	36.97	38.25	43.46	35.79
SDR	1	21.87	22.02	22.12	22.26
	2	19.72	20.05	20.22	20.39
	3	18.36	18.81	19.06	19.38
	4	14.96	15.38	15.89	16.32

Résultats avec différents choix des paramètres de régularisation  
 $\lambda_{S,1}$  et  $\lambda_{S,2}$

# Résultats

- SAR : "Source to Artifacts Ratio" [Vincent et al., 2006]
- Indexe d'amari [Moreau and Macchi, 1994]

		$\Psi_S$ avec $(\lambda_{S,1}, \lambda_{S,2})$			
Source		$\lambda_{S,1} = 0$	$\lambda_{S,1} < \lambda_{S,2}$	$\lambda_{S,1} = \lambda_{S,2}$	$\lambda_{S,2} = 0$
SAR	1	21.90	22.05	22.16	22.34
	2	19.74	20.07	20.23	20.44
	3	18.50	18.97	19.16	19.45
	4	14.99	15.51	15.89	16.37
Amari index		14.99	15.51	15.89	16.37

Résultats avec différents choix des paramètres de régularisation  
 $\lambda_{S,1}$  et  $\lambda_{S,2}$

## Conclusion & perspectives

- ✓ Nouvelle fonction de régularisation pour la séparation de sources.
- ✓ Application efficace en RMN 2D de type HSQC.

- ▶ Utilisation de l'entropie généralisée (Entropie de Renyi).
- ▶ Optimiser les paramètres de régularisations.



# Références |



Cherni, A., Chouzenoux, E., and Delsuc, M.-A. (2016).

Proximity operators for a class of hybrid sparsity+ entropy priors application to dosy NMR signal reconstruction.

*In Int Symp on Image Video Communications*, pages 120–125.



Cherni, A., Chouzenoux, E., and Delsuc, M.-A. (2017).

Palma, an improved algorithm for dosy signal processing.

142(5) :772–779.



Cherni, A., Piersanti, E., Anthoine, S., Chau, C., L., S., Yemloul, M., and Torrèsani, B. (2019).

Challenges in the decomposition of 2d nmr spectra of mixtures of small molecules.

*PREPRINT*.



Chouzenoux, E., Pesquet, J.-C., and Repetti, A. (2016).

A block coordinate variable metric forward–backward algorithm.

66(3) :457–485.



Combettes, P. L. and Pesquet, J.-C. (2011).

Proximal splitting methods in signal processing.

*In Fixed-point algorithms for inverse problems in science and engineering*, pages 185–212.

Springer.



Comon, P. and Jutten, C. (2010).

*Handbook of Blind Source Separation : Independent component analysis and applications*.

Academic press.

# Références ||



Lee, D. D. and Seung, H. S. (1999).  
Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization.  
*Nature*, 401 :788–791.



Moreau, E. and Macchi, O. (1994).  
A one stage self-adaptive algorithm for source separation.  
volume iii, pages III/49–III/52 vol.3.



Moreau, J.-J. (1965).  
Proximité et dualité dans un espace hilbertien.  
93 :273–299.



Pham, D. T. (2001).  
Joint approximate diagonalization of positive definite hermitian matrices.  
22(4) :1136–1152.



Vincent, E., Gribonval, R., and Févotte, C. (2006).  
Performance measurement in blind audio source separation.  
14(4) :1462–1469.

Merci pour votre attention !

# Régularisation mixte et parcimonie pour la séparation aveugle de sources en spectroscopie RMN 2D

Afef Cherni<sup>\*</sup>, Caroline Chaux<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup> Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, I2M, Marseille, France.

Projet : A\*midex BIFROST

<http://www.i2m.univ-amu.fr/project/bifrost/>

