

Traitement du signal aveugle

**Master Mathématiques et Applications
M2, parcours MI3S
Aix-Marseille Université**

B. Torrèsani

Année 2017-18

Table des matières

1	Généralités	5
1.1	Bases de la séparation aveugle, cas linéaire	6
1.1.1	Le problème du mélange linéaire instantané	6
1.1.2	Quelques remarques	6
1.1.3	Résolution	7
1.1.4	Généralisations	7
1.2	Quelques outils	7
1.2.1	Algèbre linéaire et multilinéaire	7
1.2.2	Probabilités, modèles gaussiens, moments, cumulants	9
1.2.3	Théorie de l'information	14
1.3	SVD, ACP et transformation de Karhunen-Loève	17
1.3.1	Décomposition de Karhunen-Loève	17
1.3.2	Utilisation de l'analyse en composantes principales	19
1.3.3	Application	20
1.4	Exercices	23
2	ICA : analyse en composantes indépendantes	25
2.1	Formulation du problème, contraste	25
2.1.1	Analyse à l'ordre deux	25
2.1.2	Contraste	26
2.2	Méthodes basées sur un pré-blanchiment	29
2.2.1	Pré-blanchiment	29
2.2.2	Algorithmes	30
2.2.3	CoM2	32
2.2.4	Jade et JadeR	33
2.2.5	Algorithmes de déflation	33
2.2.6	Autres approches	33
2.2.7	Remarque sur l'identifiabilité	34
2.3	Exercices	37
3	SOBI et variantes : identification à l'ordre 2	39
3.1	Modèle de sources colorées	39
3.1.1	Processus stationnaires et sources colorées	39
3.1.2	Mélanges de sources colorées	42
3.1.3	Questions d'identifiabilité	43

3.2	Estimation des matrices d'autocorrélation, estimation spectrale	43
3.2.1	Matrices d'autocorrélation	43
3.2.2	Estimation spectrale	44
3.3	Séparation de sources colorées	45
3.3.1	Pré-blanchiment, réduction de dimension	46
3.3.2	Algorithmes de séparation : AMUSE et SOBI	46
3.4	Exercices	46
4	NMF : factorisation en matrices non-négatives	49
4.1	Position du problème	49
4.2	Fonction objectif quadratique	50
4.2.1	Un algorithme simple : moindres carrés projetés alternés	50
4.2.2	Gradient projeté	53
4.2.3	Algorithmes multiplicatifs	53
4.3	Une famille de divergences : les β -divergences, et les algorithmes multiplicatifs correspondants	55
4.3.1	β -divergences	55
4.3.2	Algorithmes "Majoration-Minimisation"	57
4.3.3	β -NMF et algorithmes multiplicatifs	57
4.4	Exercices	60
5	Solutions des exercices	61
5.1	Généralités	61
5.2	Analyse en composantes indépendantes	66
5.3	Identification à l'ordre deux	68
5.4	NMF	70

Généralités

Le traitement du signal aveugle s'adresse à des situations dans lesquelles on est confronté à des observations qui sont des mélanges de signaux, ou sources, d'intérêt inconnues, la nature du mélange étant elle-même inconnue. Ce problème peut être vu soit comme un problème de traitement du signal, soit comme un problème de statistique, comme peuvent l'illustrer les deux exemples ci-dessous.

Exemple 1.1 (Le problème de "Cocktail Party"). Dans une pièce fermée, plusieurs personnes discutent simultanément, de sorte qu'un auditeur entend la superposition de plusieurs sons de voix. Le problème idéalisé est alors, partant de quelques enregistrements (c'est à dire quelques micros placés en des positions distinctes) de reconstituer les discussions individuelles.

Exemple 1.2 (Expression de gènes). Les expériences de *puce à ADN* consistent à mesurer ce que l'on appelle le *niveau d'expression* de milliers de gènes dans des conditions données (par exemple dans des échantillons biologiques prélevés sur différents sujets atteints de pathologies proches). Par niveau d'expression, on entend des mesures de la quantité d'ARN messenger produit par chaque gène lors de la transcription. On fait parfois l'hypothèse qu'il existe des *voies de régulation*, qui sont des processus sous-jacents impliquant des niveaux d'expression donnés des gènes considérés, et on suppose que dans chaque condition ces processus sont actifs avec une certaine intensité. Il s'agit alors d'essayer d'identifier ces voies à partir d'un certain nombre de conditions dans lesquelles elles sont donc *mélangées*, ce qui est un problème assez similaire au précédent.

On pourra trouver de nombreux autres exemples dans les textes de référence, par exemple [4] et [7], ou encore [14].

Plus généralement, le problème de traitement aveugle s'adresse à des situations que l'on peut qualifier de systèmes *entrées multiples et sorties multiples* (aussi appelé MIMO, pour *Multiple input Multiple Output*, où

- On dispose de N observations $X_n, n = 1, \dots, N$, chacune avec L répétitions $x_{n\ell}$
- Les observations proviennent de M sources $S_m, m = 1, \dots, M$, avec un modèle de mélange

$$X_n = \Phi_n(S_1, \dots, S_M),$$

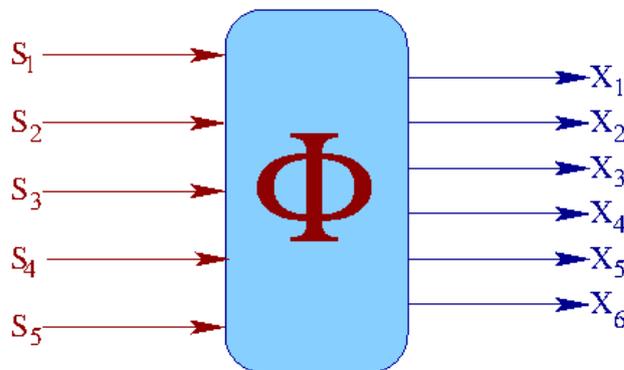


FIGURE 1.1 – Mélange $X = \Phi(S)$

- Les fonctions d'observation Φ_n sont inconnues
- On dispose d'informations sur les sources et/ou les fonctions d'observation, ces informations pouvant être quantitatives, ou qualitatives.

1.1 Bases de la séparation aveugle, cas linéaire

On donne ici les éléments principaux nécessaires : modélisation, notations,...

1.1.1 Le problème du mélange linéaire instantané

On dispose d'observations, organisées sous forme de N vecteurs "ligne" $X_n \in \mathbb{R}^L$, eux mêmes regroupés dans une matrice $\underline{X} \in \mathcal{M}_{N,L}$. Ces observations sont censées provenir de mélanges (linéaires, instantanés) de M signaux source $S_m \in \mathbb{R}^L$, via une équation de la forme

$$\underline{X} = A\underline{S}, \quad \text{soit} \quad x_{nl} = \sum_{m=1}^M a_{nm}s_{ml}, \quad (1.1)$$

où $A \in \mathcal{M}_{N,M}$ est la **matrice de mélange**, et où $\underline{S} \in \mathcal{M}_{M,L}$ regroupe les sources.

Le problème posé est d'identifier la matrice des sources S (ou la matrice de mélange A) partant de X . Pour cela, on est amené à faire un certain nombre d'hypothèses, que l'on exprime sous forme de modèles.

Remarque 1.1 (Notations). Dans ce cours, on fait le choix de noter les matrices de données avec des symboles soulignés, par exemple \underline{X} ou \underline{S} . Dans certains modèles, on suppose que les colonnes des matrices de données sont des réalisations (souvent identiquement distribuées) de vecteurs aléatoires, qu'on notera avec le même symbole, sans le souligner. Par exemple, les colonnes de \underline{X} et \underline{S} seront alors modélisées comme des réalisations de vecteurs aléatoires X et S .

1.1.2 Quelques remarques

1. **Indétermination** : étant donnée n'importe quelle matrice inversible $\Gamma \in \mathcal{M}_M$, on peut écrire

$$X = AS = A\Gamma\Gamma^{-1}S,$$

de sorte que la factorisation ne peut être unique, sans hypothèse supplémentaire.

- En particulier, si Γ est diagonale, l'équation ci-dessus s'écrit

$$x_{nl} = \sum_{m=1}^M a_{nm}s_{ml} = \sum_{m=1}^M \gamma_m a_{nm} \frac{s_{ml}}{\gamma_m}.$$

Le choix de γ peut être fixé par une normalisation, soit des lignes de S soit des colonnes de A . Ainsi, il ne sera possible d'identifier les sources qu'à un facteur multiplicatif près.

- Dans le même ordre d'idées, le cas $\Gamma = \Pi$ d'une matrice de permutation (une matrice constituée de 0 et de 1 telle que chaque ligne et chaque colonne contienne exactement un 1) montre qu'il n'est pas possible d'identifier l'ordre des sources. N'importe quel algorithme ne pourra identifier les sources qu'à une permutation près, et une opération supplémentaire sera nécessaire s'il faut ordonner les sources d'une façon ou d'une autre.
2. **Identifiabilité** : La matrice d'observations contient NL coefficients. Les deux matrices inconnues A et S contiennent respectivement MN et ML coefficients. On ne peut donc pas espérer résoudre le problème si $M(N + L) > NL$

1.1.3 Résolution

Il y a plusieurs façons (complémentaires) d'aborder ce type de problème de séparation linéaire.

- On peut le voir comme un problème de **factorisation** de la matrice des observations : chercher des matrices de rang faible A et S telles que $X = AS$. On verra quelques exemples de telles approches.
- On peut également formuler le problème comme un problème de recherche d'une **matrice de dé-mélange**, solution d'un problème d'optimisation bien choisi, et une estimation \mathbf{Y} des sources est alors obtenue via

$$Y = BX .$$

- On peut le poser comme un problème d'estimation de la matrice de mélange. Dans ce cas là, étant donnée une estimation \hat{A} , les sources estimées correspondantes peuvent s'obtenir en utilisant le pseudo-inverse de A (voir Définition 1.1 un peu plus loin).

$$Y = A^\dagger X .$$

1.1.4 Généralisations

Mélanges convolutifs

Les mélanges convolutifs constituent des exemples simples de mélanges non instantanées. On parle de mélange convolutif lorsque les observations sont de la forme

$$x_{nl} = \sum_{m,k} a_{nmk} s_{m,\ell-k} , \quad (1.2)$$

où on voit donc apparaître un produit de convolution dans le terme de droite. Les mélanges convolutifs sont plus difficiles à traiter, les principales approches font appel à la transformation de Fourier. On pourra se référer à [4] pour une introduction détaillée.

Mélanges non-linéaires

Les mélanges non-linéaires sont plus complexes encore, leur traitement est possible dans un certain nombre de cas particuliers, comme ce que l'on appelle le cas post non linéaire. Ce cas va au delà du cadre de ce cours, là encore on pourra voir le second volume de [4] pour une introduction.

1.2 Quelques outils

1.2.1 Algèbre linéaire et multilinéaire

On suppose connues les notions classiques d'algèbre linéaire telles que le calcul matriciel, la diagonalisation,... En particulier les éléments ci-dessous sont fondamentaux pour ce qui va suivre. Par défaut on travaillera dans l'espace Hermitien \mathbb{C}^L , muni du produit- Hermitien (scalaire) $\langle X, Y \rangle = Y^T X = \sum_{\ell=1}^L x_\ell \bar{Y}_\ell$. On notera $\mathcal{M}_{N,M}(\mathbb{R})$ (resp. $\mathcal{M}_{N,M}(\mathbb{C})$) l'espace des matrices à N lignes et M colonnes à coefficients réels (resp. complexes), et $\mathcal{M}_N = \mathcal{M}_{N,N}$.

- On note A^T la transposée de A , et $A^* = \bar{A}^T$ la matrice adjointe (ou conjuguée Hermitienne). On dit que A est auto-adjointe (ou Hermitienne) si $A^* = A$, dans ce cas on sait que A est diagonalisable, que ses valeurs propres sont réelles et qu'elle admet une base orthonormée constituée de vecteurs propres.
- On dit que A est semi-définie positive (resp. définie positive) si pour tout $\alpha \in \mathbb{C}^N$, on a $\sum_{m,n=1}^N \alpha_m \bar{\alpha}_n A_{mn} \geq 0$ (resp. $\sum_{m,n=1}^N \alpha_m \bar{\alpha}_n A_{mn} > 0$). Si A est Hermitienne et semi-définie positive (resp. définie positive) alors ses valeurs propres sont positives ou nulles (resp. strictement positives).

Une notion importante est la notion de pseudo-inverse (ou inverse généralisé), qui généralise la notion d'inverse d'une application linéaire ou d'une matrice aux cas non inversibles en lui supprimant certaines propriétés demandées aux inverses.

Définition 1.1 (Pseudo-inverse). *Étant donné une matrice $A \in \mathcal{M}_{N,M}(\mathbb{C})$, son pseudo-inverse est l'unique matrice $A^\dagger \in \mathcal{M}_{M,N}(\mathbb{C})$ vérifiant les conditions suivantes :*

- $AA^\dagger A = A$,
- $A^\dagger AA^\dagger = A^\dagger$,
- $(AA^\dagger)^* = AA^\dagger$,
- $(A^\dagger A)^* = A^\dagger A$.

Il est intéressant de réfléchir à l'interprétation géométrique de ces conditions. On peut par exemple noter que $(AA^\dagger)^2 = AA^\dagger$, et comme AA^\dagger est auto-adjoint, ceci montre que AA^\dagger est un projecteur orthogonal. C'est en fait le projecteur orthogonal sur l'image de A . Avec des arguments similaires, on montre que $A^\dagger A$ est le projecteur orthogonal sur l'image de A^* . L'unicité du pseudo-inverse résulte de ces caractérisations.

Propriétés 1.1. 1. *Le pseudo-inverse d'une matrice nulle est sa transposée (également nulle).*

2. *Le pseudo-inverse d'un vecteur colonne non nul est son vecteur adjoint multiplié par l'inverse de sa norme au carré. En particulier, le pseudo-inverse d'un scalaire (matrice à 1 ligne et 1 colonne) réel ou complexe non nul est son inverse.*

3. *Si le rang de A est égal à son nombre de lignes, $A^\dagger = A^*(AA^*)^{-1}$. A^\dagger est alors un inverse à droite de A .*

4. *Si le rang de A est égal à son nombre de colonnes, $A^\dagger = (A^*A)^{-1}A^*$. A^\dagger est alors un inverse à gauche de A .*

5. *A fortiori si la matrice A est inversible, son pseudo-inverse est son inverse.*

Exemple 1.3. Voici quelques exemples :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}, \quad A^\dagger = \frac{1}{18} \begin{pmatrix} -17 & 8 \\ -2 & 2 \\ 13 & -4 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad AA^\dagger = I_2$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 5 \\ 3 & 6 \end{pmatrix}, \quad B^\dagger = \frac{1}{18} \begin{pmatrix} -17 & -2 & 13 \\ 8 & 2 & -4 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad A^\dagger A = I_2$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}, \quad C^\dagger = \frac{1}{36} \begin{pmatrix} -23 & -6 & 11 \\ -1 & 0 & 2 \\ 19 & 6 & -7 \end{pmatrix}.$$

On pourra noter que dans le dernier cas, C est singulière donc $C^* = C^T$ l'est aussi.

Nous utiliserons aussi des notions d'algèbre multilinéaire, en particulier une forme très élémentaire du calcul tensoriel. En quelques mots, les scalaires et les vecteurs constituent des exemples simples de tenseurs, qu'on appellera respectivement tenseurs d'ordre zéro et d'ordre un. Dans une base donnée un vecteur (tenseur d'ordre 1) peut être représenté par la donnée d'un n -uplet de coordonnées. Les matrices $n \times n$ - qui peuvent représenter suivant les cas des endomorphismes, des bivecteurs ou encore des formes bilinéaires - forment une extension des n -uplets similaire à l'extension que représente les n -uplets par rapport aux scalaires. Les objets descriptibles par des matrices constituent donc les premiers types de tenseurs non triviaux, appelés tenseurs d'ordre 2. En prolongeant la réflexion on peut imaginer, toujours de manière informelle, des cubes $n \times n \times n$, correspondant aux tenseurs d'ordre 3, ou des parallélépipèdes $n_1 \times n_2 \times n_3$ et des hyper-parallélépipèdes d'ordre plus élevé.

Par abus de langage, on définira les tenseurs de la façon suivante :

Définition 1.2. On appelle tenseurs d'ordre K des tableaux à K entrées, dont les éléments sont donc notés

$$T_{i_1, i_2, \dots, i_K} \in \mathbb{R} \text{ (ou } \mathbb{C} \text{)}, \quad i_1 = 1, \dots, I_1, \quad i_2 = 1, \dots, I_2 \quad \dots \quad i_k = 1, \dots, I_K. \quad (1.3)$$

On note $\mathcal{T}_{I_1 I_2 \dots I_K}^{(K)}(\mathbb{C})$ l'ensemble des tenseurs d'ordre K de dimensions I_1, \dots, I_K .

On peut définir les opérations classiques sur de tels tenseurs, à savoir l'addition de deux tenseurs de même ordre et même taille, et la multiplication scalaire, ce qui permet de munir $\mathcal{T}_{I_1 I_2 \dots I_K}^{(K)}(\mathbb{C})$ d'une structure d'espace vectoriel. On définit également des notions de produits, qui vont généraliser le produit matriciel classique. Nous utiliserons en particulier la notion suivante

Définition 1.3 (Produit k -mode). Etant donné un tenseur $T \in \mathcal{T}_{I_1, I_2, \dots, I_K}^{(K)}(\mathbb{C})$ d'ordre K et une matrice $S \in \mathcal{M}_{J_k I_k}(\mathbb{C})$, leur produit k -mode est le tenseur $T \bullet_k S \in \mathcal{T}_{I_1, I_2, \dots, I_{k-1}, J_k, I_{k+1}, \dots, I_K}$ défini par

$$(T \bullet_k S)_{i_1 i_2 \dots i_{k-1} j_k i_{k+1} \dots i_K} = \sum_{i_k=1}^{I_k} T_{i_1 i_2 \dots i_k \dots i_K} S_{j_k i_k} \quad (1.4)$$

Exemple 1.4 (Lien avec le calcul matriciel). Prenons l'exemple de tenseurs d'ordre 2, donc de matrices. On peut montrer que le produit matriciel peut s'écrire, si les matrices sont conformantes (c'est à dire leurs dimensions sont compatibles), sous la forme d'un produit k -mode : si $A \in \mathcal{M}_{MP}(\mathbb{C})$ et $B \in \mathcal{M}_{PN}(\mathbb{C})$, alors

$$AB = B \bullet_1 A = A \bullet_2 B^T, \quad (1.5)$$

où B^T est la transposée de B . Voir Exercice 1.2 pour d'autres exemples.

1.2.2 Probabilités, modèles gaussiens, moments, cumulants

Rappels

Nous aurons besoin ici de notions élémentaires de probabilités. On désignera par $(\mathcal{A}, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espace probabilisé. On note par $\mathcal{L}^0(\mathcal{A}) = \mathcal{L}^0(\mathcal{A}, \mathbb{P})$ l'espace des variables aléatoires sur $(\mathcal{A}, \mathcal{F}, \mathbb{P})$, à valeurs réelles ou complexes. Etant données deux variables aléatoires $X, Y \in \mathcal{L}^0(\mathcal{A})$, on dit que $X \sim Y$ si $X = Y$ presque sûrement. Ceci définit une relation d'équivalence, et on note

$$L^0(\mathcal{A}) = \mathcal{L}^0(\mathcal{A}) / \sim$$

l'espace quotient, c'est à dire l'espace des variables aléatoires différentes presque sûrement. On définit de même les vecteurs aléatoires de dimension N , qui sont des N -uplets de variables aléatoires. Etant donnée une variable aléatoire $X \in L^0$, on en notera $\mathbb{E}\{X\}$ l'espérance.

Définition 1.4. 1. Une variable aléatoire X est dite du second ordre si $\mathbb{E}\{|X|^2\} < \infty$. On notera $L^2(\mathcal{A}, d\mathbb{P})$ l'espace des variables aléatoires du second ordre sur l'espace probabilisé $(\mathcal{A}, \mathcal{F}, \mathbb{P})$.

2. Une variable aléatoire X est dite d'ordre p si $\mathbb{E}\{|X|^p\} < \infty$. On notera $L^p(\mathcal{A}, d\mathbb{P})$ l'espace des variables aléatoires d'ordre p sur l'espace probabilisé $(\mathcal{A}, \mathcal{F}, \mathbb{P})$.

Il est intéressant de noter que $L^2(\mathcal{A}, d\mathbb{P})$ est en fait un espace de Hilbert, grâce au produit Hermitien défini par

$$(X|Y) = \int_{\mathcal{A}} X(a) \overline{Y(a)} d\mathbb{P}(a), \quad X, Y \in L^2(\mathcal{A}, d\mathbb{P}). \quad (1.6)$$

Etant donnée une variable aléatoire du second ordre X , il résulte de l'inégalité de Cauchy-Schwarz que

$$\mathbb{E}\{|X|\} = \int |X(a)| d\mathbb{P}(a) \leq \sqrt{\int |X(a)|^2 d\mathbb{P}(a)} < \infty.$$

Par conséquent, $\mathbb{E}\{X\}$ est aussi bien définie.

Une variable aléatoire réelle X est dite à densité s'il existe une fonction $\rho_X \in L^1(\mathbb{R})$, définie et positive telle que pour tout intervalle $[a, b]$,

$$\mathbb{P}\{a \leq X \leq b\} = \int_a^b \rho_X(x) dx .$$

Plus généralement

Définition 1.5. On appelle densité de probabilité d'un vecteur aléatoire X de dimension N une fonction ρ telle que pour toute partie borélienne $B \subset \mathbb{R}^N$,

$$\mathbb{P}\{X \in B\} = \int_{\mathbb{R}^N} 1_B(u) \rho(u) du = \int_B \rho(u) du . \quad (1.7)$$

Propriétés 1.2. Rappelons que la densité de probabilités est une fonction équivariante dans le sens suivant

1. Dans le cas $d = 1$, si $Y = aX + b$ où $a, b \in \mathbb{R}$, alors

$$\rho_Y(y) = \frac{1}{|a|} \rho_X\left(\frac{y-b}{a}\right) . \quad (1.8)$$

2. Dans le cas général, si $Y = AX + B$, où $B \in \mathbb{R}^N$ et $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ est inversible, alors

$$\rho_Y(y) = \frac{1}{|\det(A)|} \rho_X(A^{-1}(y-B)) . \quad (1.9)$$

Définition 1.6 (Fonction caractéristique). Soit X un vecteur aléatoire de dimension N . Sa fonction caractéristique est la fonction de N variables ϕ_X définie par

$$\Phi_X : u \in \mathbb{R}^N \mapsto \Phi_X(u) = \mathbb{E}\{e^{iX \cdot u}\} , \quad (1.10)$$

Il est possible de démontrer qu'un vecteur aléatoire admet une densité si et seulement si sa fonction caractéristique est absolument intégrable, c'est à dire $\phi_X \in L^1(\mathbb{R}^N)$. Dans ce cas, la densité s'obtient par

$$\rho_X(x) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{\mathbb{R}^N} \Phi_X(u) e^{-iu \cdot x} du . \quad (1.11)$$

Exemple 1.5 (Loi gaussienne). 1. Etant donnés deux réels μ et $\sigma > 0$, une variable aléatoire de loi Gaussienne $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma)$ est définie par la densité de probabilités

$$\rho_X(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2} .$$

On vérifie facilement que $\mathbb{E}\{X\} = \mu$ et $\text{Var}\{X\} = \sigma^2$. La fonction caractéristique de X est donnée par

$$\phi_X(u) = e^{iu\mu} e^{-\frac{1}{2}\sigma^2 u^2} , \quad u \in \mathbb{R} .$$

2. Soit $\mu \in \mathbb{R}^N$ et soit $\Sigma \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ une matrice symétrique définie positive. Une variable aléatoire de loi gaussienne d -dimensionnelle $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ est définie par sa densité (notons que Σ est inversible ici, car définie positive)

$$\rho_X(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N \det(\Sigma)}} e^{-(x-\mu) \cdot \Sigma^{-1} (x-\mu) / 2} .$$

De nouveau on a $\mathbb{E}\{X\} = \mu$, de plus $\mathbb{E}\{(X_k - \mu_k)(X_\ell - \mu_\ell)\} = \Sigma_{k\ell}$.

3. Si maintenant Σ est symétrique, semi-définie positive, elle n'est plus nécessairement inversible (elle ne l'est pas si elle a une valeur propre nulle) et la densité ci-dessus n'existe pas nécessairement. Il est néanmoins possible de définir un vecteur aléatoire gaussien correspondant, via sa fonction caractéristique, qui s'écrit dans tous les cas

$$\Phi_X(u) = e^{iu \cdot \mu - \frac{1}{2}u \cdot \Sigma^{-1}u} .$$

Dans ce cas, $\Phi_X(u) = 1$ pour tout $u \in \mathbb{R}^N$ vecteur propre de Σ associé à une valeur propre nulle.

Exemple 1.6 (Mélange de gaussiennes). 1. Dans le cas univarié, une variable aléatoire X suit une loi de mélange de deux gaussiennes, notée

$$X \sim p\mathcal{N}(\mu, \sigma) + (1-p)\mathcal{N}(\mu', \sigma') ,$$

si X est distribuée suivant $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ avec probabilité p , et suivant une loi $\mathcal{N}(\mu', \sigma')$ avec probabilité $1-p$. Cette définition s'étend sans difficulté à des mélanges de plus de deux lois gaussiennes.

2. Cette définition s'étend sans difficulté aussi au cas de lois multivariées, i.e. variables aléatoires vectorielles.

Moments et cumulants

Définition 1.7 (Moments). Soit $X \in L_N^K(\mathcal{A}, \mathbb{P})$ un vecteur aléatoire de dimension N , réel. Le tenseur des moments d'ordre K de X est le tenseur $\mathcal{M}_X \in \mathcal{T}_N^{(K)}(\mathbb{R})$ défini par

$$(\mathcal{M}_X)_{i_1, \dots, i_K} = \mathbb{E} \{ X_{i_1} X_{i_2} \dots X_{i_K} \} . \quad (1.12)$$

Les moments peuvent être définis de façon équivalente à partir de la fonction caractéristique de X , définie en (1.10), par développement limité par

$$\mathcal{M}_X^{(K)} = (-i)^K [\nabla^K \Phi_X(u)]_{u=0} , \quad (1.13)$$

où $\nabla = (\partial/\partial u_1, \dots, \partial/\partial u_N)^T$ est l'opérateur de gradient.

Exemple 1.7. On voit facilement que les moments d'ordre 1 de X forment la moyenne (vectorielle) de X , et les moments d'ordre deux forment la matrice de corrélation de X :

$$\mathcal{M}_X^{(1)} = \mathbb{E} \{ X \} \in \mathbb{R}^N , \quad \mathcal{M}_X^{(2)} = \mathbb{E} \{ X X^T \} \in \mathcal{M}_2(\mathbb{R}) ,$$

et les moments d'ordre supérieur prennent la forme de tenseurs d'ordre supérieur.

Remarque 1.2. Si X est complexe, un ou plusieurs arguments peuvent être conjugués.

Définition 1.8 (Cumulants). Soit $X \in L_N^K(\mathcal{A}, \mathbb{P})$ un vecteur aléatoire de dimension N , réel. Le tenseur des cumulants d'ordre K de X est le tenseur $\mathcal{C}_X^{(K)} \in \mathcal{T}_N^{(K)}(\mathbb{R})$ défini par

$$\left(\mathcal{C}_X^{(K)} \right)_{i_1, \dots, i_K} = \sum_{Q=1}^K (-1)^{Q-1} (Q-1)! \sum_{\{A_1, \dots, A_Q\} \in \Pi_Q(\{i_1, \dots, i_K\})} \mathbb{E} \left\{ \prod_{i \in A_1} X_i \right\} \mathbb{E} \left\{ \prod_{i \in A_2} X_i \right\} \dots \mathbb{E} \left\{ \prod_{i \in A_Q} X_i \right\} , \quad (1.14)$$

où $\Pi_Q(\{i_1, \dots, i_K\})$ est l'ensemble des partitions de l'index $\{i_1, \dots, i_K\}$ en Q sous-ensembles disjoints.

La formule ci-dessus est appelée formule de Leonov et Shirayev. Au même titre que les moments, les cumulants s'obtiennent aussi par un développement limité

$$\mathcal{C}_X^{(K)} = (-i)^K [\nabla^K \Psi_X(u)]_{u=0} , \quad (1.15)$$

où Ψ_X est la seconde fonction caractéristique du vecteur X , définie par

$$\Psi_X(u) = \ln(\Phi_X(u)) . \quad (1.16)$$

Exemple 1.8. 1. Les cumulants d'ordre un correspondent à la moyenne

$$\mathcal{C}_X^{(1)} = \mathbb{E} \{X\} \in \mathbb{R}^N .$$

2. Les cumulants d'ordre deux forment une matrice égale à la matrice de corrélations :

$$\left(\mathcal{C}_X^{(2)}\right)_{ij} = \mathbb{E} \{X_i X_j\} - \mathbb{E} \{X_i\} \mathbb{E} \{X_j\} ,$$

que l'on écrit aussi

$$\mathcal{C}_X^{(2)} = \mathbb{E} \left\{ (X - \mathbb{E} \{X\}) (X - \mathbb{E} \{X\})^T \right\} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R}) .$$

3. Supposant que X est centré, le tenseur des cumulants d'ordre 3 est donné par

$$\left(\mathcal{C}_X^{(3)}\right)_{ijk} = \mathbb{E} \{X_i X_j X_k\} = \left(\mathcal{M}_X^{(3)}\right)_{ijk} .$$

L'expression générale (sans hypothèse de centrage) fait intervenir davantage de termes.

4. Supposant que X est centré, le tenseur des cumulants d'ordre 4 est donné par

$$\left(\mathcal{C}_X^{(4)}\right)_{ijkl} = \mathbb{E} \{X_i X_j X_k X_\ell\} - \mathbb{E} \{X_i X_j\} \mathbb{E} \{X_k X_\ell\} - \mathbb{E} \{X_i X_k\} \mathbb{E} \{X_j X_\ell\} - \mathbb{E} \{X_i X_\ell\} \mathbb{E} \{X_j X_k\} .$$

En particulier, la diagonale du tenseur des cumulants d'ordre 4 fournit le kurtosis, qui est une mesure standard d'écart à la gaussianité :

$$\left(\mathcal{C}_X^{(4)}\right)_{iiii} = \mathbb{E} \{X_i X_i X_i X_i\} - 3\mathbb{E} \{X_i X_i\}^2 = \text{kurt}(X_i) .$$

Propriétés 1.3. 1. Si X est un vecteur aléatoire réel, les tenseurs des moments et des cumulants sont totalement symétriques : quelle que soit la permutation $\Pi\{i_1, \dots, i_k\}$ de $\{i_1, \dots, i_k\}$, on a

$$\left(\mathcal{M}_X^{(K)}\right)_{\Pi\{i_1, \dots, i_K\}} = \left(\mathcal{M}_X^{(K)}\right)_{\{i_1, \dots, i_K\}} , \quad \left(\mathcal{C}_X^{(K)}\right)_{\Pi\{i_1, \dots, i_K\}} = \left(\mathcal{C}_X^{(K)}\right)_{\{i_1, \dots, i_K\}} . \quad (1.17)$$

Pour le voir, prenons par exemple $\left(\mathcal{M}_X^{(3)}\right)_{ijk} = \mathbb{E} \{X_i X_j X_k\} = \mathbb{E} \{X_k X_i X_j\} = \left(\mathcal{M}_X^{(3)}\right)_{kij}$.

2. Multilinéarité : soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ une matrice, et soit Y la variable aléatoire définie par $Y = AX$. Alors

$$\mathcal{M}_Y^{(K)} = \mathcal{M}_X^{(K)} \bullet_1 A \bullet_2 A \bullet_3 \cdots \bullet_K A , \quad (1.18)$$

et il en va de même pour les cumulants

$$\mathcal{C}_Y^{(K)} = \mathcal{C}_X^{(K)} \bullet_1 A \bullet_2 A \bullet_3 \cdots \bullet_K A . \quad (1.19)$$

3. Si X admet une densité ρ_X qui est une fonction paire, i.e. $\rho(-x) = \rho(x)$, alors tous les moments et cumulants impairs sont nuls.

4. S'il existe un sous-ensemble de composantes X_1, \dots, X_I indépendantes des autres composantes, alors $(\mathcal{C}_X^{(I)})_{1\dots I} = 0$.

5. Soient X, Y deux vecteurs aléatoires indépendants. Alors pour tout K ,

$$\mathcal{C}_{X+Y}^{(K)} = \mathcal{C}_X^{(K)} + \mathcal{C}_Y^{(K)} . \quad (1.20)$$

A noter, cette propriété est fautive pour les moments.

6. Soit X une variable aléatoire d'ordre $K > 2$, et soit Y une variable aléatoire gaussienne de même moyenne et variance que X . Alors

$$\mathcal{C}_X^{(K)} = \mathcal{M}_X^{(K)} - \mathcal{M}_Y^{(K)} . \quad (1.21)$$

Par conséquent, les cumulants d'ordres supérieurs à deux d'une variable aléatoire gaussienne sont nuls.

Estimation des moments et cumulants

Après avoir vu le cadre probabiliste, passons au cadre statistique. On suppose maintenant que l'on dispose de L réalisations i.i.d. du vecteur aléatoire X de dimension N , regroupées dans une matrice de données $\underline{X} = \{x_{n\ell}, n = 1, \dots, N, \ell = 1 \dots L\} \in \mathcal{M}_{N,L}$.

On connaît déjà les estimateurs empiriques des moments d'ordre 1 et 2 de X

$$\left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(1)}\right)_i = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L x_{i\ell} \quad (1.22)$$

$$\left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(2)}\right)_{ij} = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L x_{i\ell} x_{j\ell} = \frac{1}{L} (\underline{X} \underline{X}^T)_{ij}, \quad (1.23)$$

et on construit de la même manière des estimateurs empiriques pour les moments d'ordres plus élevés

$$\left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(K)}\right)_{i_1 i_2 \dots i_K} = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L x_{i_1 \ell} x_{i_2 \ell} \dots x_{i_K \ell}. \quad (1.24)$$

Il est possible de montrer que cet estimateur est sans biais, et que sa variance est telle que

$$\text{var} \left\{ \widehat{\mathcal{M}}_X^{(K)} \right\} = O \left(\frac{1}{L} \right), \quad (1.25)$$

de sorte que l'estimateur est consistant. Notamment, sur la diagonale,

$$\text{var} \left\{ \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(K)} \right)_{ii \dots i} \right\} = \frac{1}{L} \left[\left(\mathcal{M}_X^{(2K)} \right)_{ii \dots i} - \left(\mathcal{M}_X^{(K)} \right)_{ii \dots i}^2 \right].$$

Ceci suggère d'introduire des estimateurs correspondants pour les cumulants, en se basant sur la formule de Leonov et Shirayev :

$$\left(\widehat{\mathcal{C}}_X^{(K)} \right)_{i_1, \dots, i_K}^\circ = \sum_{Q=1}^K (-1)^{Q-1} (Q-1)! \sum_{\{A_1, \dots, A_Q\} \in \Pi_L(\{i_1, \dots, i_K\})} \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_1|)} \right)_{A_1} \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_2|)} \right)_{A_2} \dots \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_Q|)} \right)_{A_Q}, \quad (1.26)$$

où on a noté $|A_q| = \text{card}(A_q)$, et en posant $A_q = \{i_1, i_2, \dots, i_{|A_q|}\}$,

$$\left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_q|)} \right)_{A_q} = \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_q|)} \right)_{i_1 \dots i_{|A_q|}}.$$

Malheureusement, à l'instar de l'estimateur de la corrélation (voir l'exemple 1.9), cet estimateur est biaisé.

Exemple 1.9. On peut montrer que

$$\mathbb{E} \left\{ \left(\widehat{\mathcal{C}}_X^{(2)} \right)_{ij}^\circ \right\} = \frac{L-1}{L} \left(\mathcal{C}_X^{(2)} \right)_{ij},$$

d'où on déduit l'estimateur sans biais usuel de la corrélation

$$\left(\widehat{\mathcal{C}}_X^{(2)} \right)_{ij} = \frac{1}{L-1} \sum_{\ell=1}^L \left(x_{i\ell} - \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(1)} \right)_i \right) \left(x_{j\ell} - \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(1)} \right)_j \right) \quad (1.27)$$

Plus généralement, il s'avère que le biais peut être calculé explicitement, ce qui permet de donner une expression explicite d'estimateurs sans biais correspondants, de la forme

$$\left(\widehat{\mathcal{E}}_X^{(K)}\right)_{i_1, \dots, i_K} = \sum_{Q=1}^K c_Q (-1)^{Q-1} (Q-1)! \sum_{\{A_1, \dots, A_Q\} \in \Pi_L(\{i_1, \dots, i_K\})} \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_1|)}\right)_{A_1} \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_2|)}\right)_{A_2} \dots \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(|A_Q|)}\right)_{A_Q}, \quad (1.28)$$

où les c_Q sont des nombres, qui peuvent être calculés explicitement. Par exemple, il est possible d'obtenir de la sorte un estimateur sans biais du tenseur de cumulants d'ordre 4

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{E}}_{ijkl} &= a \widehat{\mathcal{M}}_{ijkl} - b \left[\widehat{\mathcal{M}}_i \widehat{\mathcal{M}}_{jkl} + \text{perm.} \right] - c \left[\widehat{\mathcal{M}}_{ij} \widehat{\mathcal{M}}_{kl} + \text{perm.} \right] \\ &\quad + d \left[\widehat{\mathcal{M}}_{ij} \widehat{\mathcal{M}}_k \widehat{\mathcal{M}}_l + \text{perm.} \right] + 6e \widehat{\mathcal{M}}_i \widehat{\mathcal{M}}_j \widehat{\mathcal{M}}_k \widehat{\mathcal{M}}_l \end{aligned} \quad (1.29)$$

où l'expression .perm signifie que l'on somme sur toutes les permutations des indices, et où les constantes a, b, c, d et e sont données par

$$\begin{aligned} a &= \frac{L^2 + L^2 - 24L + 24}{(L-1)(L-2)(L-3)}, & b &= \frac{L(2L^2 - 10L + 9)}{2(L-1)(L-2)(L-3)}, & c &= \frac{L(L^2 - L - 6)}{(L-1)(L-2)(L-3)}, \\ d &= \frac{L^2(2L-5)}{2(L-1)(L-2)(L-3)}, & e &= \frac{L^3}{(L-1)(L-2)(L-3)}. \end{aligned}$$

Remarque 1.3. La formule ainsi obtenue est la plus générale possible. On peut par contre obtenir une expression plus simple si on suppose X centré, c'est à dire tel que $\widehat{\mathcal{M}}_X^{(1)} = 0$ (ce qui n'implique pas $\widehat{\mathcal{M}}_X^{(1)} = 0$, donc cette formule ne peut pas s'obtenir comme cas particulier de (1.29)) :

$$\left(\widehat{\mathcal{E}}_X^{(4)}\right)_{ijkl} = \frac{L+2}{L-1} \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(4)}\right)_{ijkl} - \frac{L}{L-1} \left[\left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(2)}\right)_{ij} \left(\widehat{\mathcal{M}}_X^{(2)}\right)_{kl} + \text{perm.} \right] \quad (1.30)$$

1.2.3 Théorie de l'information

Entropie : définition et propriétés

Définition 1.9 (Entropie). 1. Soit $P = \{p_1, \dots, p_N\}$ une distribution de probabilités finie. Son entropie de Shannon est définie par

$$H(P) = - \sum_n p_n \log_2(p_n). \quad (1.31)$$

2. Soit ρ une densité de probabilités. L'entropie différentielle associée est définie par

$$H(\rho) = - \int \rho(x) \log_2(\rho(x)) dx. \quad (1.32)$$

Lemme 1.1. 1. Soit $P = \{p_1, \dots, p_N\}$ une distribution de probabilités finie. Alors

$$0 \leq H(P) \leq \log_2(N), \quad (1.33)$$

la borne inférieure étant atteinte quand toutes les probabilités sont nulles sauf une, et la borne supérieure étant atteinte quand toutes les probabilités sont égales.

2. La densité qui maximise l'entropie, sous contrainte de variance égale à 1 est la densité gaussienne $\mathcal{N}(\mu, 1)$.

Preuve : voir exercice 1.7 Voici quelques indications

1. Dans le cas fini, la contrainte $\sum_{n=1}^N p_n = 1$ peut être imposée en utilisant un multiplicateur de Lagrange. Ceci revient à chercher un maximum de la fonction

$$\Phi(P, \lambda) = H(P) + \lambda \left(\sum_{n=1}^N p_n - 1 \right) .$$

Les équations normales par rapport aux probabilités p_n permettent d'exprimer ces dernières en fonction de λ , et l'équation normale par rapport à λ donne la contrainte, et fixe la valeur de λ .

2. Dans le cas continu, on procède de même, en introduisant un multiplicateur de Lagrange λ pour la contrainte $\int \rho(x) dx = 1$ et un autre pour la contrainte $\int x^2 \rho(x) dx = 1$. Ceci conduit à maximiser par rapport à ρ la fonctionnelle

$$\begin{aligned} \Psi[\rho, \lambda, \mu] &= - \int \rho(x) \log_2(\rho(x)) dx + \lambda \left[\int \rho(x) dx - 1 \right] + \mu \left[\int x^2 \rho(x) dx - 1 \right] \\ &= \int \mathcal{L}[x, \rho(x), \rho'(x)] dx . \end{aligned}$$

Il suffit alors d'écrire l'équation d'Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho}[x, \rho(x), \rho'(x)] - \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho'}[x, \rho(x), \rho'(x)] = 0 ,$$

puis de procéder comme plus haut. ♠

Remarque 1.4 (Notation). On utilisera la notation $H(P)$ ou $H(\rho)$ pour désigner l'entropie d'une distribution de probabilités, et la notation H_X pour l'entropie de la distribution de probabilités d'une variable aléatoire ou un vecteur aléatoire X . On utilisera la même notations plus loin pour la divergence de Kullback-Leibler et l'information mutuelle.

Lemme 1.2 (Equivariance de l'entropie). Soit $\rho \in L^1(\mathbb{R}^N)$ une densité de probabilités, et soit $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$. Alors

$$H_{AX} = H_X + \log_2(|\det(A)|) . \quad (1.34)$$

Preuve : voir exercice 1.7. Indication : utiliser la propriété d'équivariance de la densité. ♠

Divergence de Kullback-Leibler, information mutuelle

La divergence de Kullback-Leibler fournit une mesure de l'écart d'une distribution P à une distribution de référence, notée P° . Elle se définit comme suit.

Définition 1.10 (Divergence de Kullback-Leibler). 1. Etant données deux distributions de probabilités discrètes P et P° , leur divergence de Kullback-Leibler est définie par

$$\text{KL}(P^\circ|P) = \sum_{n=1}^N p_n^\circ \log_2 \left(\frac{p_n^\circ}{p_n} \right) . \quad (1.35)$$

Si X et X° sont deux variables aléatoires de distributions respectives P et P° , on notera aussi $\text{KL}_{X^\circ|X}$ la divergence de Kullback-Leibler associée.

2. Etant données deux distributions à densité ρ et ρ° , leur divergence de Kullback-Leibler est définie par

$$\text{KL}(\rho^\circ|\rho) = \int \rho^\circ(x) \log_2 \left(\frac{\rho^\circ(x)}{\rho(x)} \right) dx \quad (1.36)$$

Si X et X° sont deux variables aléatoires de densités respectives ρ et ρ° , on notera aussi $\text{KL}_{X^\circ|X}$ la divergence de Kullback-Leibler associée.

Il faut noter que la divergence de Kullback-Leibler n'est pas une distance : elle n'est pas symétrique, et ne satisfait pas non plus l'inégalité triangulaire.

On peut remarquer que la divergence de Kullback-Leibler $\text{KL}(P^\circ|P)$ peut s'écrire comme la différence entre l'entropie et une entropie relative, sous la forme

$$\text{KL}(P^\circ|P) = H(P^\circ|P) - H(P^\circ), \quad \text{où} \quad H(P^\circ|P) = - \sum_n p_n^\circ \log_2(p_n). \quad (1.37)$$

Il en va de même dans le cas continu. La propriété qui suit est d'une grande importance, et peut se montrer comme une conséquence de l'inégalité de Jensen.

Proposition 1.1 (Inégalité de Gibbs). *Etant données deux distributions de probabilités P et P° (resp. deux densités ρ et ρ°), la divergence de Kullback-Leibler est toujours positive ou nulle, et s'annule quand les distributions (resp. les densités) sont identiques.*

On verra plus loin que la divergence de Kullback-Leibler est un cas particulier dans des familles paramétriques de divergences, d'intérêt en séparation de sources.

Définition 1.11 (Information mutuelle). *Etant donné un vecteur aléatoire X , soit X^I le vecteur aléatoire indépendant, dont les composantes ont pour probabilités les probabilités marginales des composantes de X . L'on information mutuelle de X est définie comme la divergence de Kullback-Leibler entre X^I et X :*

$$\text{IM}_X = \text{KL}_{X|X^I}. \quad (1.38)$$

On déduit des propriétés précédentes que l'information mutuelle est toujours positive ou nulle, et qu'elle s'annule si et seulement si les lois de X et X^I sont identiques, donc si et seulement si X est un vecteur aléatoire indépendant.

Exemple 1.10 (Cas gaussien). On considère un vecteur aléatoire gaussien $(X, Y)^T$ centré, de covariance

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$$

On voit facilement que A est définie positive, et que

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$$

la densité s'écrit donc sous la forme

$$\rho(x, y) = \frac{1}{2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{2}(5x^2 - 4xy + y^2) \right\},$$

et les densités marginales valent

$$\rho_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2} \right\}, \quad \rho_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{5}\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{y^2}{10} \right\}.$$

On a donc

$$\log \left(\frac{\rho(x, y)}{\rho(x)\rho(y)} \right) = -\frac{2y^2}{5} + 2xy - 2x^2 + \frac{\log 5}{2}$$

d'où on déduit

$$\begin{aligned} \text{IM}_X &= \frac{1}{2\pi} \iint \left[-\frac{2y^2}{5} + 2xy - 2x^2 + \frac{\log 5}{2} \right] \exp \{ -(5x^2 - 4xy + y^2) \} dx dy \\ &= \frac{\log 5}{2} - 2\mathbb{E} \{ X^2 \} - \frac{2}{5}\mathbb{E} \{ Y^2 \} + 2\mathbb{E} \{ XY \} \\ &= \frac{\log 5}{2} - 2 - 2 + 4 = \frac{\log 5}{2}. \end{aligned}$$

Estimation de l'entropie et autres quantités

Le calcul de l'entropie d'une variable (ou un vecteur) aléatoire réel demande d'en connaître la densité de probabilités. L'estimateur le plus classique est l'estimateur de l'histogramme, basé sur l'approximation

$$H_X = - \int_{\mathbb{R}^N} \rho(x) \log \rho(x) dx \approx - \sum_{i=1}^n \rho(x_i) \log \left(\frac{\rho(x_i)}{w_i} \right) ,$$

où w_i est la taille du volume centré en x_i . Cependant, cet estimateur est biaisé, et peu performant quand la dimension du vecteur X est élevée.

Plusieurs autres estimateurs ont été proposés dans la littérature. En fait, la difficulté réside en grande partie dans l'estimation de la densité jointe (voir par exemple [19, 20]).

1.3 SVD, ACP et transformation de Karhunen-Loève

Comme vu plus haut, le problème de séparation de sources peut s'écrire comme un problème de factorisation de matrice : étant donnée une matrice de données \underline{X} , l'écrire sous la forme $\underline{X} = \underline{A}\underline{S}$. L'analyse en composantes principales, et la transformation de Karhunen-Loève qui en est le pendant statistique, donnent un cadre fournissant de telles factorisations, qu'on rappelle ci dessous.

On se place dans l'espace de Hilbert $\mathbb{C}^N = \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{C})$, muni du produit hermitien

$$\langle x, y \rangle = \sum_{n=1}^N x_n \bar{y}_n ,$$

qui s'exprime aussi sous forme matricielle

$$\langle x, y \rangle = y^* x ,$$

où $y^* = \bar{y}^T \in \mathcal{M}_{1,N}$ est le conjugué hermitien (ou adjoint) de y .

1.3.1 Décomposition de Karhunen-Loève

Soit X un vecteur aléatoire (qu'on suppose a priori complexe) de taille N sur un espace probabilisé $(\mathcal{A}, \mathcal{F}, \mathbb{P})$, supposé du second ordre. Un suppose que X est centré

$$\mathbb{E} \{ X_n \} = 0 , \quad n = 1, \dots, N ,$$

si tel n'est pas le cas la discussion ci-dessous s'applique au vecteur aléatoire centré $X - \mathbb{E} \{ X \}$. On supposera que X est du second ordre, c'est à dire que $\mathbb{E} \{ |X_n|^2 \}$ existe pour tout n . Ceci implique l'existence de la matrice de covariance de X , que l'on note $\mathcal{C}_X^{(2)} \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$:

$$\left(\mathcal{C}_X^{(2)} \right)_{mn} = \mathbb{E} \{ X_m \bar{X}_n \} . \tag{1.39}$$

On sait que $\mathcal{C}_X^{(2)}$ est hermitienne (c'est à dire $\left(\mathcal{C}_X^{(2)} \right)^* = \mathcal{C}_X^{(2)}$, où $\left(\mathcal{C}_X^{(2)} \right)^* = \overline{\mathcal{C}_X^{(2)}}^T$ est la matrice adjointe, ou conjuguée Hermitienne de $\mathcal{C}_X^{(2)}$), et semi-définie positive (ses valeurs propres sont réelles, positives ou nulles). On note $\{ \phi_1, \dots, \phi_N \}$ une famille orthonormée de vecteurs propres correspondants, et $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N \geq 0$ les valeurs propres correspondantes, classées par ordre décroissant. On note $\Phi \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$ la matrice obtenue par concaténation des vecteurs ϕ_n , et par $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ la matrice diagonale des valeurs propres ordonnées correspondante. On a alors les relations matricielles

$$\mathcal{C}_X^{(2)} = \mathbb{E} \{ X X^* \} , \quad \mathcal{C}_X^{(2)} \Phi = \Phi \Lambda , \quad \Phi^* \Phi = \text{Id}_N . \tag{1.40}$$

On sait par ailleurs que X peut se décomposer sur la base ainsi obtenue :

$$X = \sum_{n=1}^N U_n \phi_n , \quad (1.41)$$

où les coefficients U_n sont les variables aléatoires définies par

$$U_n = \langle X, \phi_n \rangle = \phi_n^* X ,$$

que l'on note matriciellement en formant le vecteur $U = (U_1, \dots, U_N)^T$ par

$$U = \Phi^* X . \quad (1.42)$$

On vérifie facilement que

$$\mathbb{E} \{ U_n \bar{U}_m \} = \lambda_n \delta_{mn} , \quad \text{soit aussi} \quad \mathbb{E} \{ U^* U \} = \Lambda . \quad (1.43)$$

Théorème 1.1 (Décomposition de Karhunen-Loève). *Soit X un vecteur aléatoire du second ordre, de moyenne nulle, de taille N sur un espace probabilisé $(\mathcal{A}, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Alors X se décompose sous la forme*

$$X = \sum_{n=1}^N U_n \phi_n \quad (1.44)$$

où les vecteurs ϕ_n sont orthonormés, et où les coefficients U_n sont des variables aléatoires centrées décorrélées, c'est à dire orthogonales par rapport au produit Hermitien de $L^2(\mathcal{A}, \mathbb{P})$:

$$(U_n | U_m) = \mathbb{E} \{ U_n \bar{U}_m \} = \lambda_n \delta_{nm} . \quad (1.45)$$

Notons $r = \text{rg}(\mathcal{C}_X^{(2)})$ le rang de $\mathcal{C}_X^{(2)}$, c'est à dire le nombre de valeurs propres non nulles. Pour tout $n = 1, \dots, r$, en définissant $Y_n = \lambda_n^{-1/2} U_n$, on a $(Y_n | Y_m) = \mathbb{E} \{ Y_n \bar{Y}_m \} = \delta_{nm}$, ce qui fournit une décomposition parfois appelée biorthonormée

$$X = \sum_{n=1}^r \sqrt{\lambda_n} Y_n \phi_n \quad (1.46)$$

Exemple 1.11 (Vecteurs aléatoires cycliques). Supposons que la matrice $\Sigma = \mathcal{C}_X^{(2)}$ soit une matrice circulante il existe un vecteur $\sigma \in \mathbb{C}^N$ tel que

$$\Sigma_{mn} = \sigma_{(n-m)[\text{mod } N]+1} .$$

Alors il est possible de montrer que la base qui diagonalise une telle matrice est la base de Fourier. Plus précisément, on peut montrer qu'en introduisant la matrice (unitaire, c'est à dire telle que $F^{-1} = F^*$) $F \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$ définie par

$$F_{kn} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-2i\pi(k-1)(n-1)/N} , \quad (1.47)$$

on a

$$\Sigma F = F D(\hat{\sigma}) \quad \text{d'où} \quad \Sigma = F D(\hat{\sigma}) F^* .$$

où $D(\hat{\sigma})$ est la matrice diagonale $\text{Diag}(\hat{\sigma}_1, \dots, \hat{\sigma}_N)$, et où $\hat{\sigma} \in \mathbb{C}^N$ est la transformée de Fourier finie de σ

$$\hat{\sigma}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \sigma_n e^{-2i\pi(k-1)(n-1)/N} .$$

Il est à noter que la transformation de Fourier finie ainsi définie est une transformation unitaire (elle est inversible, et la transformation inverse est donnée par la matrice adjointe). On a donc

$$\sigma_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \hat{\sigma}_k e^{2i\pi(k-1)(n-1)/N} .$$

1.3.2 Utilisation de l'analyse en composantes principales

En pratique, la matrice de covariance est souvent inconnue, et on ne dispose que de réalisations du vecteur aléatoire X . On désignera par $\underline{X} \in \mathcal{M}_{N,L}$ la matrice dont les colonnes représentent les réalisations du vecteur aléatoire X , et par $\underline{S} \in \mathcal{M}_{M,L}$ la matrice dont les colonnes représentent les réalisations du vecteur source S .

Si on suppose que les réalisations de X sont iid, et que la moyenne empirique a été soustraite pour centrer les observations, un estimateur sans biais de Σ est donné par

$$\left(\widehat{\mathcal{C}}_X^{(2)}\right)_{mn} = \frac{1}{L-1} \sum_{\ell=1}^L x_{m\ell} \bar{x}_{n\ell}, \quad \widehat{\mathcal{C}}_X^{(2)} = \frac{1}{L-1} \underline{X} \underline{X}^* \quad (1.48)$$

L'analyse en composantes principales se base sur la diagonalisation de $\widehat{\Sigma}$:

$$\widehat{\Sigma} = U D U^*,$$

où $U \in \mathcal{U}_N$ est une matrice unitaire, et dans le cas où D est inversible (c'est à dire $\widehat{\Sigma}$ est de rang plein), conduit à un changement de base en posant

$$\underline{Y} = D^{-1/2} U^* \underline{X}. \quad (1.49)$$

On a alors

$$\underline{Y} \underline{Y}^* = (L-1) \mathbf{I}_N, \quad \text{donc} \quad \widehat{\mathcal{C}}_Y^{(2)} = \mathbf{I}_N,$$

et la factorisation

$$\underline{X} = A \underline{Y}, \quad \text{avec} \quad A = U D^{1/2}. \quad (1.50)$$

On a ainsi obtenu une factorisation de la matrice de données \underline{X} comme un produit d'une matrice de mélange A et d'une matrice de sources \underline{Y} "empiriquement décorréelées", c'est à dire telles que leur matrice de covariance empirique $\widehat{\mathcal{C}}_Y^{(2)}$ soit égale à l'identité. C'est un exemple de séparation de sources, on verra plus loin sur quelques exemples qu'il n'est généralement pas satisfaisant.

Il arrive fréquemment que $\widehat{\mathcal{C}}_X^{(2)}$ ne soit pas de rang plein, ou qu'elle possède des valeurs propres trop proches de zéro pour être prises en considération, ou même qu'on doive effectuer une réduction de dimension. On décrit cette procédure ci-dessous, en utilisant la décomposition en valeurs singulières (SVD) plutôt que la diagonalisation de $\mathcal{C}_X^{(2)}$.

Théorème 1.2 (SVD). *Soit $A \in \mathcal{M}_{N,M}(\mathbb{C})$. Il existe trois matrices U, V et Λ telles que*

$$A = U \Lambda V^*, \quad (1.51)$$

et que

1. $U \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$ et $V \in \mathcal{M}_M(\mathbb{C})$ sont des matrices unitaires,
2. $\Lambda \in \mathcal{M}_{N,M}(\mathbb{C})$ est une matrice diagonale réelle dont les éléments diagonaux λ_k sont non-négatifs.

Les éléments diagonaux de Λ sont les valeurs singulières de A , les colonnes de U (resp. V) sont les vecteurs singuliers à gauche (resp. à droite) de A , et pour toute colonne U_ℓ (resp. V_ℓ) de U (resp. V)

$$A V = U \Lambda : A V_\ell = \lambda_\ell U_\ell ; \quad U^* A = \Lambda V^* : U_\ell = \lambda_\ell V_\ell. \quad (1.52)$$

Notons que les vecteurs singuliers U_ℓ et V_ℓ sont vecteurs propres respectifs de $A A^*$ et $A^* A$, avec valeurs propres respectives λ_ℓ^2 :

$$A A^* U = U \Lambda \Lambda^*, \quad A^* A V = V \Lambda^* \Lambda.$$

Notons que $\Lambda \Lambda^*$ et $\Lambda^* \Lambda$ sont toutes deux carrées, diagonales, de dimensions généralement différentes mais ont les mêmes éléments diagonaux non nuls.

La SVD permet par ailleurs d'effectuer une réduction de dimension. Soit $r \leq \min(M, N)$. On note Λ_r la matrice diagonale extraite de Λ en conservant les r plus grandes valeurs propres, et en remplaçant les autres par 0. Soient $U_r \in \mathcal{M}_{N,r}(\mathbb{C})$ et $V_r \in \mathcal{M}_{M,r}(\mathbb{C})$ les matrices extraites de U et V en ne conservant que les colonnes correspondant aux r , et posons

$$A_r = U_r \Lambda_r V_r^* . \quad (1.53)$$

On a alors le résultat important suivant

Théorème 1.3 (Eckart-Young). *Soit $A \in \mathcal{M}_{N,M}$ une matrice. L'approximation optimale de rang r de A (au sens de la norme de Frobenius) est la matrice A_r définie en (1.53).*

$$A_r = \arg \min_{\text{rg}(B)=r} \|B - A\|_F .$$

Revenons au problème de factorisation de \underline{X} . En appliquant une SVD sur la matrice \underline{X} , on obtient donc une décomposition de la forme

$$\underline{X} = U \Lambda V^* , \quad (1.54)$$

où $U \in \mathcal{M}_N$, $V \in \mathcal{M}_L$, et où $\Lambda \in \mathcal{M}_{NL}$ est diagonale.

En fixant une valeur pour $r \leq \text{rg}(\underline{X})$, on obtient une approximation de rang r donnée par la factorisation

$$\underline{X} \approx \underline{X}_r = U_r \Lambda_r V_r^* , \quad (1.55)$$

ce qui conduit à considérer

$$\underline{Y} = \Lambda_r^{-1} U_r^* \underline{X} \in \mathcal{M}_{rL} . \quad (1.56)$$

Dans un contexte de séparations aveugle de sources, $\Lambda_r^{-1} U_r^*$ peut être considérée comme une estimation de la matrice de démélange, et \underline{Y} comme une estimation de la matrice des sources. On va voir que les résultats obtenus ne sont généralement pas satisfaisants.

Remarque 1.5. Il est important de voir que la matrice U ainsi obtenue est unitaire (dans le cas réel, orthogonale). Transformer \underline{X} et \underline{Y} revient donc simplement à faire un changement de base orthonormée, cette approche ne pourra donc fonctionner que dans le cas où la matrice de mélange est effectivement le produit d'une matrice unitaire par une matrice diagonale... ce qui est très loin d'être le cas.

1.3.3 Application

Commençons par illustrer par des résultats de simulations numériques. Nous allons tout d'abord voir que le cas gaussien se singularise des autres cas (ici le cas d'une loi uniforme).

Exemple 1.12. Dans cet exemple on génère $L = 1000$ réalisations d'un vecteur $\mathcal{N}(0, I_2)$ gaussien centré décorrélé de taille $N = 2$, qui sont mélangées avec une matrice tirée aléatoirement pour produire $M = 2$ observations. On utilise pour cela la séquence d'instructions

```
# Dimensions
M = 2; N = 2; L = 1000;

# Sources gaussiennes iid
S = matrix(rnorm(N*L), ncol=L)
A = matrix(rnorm(M*N), ncol=N)
X = A%*%S
```

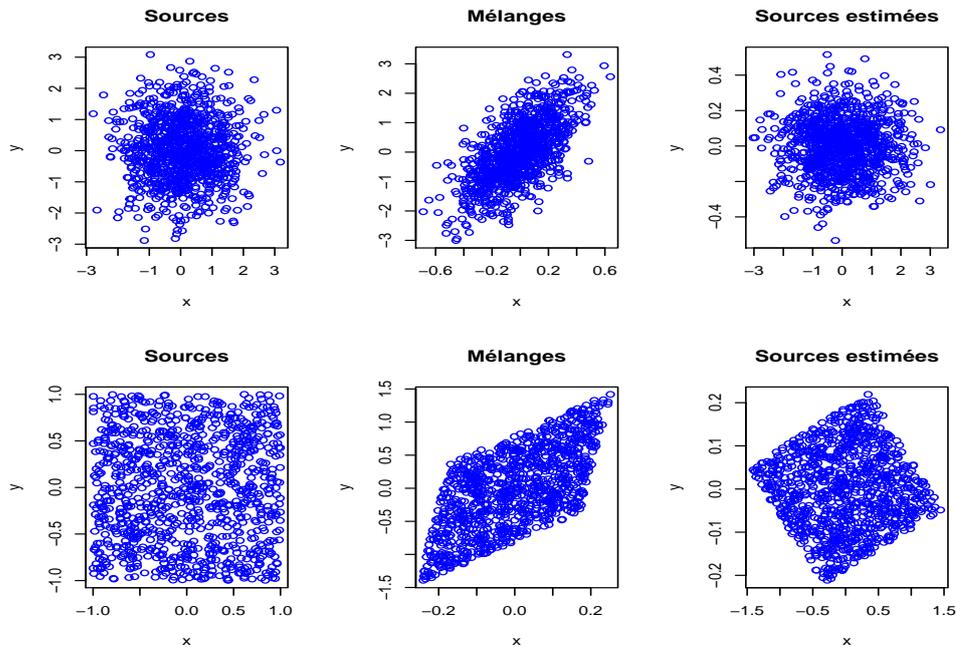


FIGURE 1.2 – Résultat de l’ACP sur des mélanges de sources iid. En haut, sources gaussiennes (gauche : originales ; milieu : mélanges ; droite : démélange). En bas, sources uniformes

On utilise une SVD pour effectuer une factorisation de la matrice \underline{X} , qui produit une matrice \underline{Y} (voir (1.49)). La ligne du haut de la figure 1.2 représente les 1000 réalisations du vecteur initial (la coordonnée 2 en fonction de la coordonnée 1) pour les sources initiales (gauche), les mélanges (centre) et les sources estimées (droite). On peut voir que les mélanges ont bien été blanchis, et vérifier numériquement que les coordonnées des sources estimées sont décorréées.

En regardant de plus près, il est possible de voir que les sources estimées s’obtiennent par rotation des sources initiales dans le plan. Ceci étant, l’angle de cette rotation est très difficile à déterminer en comparant les deux figures, et impossible si l’on ne dispose pas des sources originales.

Exemple 1.13. Dans cet exemple on génère $L = 1000$ réalisations d’un vecteur $\mathcal{U}([-1, 1])$ uniforme centré décorréé de taille $N = 2$, qui sont mélangées avec une matrice tirée aléatoirement $M = 2$ observations. On utilise pour cela la séquence d’instructions

```
# Dimensions
M = 2; N = 2; L = 1000;

# Sources gaussiennes iid
S = matrix(runif(N*L,min=-1,max=1),ncol=L)
A = matrix(rnorm(M*N),ncol=N)
X = A%*%S
```

Cette fois encore on utilise une ACP pour effectuer une factorisation de la matrice \underline{X} , ce qui produit une matrice \underline{Y} (voir (1.49)). La ligne du bas de la figure 1.2 représente les 1000 réalisations du vecteur initial (la coordonnée 2 en fonction de la coordonnée 1) pour les sources initiales (gauche), les mélanges (centre) et les sources estimées (droite). On voit que bien que les coordonnées 1 et 2 des sources estimées ne sont pas indépendantes ici.

Par contre, en utilisant une autre approche appelés ICA, exploitant des moments d’ordre supérieur à deux, il est possible de reconstruire des sources dont les coordonnées sont (approximativement) indépendantes. C’est ce que l’on peut voir sur la FIGURE 1.3, qui donne des sources estimées qui semblent de nouveau être distribuées de façon uniforme dans un rectangle, comme les sources initiales.

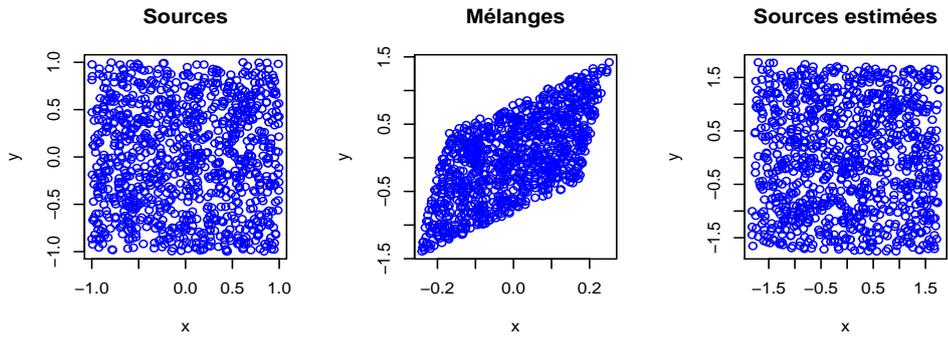


FIGURE 1.3 – Résultat de l'ACI sur des mélanges de sources iid uniformes.

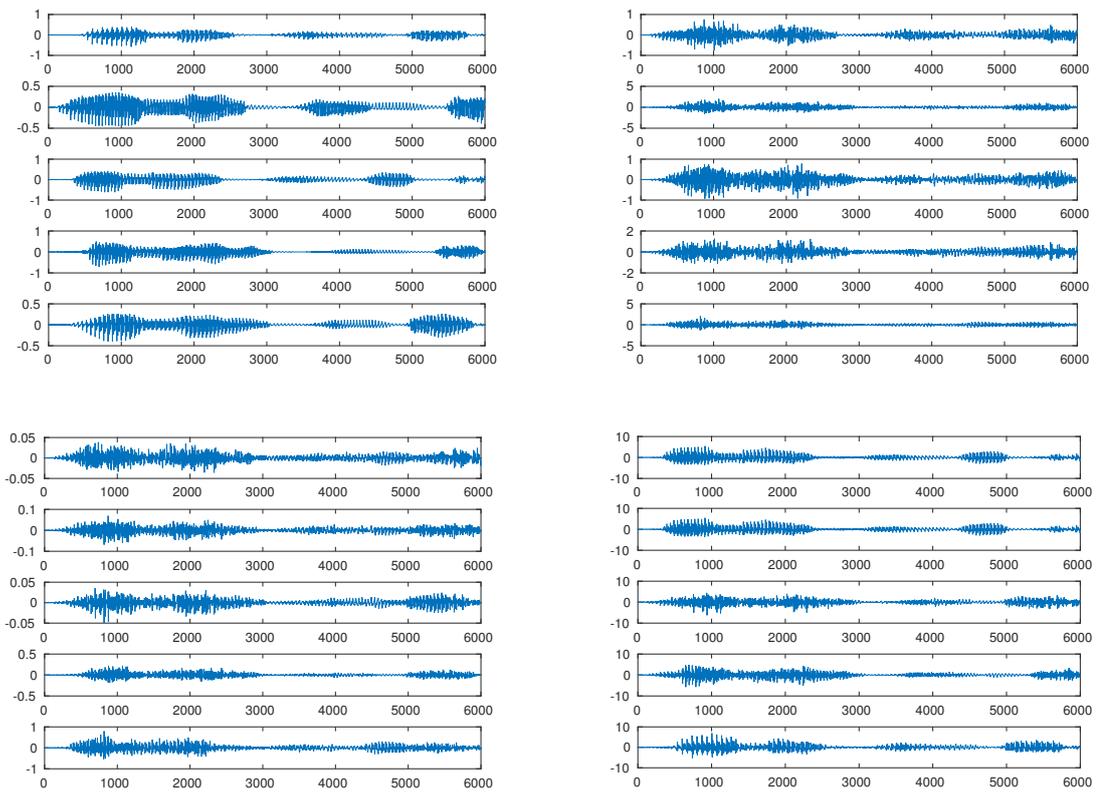


FIGURE 1.4 – Mélange et démélange de signaux de parole. Haut : gauche : signaux originaux ; droite : signaux mélangés. Bas : gauche, séparation par ACP ; droite : séparation par ACI (algorithme JADE).

Exemple 1.14 (Signaux de parole). Dans cet exemple on effectue les mêmes transformations sur des mélanges synthétiques de signaux réels. Les signaux considérés sont 5 enregistrements de signaux de parole (figure 1.4, en haut à gauche), qui ont été transformés par mélange linéaire avec une matrice de mélange tirée au hasard (voir figure 1.4, en haut à droite). L'ACP ne permet pas de retrouver les sources initiales (voir figure 1.4 en bas à gauche), alors que l'ACI y parvient (figure 1.4 en bas à droite).

1.4 Exercices

Exercice 1.1 (Pseudo-inverse).

Vérifier les pseudo-inverses de l'exemple 1.3. Pour les matrices A et B on pourra commencer par vérifier le rang des lignes et des colonnes. On pourra aussi vérifier les résultats sous R (fonction `pinv` du package `lintools`).

Exercice 1.2 (Tenseurs).

1. Soient $X \in \mathbb{R}^N = \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) = \mathcal{T}_N^{(1)}(\mathbb{R})$. Montrer que

$$X \cdot Y = X \bullet_1 Y^T .$$

2. Soient $X \in \mathbb{R}^N = \mathcal{T}_N^{(1)}$, et $A \in \mathcal{M}_{MN}(\mathbb{R})$. Montrer que

$$AX = X \bullet_1 A .$$

3. Montrer les égalités de l'exemple 1.4.

Exercice 1.3 (Equivariance de la densité de probabilités).

Démontrer les propriétés d'équivariance de la densité de probabilités énoncées dans les Propriétés 1.2. Dans le cas unidimensionnel, on pourra calculer, pour toute fonction continue φ

$$\mathbb{E}\{\varphi(Y)\} = \int \varphi(y)\rho_Y(y) dy = \int \varphi(y(x))\rho_X(x)dx$$

et conclure. Même raisonnement dans le cas multidimensionnel.

Exercice 1.4 (Un vecteur gaussien).

Soit X un vecteur gaussien centré de dimension 3, de matrice de covariance

$$V = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

1. X possède-t-il une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^3 ? Si oui donner son expression.
2. Trouver une matrice $A \in \mathcal{M}_3(\mathbb{R})$ telle que les composantes du vecteur $Y = AX$ soient des variables indépendantes.
3. On note $X = (X_1, X_2, X_3)^T$. Déterminer la loi de $X_1 + 2X_2 - X_3$.

Exercice 1.5 (Génération d'un vecteur gaussien).

Soient X_1, X_2 deux variables aléatoires normales centrées réduites (c'est à dire de moyenne nulle et variance unité) indépendantes, on note $X = (X_1, X_2)^T$. Soient $m \in \mathbb{R}^2$ un vecteur, et $\Sigma \in \mathcal{M}_2(\mathbb{R})$ une matrice symétrique définie positive. Déterminer une matrice $A \in \mathcal{M}_2(\mathbb{R})$ et un vecteur B tels que

$$Z = AX + B$$

soit un vecteur gaussien $\mathcal{N}(m, \Sigma)$.

Exercice 1.6 (Cumulants).

1. On considère un vecteur aléatoire d'ordre 4. Expliciter les cumulants d'ordre 1 à 4 de X en fonction de ses moments (sans hypothèse de moyenne nulle).
2. Démontrer les relations de multilinéarité (1.18) jusqu'à l'ordre 4.
3. Démontrer que l'estimateur de la matrice de corrélations donné dans l'expression (1.27) est sans biais.
4. Démontrer que l'estimateur donné dans l'expression (1.30) est sans biais, dans le cas $N = 1$ puis dans le cas général.

Exercice 1.7 (Entropie).

1. Démontrer le Lemme 1.1, en suivant les indications données après l'énoncé du résultat.
2. Démontrer la propriété d'équivariance de l'entropie du lemme 1.2. On utilisera la propriété d'équivariance de la densité.

Exercice 1.8 (Inégalité de Gibbs).

Démontrer l'inégalité de Gibbs de la Proposition 1.1. On utilisera la concavité du logarithme, qui s'écrit sous la forme suivante : pour tous réels u_1, \dots, u_N , et toute distribution de probabilités p_1, \dots, p_N ,

$$\log \left(\sum_i p_i u_i \right) \geq \sum_i p_i \log(u_i) .$$

Exercice 1.9 (Information mutuelle).

Soit $\Sigma = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ une matrice symétrique définie positive. Exprimer l'information mutuelle du vecteur aléatoire $(X, Y)^T \sim \mathcal{N}(0; \Sigma)$ en fonction de a, b et c , et vérifier qu'elle est nulle si et seulement si $b = 0$.

Exercice 1.10 (Cumulants (2)).

Implémenter une fonction `R` calculant l'estimateur du tenseur de cumulants d'ordre 4, suivant l'expression (1.30). Tester cet estimateur sur des vecteurs indépendants, puis gaussiens avec une matrice de corrélations donnée.

Exercice 1.11 (ACP).

1. Implémenter les manipulations de la section 1.3.2, plus précisément la séparation par SVD.
2. Effectuer la simulation et l'analyse donnée dans les exemples 1.12 et 1.13.
3. Tester d'autres lois... et des mélanges artificiels de signaux donnés dans le répertoire `benchmark` sur le site web du cours, par exemple le fichier `10halo.Rdata` dans l'archive `benchmark`.
4. Tester la séparation par ACP des signaux EEG (fichier `EEG19.Rdata` dans l'archive `benchmark`).

2 ICA : analyse en composantes indépendantes

On s'intéresse dans ce chapitre à un premier modèle permettant la séparation de sources, qui conduit à une famille d'algorithmes appelés *Analyse en composantes indépendantes* (ICA). Le modèle de base suppose que les sources forment un vecteur aléatoire S indépendant, et que les différentes observations sont des réalisations iid (indépendantes et identiquement distribuées) de ce vecteur. L'indépendance, exprimée sous une forme ou une autre, est le critère de base sur lequel sont bâtis la plupart des algorithmes de séparation. Ceux-ci se basent sur une mesure d'indépendance, appelée **fonction de contraste** $\Phi(B; X)$, qui est optimisée par rapport à la matrice de dé-mélange B .

On va voir ci-dessous les principes de construction de fonctions de contraste et leur utilisation, avant de passer à la description d'algorithmes.

2.1 Formulation du problème, contraste

Le modèle de base considéré est de la forme

$$X = AS, \quad (2.1)$$

où $X \in \mathbb{R}^N$ et $S \in \mathbb{R}^M$ sont des vecteurs aléatoires représentant respectivement les observations et les sources, et $A \in \mathcal{M}_{NM}(\mathbb{R})$ est la matrice de mélange. On ne suppose pas dans ce modèle l'existence d'un bruit d'observation.

Dans ce qui suit, on se place dans le cas surdéterminé, centré et sans bruit :

- le nombre de sources est inférieur ou égal au nombre d'observations : $M \leq N$.
- Les sources sont centrées : $\mathbb{E}\{S\} = 0$, d'où $\mathbb{E}\{X\} = 0$.
- $B = 0$.

2.1.1 Analyse à l'ordre deux

Les sources étant indépendantes, elles sont donc décorrélées. Dans la mesure où elles ne peuvent être connues qu'à un facteur multiplicatif (et une permutation) près, on peut sans perte de généralité supposer qu'elles sont également de variance unité. On a donc

$$\mathbb{E}\{S_k S_\ell\} = \delta_{k\ell}, \quad (2.2)$$

d'où on déduit

$$\mathcal{C}_X^{(2)} = \mathbb{E}\{XX^T\} = AA^T.$$

Considérons la SVD de A , que l'on écrit $A = U\Lambda V^T$. Elle conduit à

$$\mathcal{C}_X^{(2)} = U\Lambda^2 U^T,$$

expression qui ne dépend pas de la matrice unitaire V . Il en découle qu'aucune méthode basée sur $\mathcal{C}_X^{(2)}$ ne pourra identifier la matrice A parfaitement, puisqu'elle ne pourra retrouver V .

Ceci dit, $\mathcal{C}_X^{(2)}$ peut être utilisé pour effectuer une partie de l'identification, et effectuer un premier traitement. En effet, supposons pour simplifier que Λ soit inversible (voir la section 2.2.1 pour le cas général) et posons

$$Z = \Lambda^{-1}U^{-1}X ,$$

on a alors

$$\mathbb{E} \{ZZ^T\} = I_N .$$

On dit qu'on a blanchi X (au sens où le vecteur Z est décorrélé, ou blanc). On dit parfois aussi que Z est une version "arrondie" de X .

Remarque 2.1. Supposons pour simplifier que $M = N$ (la matrice A est donc une matrice carrée). On vient de voir que la diagonalisation de $\mathcal{C}_X^{(2)}$ permet d'identifier U et Λ . U est une matrice unitaire à N lignes et N colonnes, ce qui représente $N(N-1)/2$ paramètres. Λ est diagonale, et représente donc N paramètres. Par conséquent, la diagonalisation de $\mathcal{C}_X^{(2)}$ permet d'identifier $N(N+1)/2$ paramètres, il en manque donc $N(N-1)/2$, c'est à dire les paramètres représentant la matrice unitaire V . Ce sont ces paramètres que l'on cherche à identifier.

L'identification se base sur la notion de contraste.

2.1.2 Contraste

On se place dans le cas $M = N$ (une réduction de dimension peut avoir été effectuée auparavant, comme on le verra dans la section qui suit). Pour simplifier, on se limite aussi au cas réel.

Etant donné un vecteur aléatoire X , on va rechercher une matrice, dite matrice de démélange $B \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ telle que le vecteur $Y = BX$ soit indépendant, par maximisation d'un critère $\phi(B; X)$ appelé contraste. Pour définir un contraste, introduisons tout d'abord quelques notations :

- On note $\mathcal{B} \subset \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$ un ensemble de matrices, contenant la matrice identité I_N , et \mathcal{B}_0 le sous-ensemble consistant de matrices de permutation généralisées (c'est à dire de produits $D\Pi$ d'une matrice diagonale par une matrice de permutation).
- On note \mathcal{S} un ensemble de sources, de dimension N .
- On note \mathcal{T} l'image de \mathcal{S} par \mathcal{B} .

Définition 2.1. Une application $\Phi : \mathcal{B} \times \mathcal{T} \rightarrow \mathbb{R}$ est un contraste pour le modèle (2.1) si elle satisfait les hypothèses suivantes.

1. Pour tous $X \in \mathcal{T}$ et $B \in \mathcal{B}$, $\Phi(B; X)$ ne dépend que de la loi jointe de X .
2. Φ est invariante par changement d'échelle : $\Phi(PX) = \Phi(X)$ pour toute matrice de permutation généralisée $P \in \mathcal{B}_0$.
3. Pour tous $S \in \mathcal{S}$ et $A \in \mathcal{B}$, $\Phi(A; S) \leq \Phi(I_N; S)$.
4. Pour tous $S \in \mathcal{S}$ et $A \in \mathcal{B}$, $\Phi(A; S) = \Phi(I_N; S)$ implique $A \in \mathcal{B}_0$.

Information mutuelle

De nombreux exemples de fonctions de contraste ont été proposés dans la littérature, exploitant soit des outils de théorie de l'information, soit des cumulants. Un exemple de référence est l'opposé de l'information mutuelle introduite dans la définition 1.10 :

$$C_Y = -\text{IM}_Y = - \int_{\mathbb{R}^M} \rho(y_1, \dots, y_M) \log_2 \left(\frac{\rho(y_1, \dots, y_M)}{\rho_1(y_1) \dots \rho_M(y_M)} \right) dy_1 \dots dy_M \quad (2.3)$$

Proposition 2.1. L'opposé de l'information mutuelle

$$\phi(B; X) = C_{BX} = -\text{IM}_{BX}$$

est un contraste sur $\mathcal{B} \times \mathcal{T}$, où \mathcal{B} est le groupe des matrices inversibles, et \mathcal{S} est l'ensemble des vecteurs aléatoires du second ordre indépendants, dont au plus une composante est gaussienne.

Comme on l'a vu, le calcul de cette fonction de contraste demande de connaître la densité jointe ρ , ce qui pose généralement problème en pratique. C'est pour cela qu'il est souvent bien de s'intéresser à d'autres contrastes.

Retour sur les vecteurs gaussiens, néguentropie

On va voir qu'il existe un lien fort entre minimisation de l'information mutuelle et non-gaussianité. Les lois normales jouent un rôle central dans ce qui va suivre.

Exemple 2.1 (Entropie et divergence de Kullback-Leibler pour des vecteurs gaussien). 1. Soit $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ un vecteur aléatoire gaussien de dimension N . Alors on peut montrer que son entropie est donnée par

$$H_X = \frac{N}{2} \log_2(2\pi e) + \frac{1}{2} \log_2(\det(\Sigma)) = \frac{1}{2} \log_2(\det(2\pi e\Sigma)) .$$

2. Soient $X_1 \sim \mathcal{N}(\mu_1, \Sigma_1)$ et $X_2 \sim \mathcal{N}(\mu_2, \Sigma_2)$ deux vecteurs aléatoires gaussiens de dimension N . Alors leur divergence de Kullback-Leibler est donnée par

$$\text{KL}_{X_1|X_2} = \frac{1}{2 \ln(2)} \left[\text{Tr}(\Sigma_2^{-1}\Sigma_1) + (\mu_2 - \mu_1)^T \Sigma_1^{-1}(\mu_2 - \mu_1) - N + \ln \left(\frac{\det(\Sigma_2)}{\det(\Sigma_1)} \right) \right]$$

Dans le cas où les moyennes sont égales cette expression devient

$$\text{KL}_{X_1|X_2} = \frac{1}{2 \ln(2)} \left[\text{Tr}(\Sigma_2^{-1}\Sigma_1) - N + \ln \left(\frac{\det(\Sigma_2)}{\det(\Sigma_1)} \right) \right]$$

Le résultat suivant est un résultat classique.

Proposition 2.2. Soit $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ un vecteur gaussien de dimension N . Soient $\mathcal{A}, \mathcal{B} \subset \{1, 2, \dots, N\}$ tels que $\mathcal{A} \cap \mathcal{B} = \emptyset$ et $n = |\mathcal{A}| < N$, $m = |\mathcal{B}| < N$. Soient $\mu_{\mathcal{A}} \in \mathbb{R}^n$ le sous-vecteur de μ et $\Sigma_{\mathcal{A}} \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ et $\Sigma_{\mathcal{AB}} \in \mathcal{M}_{nm}(\mathbb{R})$ les sous-matrices de Σ obtenues par restriction des indices à \mathcal{A} , $\mathcal{A} \times \mathcal{A}$ et $\mathcal{A} \times \mathcal{B}$ respectivement.

Soit $X_{\mathcal{A}}$ le sous-vecteur de X obtenu par restriction à \mathcal{A} .

1. La loi marginale de $X_{\mathcal{A}}$ est normale, donnée par

$$X_{\mathcal{A}} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathcal{A}}, \Sigma_{\mathcal{A}}) .$$

2. La loi conditionnelle de $X_{\mathcal{A}}$ sachant $X_{\mathcal{B}} = x_{\mathcal{B}}$ est normale, donnée par

$$X_{\mathcal{A}}|X_{\mathcal{B}} = x_{\mathcal{B}} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathcal{A}} + \Sigma_{\mathcal{AB}}\Sigma_{\mathcal{B}}^{-1}(x_{\mathcal{B}} - \mu_{\mathcal{B}}), \Sigma_{\mathcal{A}} - \Sigma_{\mathcal{AB}}\Sigma_{\mathcal{B}}^{-1}\Sigma_{\mathcal{AB}}) .$$

En particulier, étant donné un vecteur gaussien $G \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$, les lois marginales des composantes de G sont donc normales aussi

$$G_k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_{kk}) .$$

Ceci permet en particulier le calcul de l'information mutuelle d'un vecteur gaussien, on montre que

$$\text{IM}_G = \frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{\prod_k \Sigma_{kk}}{|\det(\Sigma)|} \right) \quad (2.4)$$

Définition 2.2 (Néguentropie). Soit Y un vecteur aléatoire centré de dimension M , de densité ρ , et soit G un vecteur gaussien centré de même matrice de corrélation, de densité g . La néguentropie de Y est la divergence de Kullback-Leibler

$$J_Y = \text{KL}_{Y|G} = \int_{\mathbb{R}^M} \rho(y) \log_2 \left(\frac{\rho(y)}{g(y)} \right) dy .$$

Il est possible de démontrer que la néguentropie est invariante par transformation linéaire : si X est un vecteur aléatoire à densité, centré de dimension N , pour tout $A \in \mathcal{M}_N(\mathbb{R})$, inversible, on a

$$J_{AX} = J_X . \quad (2.5)$$

Lemme 2.1. Soit Y un vecteur aléatoire centré de dimension M , de densité ρ , et soit G un vecteur gaussien centré de même matrice de corrélation, de densité g . On note Y_k et G_k les composantes de Y et G . Alors

$$\text{IM}_Y = -H_Y + \sum_{m=1}^M H_{Y_m} \quad (2.6)$$

$$= \text{IM}_G + J_Y - \sum_{m=1}^M J_{Y_m} . \quad (2.7)$$

Ce résultat appelle un certain nombre de remarques.

Remarque 2.2. Le premier terme de (2.7) contient les contributions à l'ordre deux. Si le vecteur Y est supposé décorréolé, alors le premier terme est nul.

Supposons que $Z \in \mathbb{R}^M$ soit un vecteur d'observations centré et "blanchi" au préalable : $\mathbb{E}\{ZZ^T\} = I_M$. Comme on l'a vu, le problème de séparation de sources se ramène à rechercher une matrice orthogonale B telle que $Y = BZ$ soit un vecteur indépendant, c'est à dire tel que $\text{IM}_{BZ} = 0$. Dans ces conditions, on a

$$\text{IM}_{BZ} = J_Z - \sum_{m=1}^M J_{(BZ)_m} ,$$

et le premier terme est indépendant de B . Par conséquent

$$\arg \max_{B \in O(M)} \text{IM}_{BZ} = \arg \min_{B \in O(M)} \sum_{m=1}^M J_{(BZ)_m} .$$

Si cette approche est exploitée sur une matrice de données \underline{X} , il ne sera pas toujours possible de trouver B qui annule l'information mutuelle, et le critère sera remplacé par le critère de minimisation de l'information mutuelle. Ceci suggère alors de se ramener à maximiser les néguentropies des composantes

$$\arg \max_{B \in O(M)} \sum_{m=1}^M \hat{J}_{(BZ)_m} ,$$

où \hat{J} est un estimateur de la néguentropie, ce qui conduit à un critère additif sur les lignes de B . Il existe des algorithmes basés explicitement sur cette approche, notamment InfoMax [1]. Ceci étant, l'entropie est une quantité difficile à estimer, ce qui conduit souvent à des approximations.

Cumulants standardisés

Il est possible de développer la densité ρ au voisinage de la densité gaussienne (au sens du théorème central limite). Dans le cas où Y est centrée et décorréolée, on peut montrer (voir [4] par exemple) que

$$\text{IM}_Y \approx J_Y - \frac{1}{48} \sum_{m=1}^M \left(4 \left(\mathcal{C}_Y^{(3)} \right)_{mmm}^2 + \left(\mathcal{C}_Y^{(4)} \right)_{m m m m}^2 + 7 \left(\mathcal{C}_Y^{(3)} \right)_{mmm}^4 - 6 \left(\mathcal{C}_Y^{(3)} \right)_{m m m}^2 \left(\mathcal{C}_Y^{(4)} \right)_{m m m m} \right) .$$

Ceci suggère donc de remplacer la minimisation de l'information mutuelle par la maximisation, par rapport à une matrice de démélange B de cumulants marginaux de $Y = BX$. Le résultat qui suit donne un fondement plus précis à cette approche.

Proposition 2.3. Soit ϕ une fonction convexe strictement croissante s'annulant à l'origine. Alors la fonction

$$(B, Z) \mapsto \sum_m \phi \left(\left(\mathcal{C}_{BZ}^{(K)} \right)_{mm\dots m} \right)$$

est un contraste sur $\mathcal{B} \times \mathcal{T}$, où \mathcal{B} est le groupe des matrices orthogonales et \mathcal{T} est l'ensemble des vecteurs aléatoires indépendants ayant au plus un cumulants marginal d'ordre K nul.

C'est dans cet esprit que des fonctions de contraste du type

$$C_Y = \sum_{m=1}^M \left(\mathcal{C}_Y^{(K)} \right)_{mm\dots m}^d$$

ont été proposées, avec $d \geq 1$, cas pour lequel il est possible de démontrer qu'il s'agit bien de fonctions de contraste. La méthode correspondante revient donc à rechercher la matrice de démélange B orthogonale qui maximise C_{BZ} , où Z est obtenu en centrant et réduisant X .

Remarque 2.3. Comme on va le voir, pour $d = 2$, maximiser C_Y revient à diagonaliser $\mathcal{C}_X^{(K)}$, comme on va le voir ci-dessous. Ceci permettra d'utiliser des algorithmes de diagonalisation efficaces.

2.2 Méthodes basées sur un pré-blanchiment

2.2.1 Pré-blanchiment

Comme mentionné plus haut, les sources (réelles) sont supposées indépendantes, donc décorréelées, et sans perte de généralité on peut les supposer blanches (c'est à dire telles que $\mathbb{E}\{SS^T\} = \text{Id}_N$). Dans ces conditions, étant donné le modèle $X = AS$ on a

$$\mathcal{C}_X^{(2)} = A\mathcal{C}_S^{(2)}A^T = AA^T.$$

Si on suppose de plus que les observations sont décorréelées et de même dimension ($M = N$), on en déduit que la matrice A est orthogonale ($AA^T = A^T A = \text{Id}_N$), ce qui réduit la dimension de l'espace dans lequel la matrice sera recherchée.

En pratique, la matrice d'observations ne satisfait pas cette hypothèse, mais on peut s'y ramener en effectuant un pré-blanchiment, que l'on accompagne d'une réduction de dimension.

Soit $\underline{X} \in \mathcal{M}_{NL}(\mathbb{R})$ la matrice des observations. On suppose \underline{X} centrée, c'est à dire telle que $\bar{x}_n = \frac{1}{L} \sum_{\ell} x_{n\ell} = 0$ pour tout n . Si tel n'est pas le cas, on remplace \underline{X} par sa version centrée, obtenue en soustrayant à chaque ligne n la moyenne μ_n . La SVD de \underline{X} fournit la décomposition

$$\underline{X} = U\Lambda V^T$$

où U et Λ sont respectivement la matrice des vecteurs propres de $\underline{X}\underline{X}^T$ et des valeurs singulières de \underline{X} , triées par ordre décroissant. On a en particulier pour toute colonne u_n de U

$$\underline{X}\underline{X}^T u_n = \lambda_n^2 u_n.$$

Remarque 2.4 (Lien avec la covariance empirique). Rappelons que l'estimateur sans biais de la covariance empirique donne (dans le cas centré) l'estimée

$$\hat{\mathcal{C}}_X = \frac{1}{L} \underline{X}\underline{X}^T.$$

Les vecteurs u_n sont donc vecteurs propres de $\hat{\mathcal{C}}_X$, les valeurs propres associées étant égales à λ_n^2/L .

Soit M le nombre de sources que l'on veut chercher à identifier. Soit $U_M \in \mathcal{M}_{NM}$ la matrice obtenue en conservant les M premières colonnes de U , et soit $\Lambda_M \in \mathcal{M}_M$ la restriction de Λ aux M premières valeurs singulières. On suppose Λ_M inversible. Soit alors

$$\underline{Z}_M = \Lambda_M^{-1} U_M^T \underline{X} \in \mathcal{M}_{ML} . \quad (2.8)$$

Alors $\Lambda \Lambda^T \in \mathcal{M}_N$ est la matrice diagonale $\text{diag}(\lambda_1^2 \dots \lambda_N^2)$, $U_M^T U \in \mathcal{M}_{MN}$ est la concaténation de la matrice I_M et d'une matrice $0_{M, N-M}$ dont tous les éléments sont nuls, de sorte que

$$\underline{Z}_M \underline{Z}_M^T = \Lambda_M^{-1} U_M^T \underline{X} \underline{X}^T U_M \Lambda_M^{-1} = \Lambda_M^{-1} U_M^T U \Lambda \Lambda^T U U^T U_M \Lambda_M^{-1} = I_M . \quad (2.9)$$

On dit que l'on a ainsi blanchi les observations.

2.2.2 Algorithmes

On va exploiter les fonctions de contraste données ci-dessus. Les algorithmes avec pré-blanchiment se basent sur la résolution numérique du problème

$$\max_{B \in O(M)} \sum_m \phi \left(\left(\hat{\mathcal{C}}_{BZ_M}^{(K)} \right)_{mm\dots m} \right) , \quad (2.10)$$

où on a noté $O(M)$ le groupe des matrices $M \times M$ orthogonales, ϕ est une fonction convexe, et où $\hat{\mathcal{C}}_{BZ_M}^{(K)}$ est une estimée de $\mathcal{C}_{BZ_M}^{(K)}$. Rappelons que

$$\mathcal{C}_{BZ_M}^{(K)} = \mathcal{C}_{Z_M}^{(K)} \bullet_1 B \bullet_2 B \dots \bullet_K B$$

ainsi il n'est pas nécessaire de ré-estimer les cumulants $\mathcal{C}_{BZ_M}^{(K)}$ pour chaque nouvelle matrice B .

Le problème d'optimisation (2.10) est résolu numériquement. Le choix de l'algorithme dépend du choix de la fonction de contraste. Il existe de nombreux algorithmes basés sur des descentes de gradient. On va examiner ici un cas simple où le problème se ramène à un problème de diagonalisation.

Un choix classique pour ϕ est la fonction quadratique

$$\phi(x) = x^2 .$$

Dans ce cas, il est possible de démontrer que la maximisation du contraste correspondant équivaut à la diagonalisation du tenseur de cumulants.

Lemme 2.2. Soit $T \in \mathcal{T}_{I_1, \dots, I_K}(\mathbb{R})$ un tenseur d'ordre K , et soit $A \in O(I_n)$ une matrice orthogonale. Alors

$$\|T \bullet_n A\|_F^2 = \|T\|_F^2 ,$$

où $\|\cdot\|_F$ est la norme de Frobenius.

La conséquence est que

$$\sum_m \left(\hat{\mathcal{C}}_{BZ}^{(K)} \right)_{mm\dots m}^2 = \left\| \hat{\mathcal{C}}_{BZ}^{(K)} \right\|_F^2 - \sum_{!(m_1 = \dots = m_K)} \left(\hat{\mathcal{C}}_{BZ}^{(K)} \right)_{m_1 m_2 \dots m_K}^2 = \left\| \hat{\mathcal{C}}_Z^{(K)} \right\|_F^2 - \sum_{!(m_1 = \dots = m_K)} \left(\hat{\mathcal{C}}_{BZ}^{(K)} \right)_{m_1 m_2 \dots m_K}^2$$

où le symbole $!(m_1 = \dots = m_K)$ signifie que l'on somme sur tous les éléments non-diagonaux du tenseur.

Ainsi, dans ce cas, maximiser le contraste d'ordre 2 équivaut à minimiser la somme des termes non-diagonaux

$$\text{Off} \left(\hat{\mathcal{C}}_{BZ}^{(K)} \right) = \sum_{!(m_1 = \dots = m_K)} \left(\hat{\mathcal{C}}_{BZ}^{(K)} \right)_{m_1 m_2 \dots m_K}^2$$

c'est à dire diagonaliser le tenseur des cumulants.

Itération de Jacobi : le cas des matrices

L'algorithme de Jacobi est une méthode itérative permettant de diagonaliser une matrice symétrique, en procédant par rotations successives. Il est basé sur des matrices de Givens, définies ci-dessous

Définition 2.3. Dans \mathbb{R}^N , étant donnés $0 < i < j < N$, la matrice de rotation de Givens d'indices i, j et d'angle θ est la matrice de rotation plane d'angle θ autour de l'origine dans le plan Oij :

$$G(\theta, i, j) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & c_\theta & \cdots & -s_\theta & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \cdots & s_\theta & \cdots & c_\theta & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

où $c_\theta = \cos \theta$ et $s_\theta = \sin \theta$.

Etant donnée une matrice hermitienne S , et une matrice de rotation de Givens $G = G(\theta, i, j)$, la matrice $S' = GSG^T$ est symétrique et semblable à S . Le calcul donne les expressions suivantes pour les éléments de S' :

$$\begin{cases} S'_{ii} = c_\theta^2 S_{ii} - 2c_\theta s_\theta S_{ij} - s_\theta^2 S_{jj} \\ S'_{jj} = c_\theta^2 S_{ii} + 2c_\theta s_\theta S_{ij} - s_\theta^2 S_{jj} \\ S'_{ij} = (c_\theta^2 - s_\theta^2) S_{ij} - c_\theta s_\theta (S_{ii} - S_{jj}) \\ S'_{ik} = c_\theta S_{ik} - s_\theta S_{jk} & \text{pour } k \neq i, j \\ S'_{jk} = s_\theta S_{ik} + c_\theta S_{jk} & \text{pour } k \neq i, j \\ S'_{k\ell} = S_{k\ell} & \text{pour } k, \ell \neq i, j \end{cases}$$

On peut voir que le bloc 2×2 (i, j) de la matrice S' est diagonal si θ est choisi de sorte que $(c_\theta^2 - s_\theta^2) S_{ij} - s_\theta c_\theta (S_{ii} - S_{jj}) = 0$, ce qui conduit à l'expression explicite

$$\tan(2\theta) = \frac{2S_{ij}}{S_{ii} - S_{jj}}. \quad (2.11)$$

L'algorithme de diagonalisation de Jacobi fonctionne ainsi par itération de rotations dans des plans bien choisis. A chaque itération, on détermine le couple (i, j) tel que $|S_{ij}|$ est maximal, et on effectue la rotation dans le plan correspondant.

Données : Matrice S à diagonaliser, seuil ϵ

Résultat : Matrice diagonale

initialisation;

tant que $\text{Off}(S) > \epsilon$ **faire**

$(i, j) = \text{argmax}_{i < j} |S_{ij}|$;

 Calcul de θ via (2.11);

$S \leftarrow G(\theta, i, j) S G(\theta, i, j)^T$;

fin

Algorithme 1 : Diagonalisation itérative de Jacobi

Remarque 2.5. Il existe des variantes de l'algorithme de Jacobi basées sur la paramétrisation $x = \tan(\theta)$, et donc des matrices

$$\begin{pmatrix} c_\theta & -s_\theta \\ s_\theta & c_\theta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \begin{pmatrix} 1 & -x \\ x & 1 \end{pmatrix}$$

qui conduisent à des règles de mise à jour différentes.

Itération de Jacobi : le cas des tenseurs

Le problème de diagonalisation des tenseurs d'ordre supérieur à 2 est un problème bien plus complexe que dans le cas des matrices. On peut quand même utiliser des adaptations de l'algorithme itératif de Jacobi, qui reviennent à chercher la matrice orthogonale sous forme de produit de matrices de Givens. L'adaptation au cas des tenseurs n'est toutefois pas triviale, plusieurs approches différentes ont été proposées. On va brièvement décrire ci-dessous l'approche développée par P. Comon (algorithme CoM2, pour *Contrast Maximization*, exploitant les cumulants d'ordre 4) et l'approche de J.F. Cardoso et E. Soudoumiac (algorithme JADE, pour *Joint Approximate Diagonalization of Eigenmatrices*, voir [5, 6]).

2.2.3 CoM2

L'algorithme CoM2, dû à P. Comon [8, 9], ainsi que l'algorithme FOBI (*fourth order blind identification*) implémentent la version de l'analyse en composantes indépendantes développée ci-dessus, basée sur la diagonalisation du tenseur des cumulants d'ordre 4. Ils reposent principalement sur les deux étapes suivantes. Partant d'un tableau de données $\underline{X} \in \mathcal{M}_{NL}(\mathbb{R})$:

1. Pré-blanchiment et réduction de dimension : par SVD, comme vu précédemment, on génère une matrice

$$\underline{Z} = W\underline{X} \in \mathcal{M}_{ML}(\mathbb{R}) ,$$

de données blanchies, c'est à dire telle que $\underline{Z}\underline{Z}^T = I_M$ (voir équation (2.9)). Comme vu plus haut, la matrice $W \in \mathcal{M}_{MN}(\mathbb{R})$ appelée matrice de blanchiment, est le produit d'une matrice diagonale $\Lambda_M^{-1} \in \mathcal{M}_M$ par une matrice $U_M^T \in \mathcal{M}_{MN}$. La valeur de la nouvelle dimension M doit être choisie au préalable, ce qui n'est souvent pas une question simple.

2. Estimation de la matrice de démixtion B par diagonalisation du tenseur de cumulants d'ordre 4 de \underline{Z} . La diagonalisation génère une matrice orthogonale $B_0 \in \mathcal{M}_M$. On obtient ainsi une matrice de sources estimées

$$\underline{Y} = B_0\underline{Z} = B\underline{X} , \quad \text{où} \quad B = B_0W$$

La diagonalisation est basée sur le critère

$$B_0 = \arg \max_{B \in O(M)} \sum_{m=1}^M \left(\hat{\mathcal{C}}_{BZ}^{(4)} \right)_{mmmm} ,$$

optimisé de façon itérative sur chaque dimension en utilisant des rotations de Givens B_{ij} . Le point clé est qu'en utilisant la paramétrisation donnée dans la remarque 2.5, donc des matrices de Givens $B_{ij}(x)$, la fonction à maximiser est de la forme

$$\psi(x) = \sum_{m=1}^M \left(\hat{\mathcal{C}}_{B_{ij}(x)Z}^{(4)} \right)_{mmmm} ,$$

et on peut montrer (voir par exemple [10]) que le problème se ramène à une équation de degré 4, qui possède des solutions explicites.

Remarque 2.6. Comme on l'a vu, un tenseur de cumulants de BZ s'obtient facilement à partir du tenseur de cumulants correspondant de Z , donc il est seulement nécessaire d'estimer celui-ci à partir des données. Ceci étant, il y a deux aspects importants à considérer

- Le tenseur de cumulants d'ordre 4 (par exemple) a M^4 coefficients, ce qui peut devenir très important quand M est grand. Ceci peut poser des problèmes de mémoire.
- En dehors des problèmes de mémoire, il faut que le nombre d'observations soit assez grand pour que l'estimation soit fiable.

Remarque 2.7. Un algorithme similaire basé sur les cumulants d'ordre 3 appelé *CoM1*, a également été proposé par P. Comon. L'approche est très similaire à l'approche ci-dessus, et se ramène à la résolution d'équations algébriques de degré 2.

2.2.4 Jade et JadeR

Les algorithmes JadeR (cas réel) et Jade (cas complexe), développés par J.F. Cardoso et A. Souloumiac [5, 6] sont basés sur le principe de diagonalisation du tenseur des cumulants d'ordre 4, mais utilisent une variante de la méthode décrite ci-dessus.

Cette variante est basée sur la construction suivante. Étant donnée une matrice $S \in \mathcal{M}_M(\mathbb{R})$, on définit la matrice $Q_Z(S) \in \mathcal{M}_M(\mathbb{R})$ par

$$(Q_Z(S))_{ij} = \sum_{k,\ell=1}^M \left(\mathcal{C}_Z^{(K)} \right)_{ijkl} S_{\ell k}, \quad i, j = 1, \dots, M.$$

Il est possible de montrer que si B est une matrice orthogonale qui diagonalise $\mathcal{C}_Z^{(K)}$, alors B diagonalise toutes les matrices $Q_Z(S)$ pour toute matrice $S \in \mathcal{M}(\mathbb{R})$. En particulier, notons $\{e^{(1)} \dots e^{(M)}\}$ la base canonique de \mathbb{R}^M , et $S^{(k,\ell)} = e^{(k)} e^{(\ell)T}$ la matrice dont tous les éléments sont nuls sauf $E_{k\ell} = 1$. Alors B diagonalise $Q(S^{(k,\ell)})$, qui n'est autre que la “tranche matricielle” extraite de $\mathcal{C}_Z^{(K)}$ en fixant à k et ℓ les deux derniers indices du tenseur

$$Q(S^{(k,\ell)})_{ij} = \left(\mathcal{C}_Z^{(K)} \right)_{ijkl}.$$

JadeR exploite cette remarque, en recherchant une matrice B qui diagonalise (au moins approximativement) simultanément les tranches matricielles de $\mathcal{C}_Z^{(K)}$.

2.2.5 Algorithmes de déflation

Les algorithmes brièvement décrits ci-dessus résolvent le problème de séparation de façon globale, c'est à dire estiment toutes les sources ensembles. Ceci peut conduire à des coûts de calcul très importants dans le cas de données de grande taille. Dans ce cas, on peut recourir aux algorithmes de déflation, qui estiment une source après l'autre. L'avantage de ces algorithmes est qu'ils reposent sur des critères scalaires. La plupart des packages décrits ci-dessus incluent des implémentations par déflation.

2.2.6 Autres approches

- *InfoMax (Information Maximization)* est un algorithme proposé par Bell et Sejnowski [1], basé sur la maximisation d'une fonction de contraste non-linéaire, approchant l'entropie. L'optimisation à proprement parler est basée sur une méthode de montée de gradient.
- *FastICA* est un algorithme efficace et populaire pour l'analyse en composantes indépendantes proposé par A. Hyvärinen [13, 12]. Comme les algorithmes ci-dessus, *FastICA* commence par une

étape de pré-blanchiment des données, puis effectue une recherche d'une matrice de rotation, par optimisation d'une mesure de non-gaussianité (approximation de la néguentropie), de la forme

$$\Phi(B) = \sum_m \left(\frac{1}{L} \sum_\ell G((BZ)_{m\ell}) - G(v) \right)^2 ,$$

où $v \sim \mathcal{N}(0, 1)$. Les choix proposés pour G sont

$$G(u) = \frac{1}{\alpha} \ln \cosh(\alpha u) , \quad \text{ou} \quad G(u) = -e^{-u^2/2} .$$

L'optimisation est effectuée par une méthode de Newton approchée.

- Il existe un très grand nombre de variantes résolvant le problème d'analyse en composantes indépendantes. Elles diffèrent soit par le choix de la fonction de contraste, soit par l'algorithme d'optimisation, soit les deux,... Un certain nombre d'entre elles (majoritairement implémentées sous Matlab) peuvent être trouvées sur le site

<http://perso.telecom-paristech.fr/~cardoso/icacentral/algos.html>

- Sous R, les packages `JADE` et `FastICA` fournissent des implémentations des algorithmes correspondants. A noter également, le package `ica` fournit des implémentations de différents algorithmes (incluant Jade, FastICA, et InfoMax). Il existe également d'autres packages, par exemple `BSSasymp`, qui fournissent des implémentations de diverses approches.

2.2.7 Remarque sur l'identifiabilité

Comme on l'a vu, la séparation de sources ne peut se faire, au mieux, qu'à une permutation des sources et une constante multiplicative près. Dans les exemples qui suivent, les sources originales étaient connues, il était donc possible de les ré-ordonner et les normaliser pour pouvoir les comparer directement aux sources estimées.

Pour pouvoir effectuer la comparaison, il suffit de calculer les produits scalaires entre sources originales et sources estimées, puis ré-ordonner en appariant les sources dont le produit scalaire est le plus grand (en valeur absolue). Elles peuvent également être normalisées pour être directement comparables. Voir l'exercice 2.3 pour plus de détails.

Exemple 2.2. *Les figures 2.1 à 2.4 présentent quelques exemples de séparation utilisant JADE et FastICA. Les mélanges sont 8 mélanges synthétiques, utilisant une matrice $A \in \mathcal{M}_{8,4}$ générée aléatoirement. Les sources sont soit des signaux synthétiques (sinusoïdes,...) soit des signaux réels (ECG, parole,...).*

1. *En Figure 2.1, les sources sont 4 sinusoïdes de fréquences multiples d'une fréquence fondamentale (voir les tracés de la colonne de gauche). Ce cas est difficile pour les deux algorithmes, qui échouent à retrouver les sources originales à partir des mélanges. On peut voir que la tendance est grossièrement respectée, mais qu'il subsiste des "interférences" entre les sources.*
2. *En Figure 2.2, les sources (qui sont cette fois encore des signaux synthétiques) sont un peu plus complexes, au sens où elles présentent davantage de diversité dans leur comportement. Une analyse qualitative des tracés montre que FastICA et JADE parviennent à estimer correctement les quatre sources.*
3. *En Figure 2.3, les observations sont des mélanges synthétiques de sources réelles (signaux biologiques). Là encore, la séparation effectuée est qualitativement satisfaisante, quoiqu'il soit difficile d'évaluer de la sorte la qualité de la reconstruction des sources 2 et 3.*
4. *En Figure 2.4, les sources sont des signaux de parole. Cette fois encore, les résultats sont qualitativement satisfaisants, mais cette analyse qualitative ne permet pas de trancher vraiment entre les deux approches.*

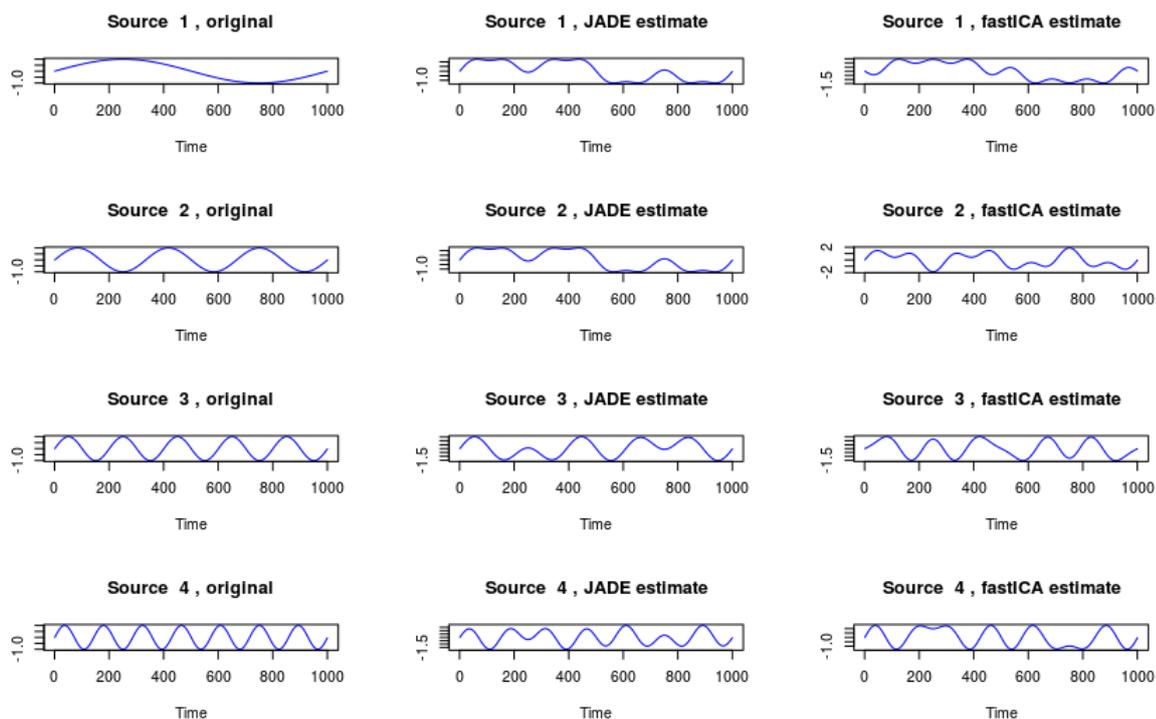


FIGURE 2.1 – Mélanges de quatre sinusôides (tracés de gauche), et estimation utilisant JADE (centre) et FastICA (droite).

Ces exemples (à l'exception du premier, on comprendra pourquoi dans le chapitre suivant) semblent indiquer que ces techniques se comportent assez bien sur des mélanges synthétiques de signaux réels. Il est cependant nécessaire d'aller plus loin dans l'évaluation de leurs performances, et passer à un stade quantitatif.

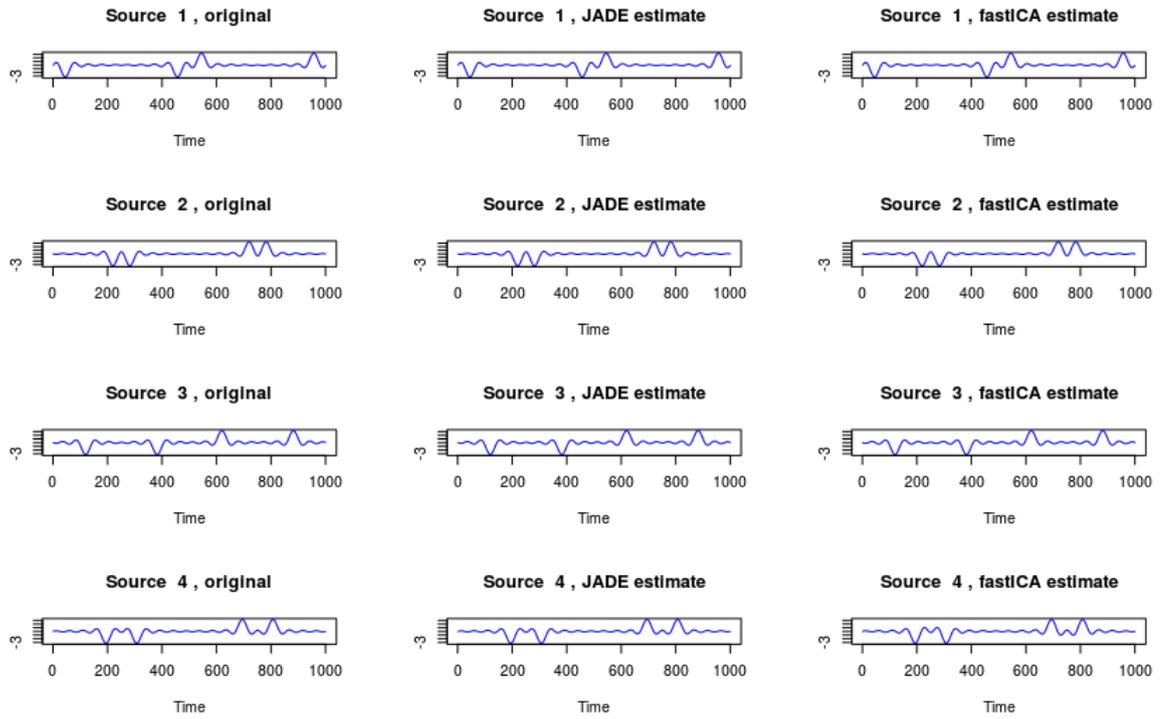


FIGURE 2.2 – Mélanges de quatre sources constituées de quelques “bosses” (tracés de gauche), et estimation utilisant JADE (centre) et FastICA (droite).

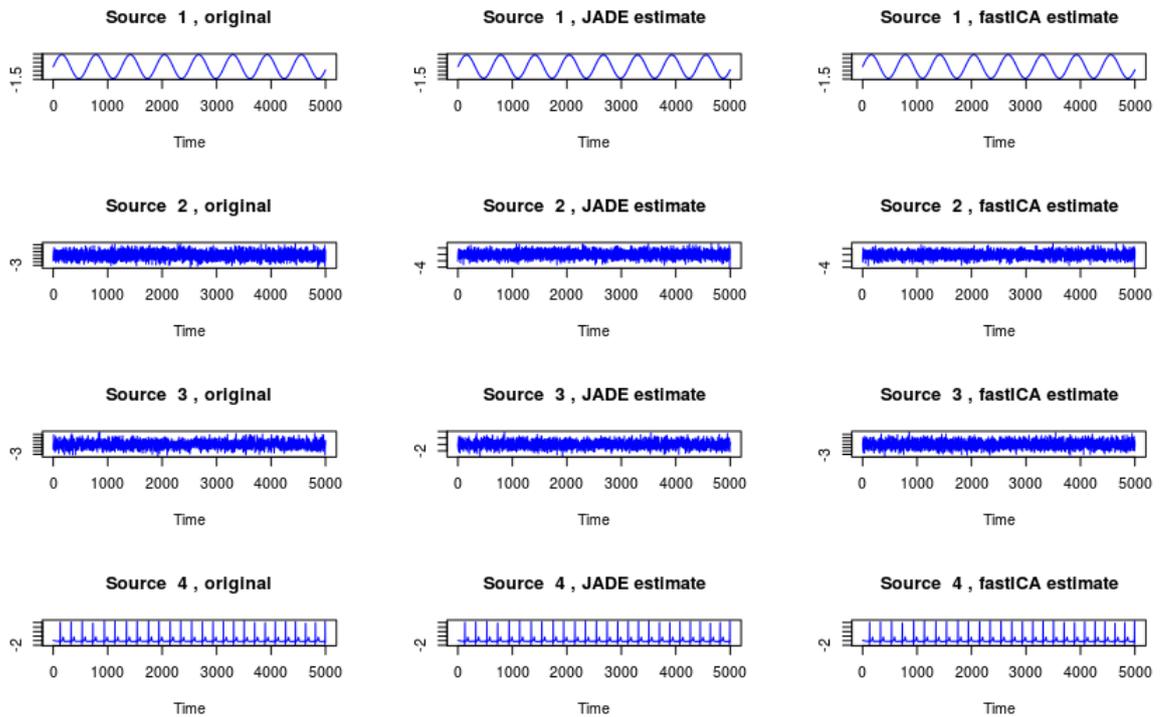


FIGURE 2.3 – Mélanges synthétiques de quatre signaux biologiques réels (tracés de gauche), et estimation utilisant JADE (centre) et FastICA (droite).

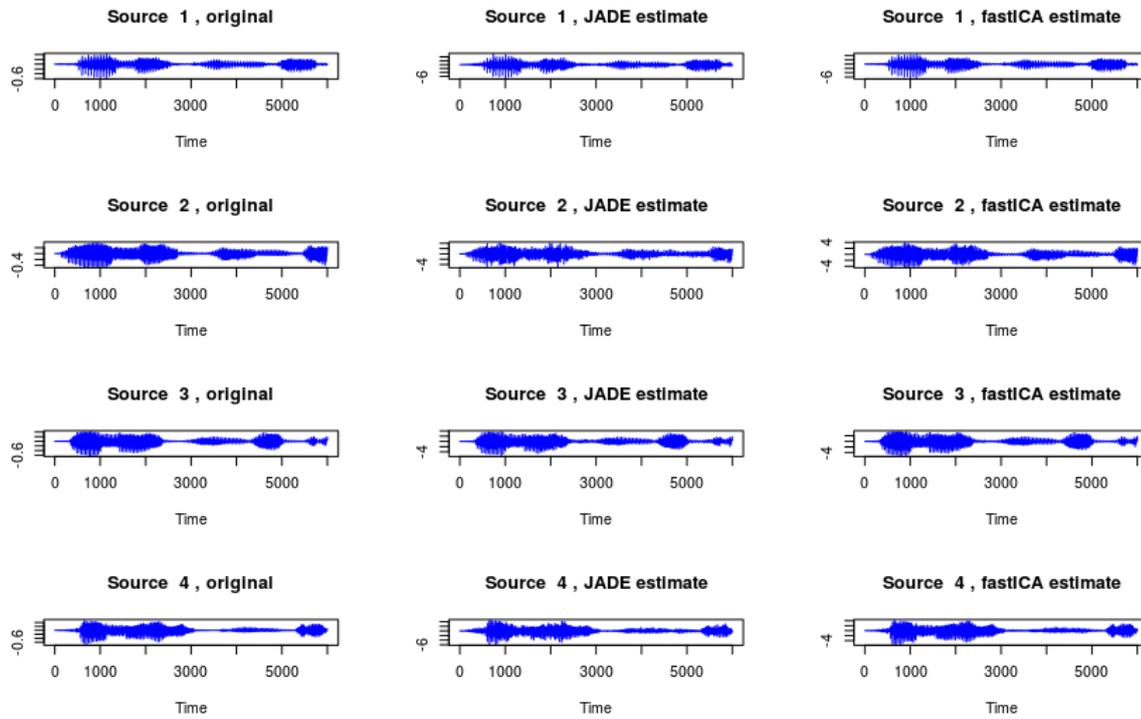


FIGURE 2.4 – Mélanges de quatre signaux de parole réels (tracés de gauche), et estimation utilisant JADE (centre) et FastICA (droite).

2.3 Exercices

Exercice 2.1 (Entropie, information mutuelle et néguentropie).

1. Montrer que l'entropie d'un vecteur aléatoire gaussien est donnée par l'expression de l'exemple 2.1

$$H_X = \frac{N}{2} \log_2(2\pi e) + \frac{1}{2} \log_2(\det(\Sigma)) .$$

2. Montrer que la divergence de Kullback-Leibler de deux vecteurs gaussiens est donnée par l'expression de l'exemple 2.1

$$\text{KL}_{X_1|X_2} = \frac{1}{2 \ln(2)} \left[\text{Tr}(\Sigma_2^{-1} \Sigma_1) + (\mu_2 - \mu_1)^T \Sigma_1^{-1} (\mu_2 - \mu_1) - N + \ln \left(\frac{\det(\Sigma_2)}{\det(\Sigma_1)} \right) \right]$$

3. Démontrer la formule (2.4) : pour un vecteur gaussien G de matrice de covariance Σ ,

$$\text{IM}_G = \frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{\prod_k \Sigma_{kk}}{|\det(\Sigma)|} \right) .$$

4. Démontrer la formule (2.5) exprimant l'invariance de la néguentropie par transformation linéaire :

$$J_{AX} = J_X .$$

5. Démontrer le lemme 2.1 reliant information mutuelle et néguentropie.

Exercice 2.2 (Cumulants).

Démontrer le lemme 2.2 :

$$\|T \bullet_n A\|_F^2 = \|T\|_F^2 ,$$

pour tout tenseur $T \in \mathcal{T}_{I_1, \dots, I_K}(\mathbb{R})$ d'ordre K , et toute matrice orthogonale $A \in O(\mathbb{R}^{I_n})$.

Exercice 2.3 (Jade).

Installer le package `JADE` dans RStudio, et télécharger l'archive `benchmarks` sur le site du cours.

1. Les archives `ACsin10d.RData`, `ACsparse.RData` et `ABio7.RData` contiennent des sources synthétiques, l'archive `10halo.RData` contient des signaux (source) réels (signaux de parole, même phrase). Pour chacune de ces données, on pourra générer des mélanges artificiels, avec une matrice de mélange pré-définie, et effectuer le démélange en utilisant Jade.
2. Pour comparer les sources estimées Y et les sources originales, il faut s'affranchir des indéterminations d'amplitude et de permutation. Pour cela, on peut utiliser des produits scalaires normalisés et les signes

$$P_{k\ell} = \left| \frac{\langle Y_k, S_\ell \rangle}{\|Y_k\| \|S_\ell\|} \right|, \quad \sigma_{k\ell} = \text{sgn}(\langle Y_k, S_\ell \rangle).$$

Vérifier qu'une recherche de maxima par ligne (ou colonne) sur $P_{k\ell}$ peut permettre de lever l'ambiguïté de permutation.

Ecrire une fonction ordonnant les sources estimées dans le même ordre que les sources originales et corrigeant le signe et l'amplitude si besoin, et traçant dans deux colonnes les sources originales et les sources estimées.

3. Une fois les sources originales et estimées rendues comparables, on peut évaluer la précision de la séparation, en calculant par exemple pour tout k

$$\frac{\|Y_k - S_k\|}{\|S_k\|}$$

4. On peut effectuer les mêmes expériences en utilisant l'algorithme FOBI, également implémenté dans le package `JADE`.

Exercice 2.4 (FastICA).

Installer le package `fastICA`, et effectuer le même travail que celui demandé dans l'exercice 2.3. On pourra évaluer quantitativement les performances relatives des deux approches sur quelques jeux de signaux et regrouper les résultats dans un tableau.

Exercice 2.5 (Packages `ica` et `BSSasymp`).

Le package `ica` propose des implémentations de différents algorithmes d'ICA, incluant notamment `FastICA` et `InfoMax`. On pourra installer ce package, et effectuer le même travail que celui demandé dans l'exercice 2.3. On pourra également tester les implémentations du package `BSSasymp`.

3 SOBI et variantes : identification à l'ordre 2

Les méthodes d'analyse en composantes indépendantes vues au chapitre précédent reposent sur l'hypothèse d'indépendance des sources, et exploitent les statistiques d'ordre supérieur. Pour résoudre le problème de factorisation

$$\underline{X} = A\underline{S} ,$$

on y fait l'hypothèse que les colonnes de S sont des réalisations identiquement distribuées d'un vecteur aléatoire indépendant S . Cependant, aucune hypothèse explicite n'est faite sur le comportement des lignes de \underline{S} (ce qui revient implicitement à les considérer indépendantes), qui n'est donc pas exploité. On va ici aborder rapidement une autre famille de méthodes, introduites dans [2, 3] qui exploitent des hypothèses sur le comportement des lignes. On verra que dans ce cas, les statistiques d'ordre deux peuvent suffire pour effectuer la factorisation (aux indéterminations usuelles près). On supposera que colonnes de \underline{S} sont des réalisations d'un vecteur aléatoire indépendant, mais que ces réalisations sont elles mêmes dépendantes.

3.1 Modèle de sources colorées

3.1.1 Processus stationnaires et sources colorées

On va s'intéresser ici à des modèles de signaux aléatoires, ou processus aléatoires de la forme

$$X : \ell \in \mathbb{Z} \mapsto X(\ell) \in L_N^0(\mathcal{A}, \mathbb{P})$$

qu'on va supposer centrés ($\mathbb{E} \{X(\ell)\} = 0$ pour tout $\ell \in \mathbb{Z}$) et du second ordre, c'est à dire tels que

$$\mathbb{E} \{ \|X(\ell)\|^2 \} < \infty , \quad \ell \in \mathbb{Z} ,$$

où on a noté $\|X(\ell)\|$ la norme Hermitienne (ou euclidienne dans le cas réel) du vecteur $X(\ell) \in \mathbb{C}^M$. Notons que ceci implique l'existence de la matrice d'autocorrélation

$$\mathcal{R}_X : \ell, \ell' \rightarrow (\mathcal{R}_X)_{\ell\ell'} = \mathbb{E} \{ X(\ell)X(\ell')^* \} . \quad (3.1)$$

Définition 3.1. Soit $S : \ell \in \mathbb{Z} \rightarrow S(\ell) \in L_M^2(\mathcal{A}, \mathbb{P})$ un processus aléatoire du second ordre à valeurs vectorielles (de dimension M). S est stationnaire en moyenne quadratique si

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \{ S(\ell) \} &= \mathbb{E} \{ S(0) \} \quad \forall \ell \in \mathbb{Z} , \quad \text{et} \\ \mathbb{E} \{ S(\ell + \tau)S(\ell' + \tau)^* \} &= \mathbb{E} \{ S(\ell)S(\ell')^* \} \quad \forall \ell, \ell', \tau \in \mathbb{Z} . \end{aligned}$$

Dans ces conditions, la moyenne d'un tel processus est constante, et la matrice $\mathbb{E} \{ S(\ell)S(\ell')^* \} \in \mathcal{M}_M(\mathbb{C})$ ne dépend que de la différence $\ell - \ell'$. On note alors

$$\mathcal{R}_S(\tau) = \mathbb{E} \{ S(\ell)S(\ell - \tau)^* \} , \quad \tau \in \mathbb{Z} \quad (3.2)$$

la famille de matrices d'autocorrélation correspondante. On appelle \mathcal{R}_S la fonction d'autocorrélation matricielle.

Exemple 3.1 (Bruit blanc vectoriel). *Un cas particulier, appelé bruit blanc vectoriel, correspond à la situation*

$$\mathcal{R}_S(\tau) = \delta_{\tau,0} I_N ,$$

ce qui revient à dire que les lignes de S sont décorrélées, et que les colonnes (correspondant aux différentes valeurs de t) sont décorrélées également.

Le théorème suivant est un résultat fondamental, qui introduit la notion de mesure spectrale, ou spectre d'un processus aléatoire.

Théorème 3.1 (Wiener-Khinchin). *Soit $S : \ell \in \mathbb{Z} \rightarrow S(\ell) \in L_M^2(\mathcal{A}, \mathbb{P})$ un processus aléatoire du second ordre à valeurs vectorielles, supposé centré. Soit \mathcal{R}_S sa fonction d'autocorrélation matricielle. Alors il existe une unique mesure matricielle hermitienne¹ et non-négative η_S , telle que*

$$\mathcal{R}_S(\tau) = \int_{-1/2}^{1/2} e^{2i\pi\nu\tau} d\eta_S(\nu) .$$

η_S est appelée mesure spectrale matricielle de S . Pour tout m , $(\eta_S)_{mm}$ est la mesure spectrale de la m ième composante, alors que pour tous m, m' , $(\eta_S)_{mm'}$ est la mesure interspectrale des composantes m et m' .

Si η_S est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue, c'est à dire s'il existe une fonction à valeurs matricielles $\mathcal{S}_S \in L_{M \times M}^1([-1/2, 1/2])$ telle que

$$d\eta_S(\nu) = \mathcal{S}_S(\nu) d\nu , \tag{3.3}$$

\mathcal{S}_S est appelé densité spectrale matricielle. Dans le cas du bruit blanc vectoriel, la mesure spectrale matricielle est identique à la mesure de Lebesgue. Dans ces conditions, si les composantes de \mathcal{S}_X sont intégrables, on peut écrire

$$\mathcal{S}_X(\nu) = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \mathcal{R}_X(\tau) e^{-2i\pi\nu\tau} .$$

Exemple 3.2 (Filtrage de convolution). Pour $N = 1$, il existe une façon classique de générer des signaux stationnaires en moyenne quadratique. Pour cela, soit $W : \ell \in \mathbb{Z} \mapsto W(\ell)$ une suite de variables aléatoires du second ordre, indépendantes identiquement distribuées (bruit blanc) : par exemple $\mathbb{E} \{W(\ell)\overline{W(\ell')}\} = \sigma^2 \delta_{\ell\ell'}$. Soit $a \in \ell^1(\mathbb{Z})$ une suite numérique, on pose

$$X = a * W : \quad \ell \rightarrow X(\ell) = \sum_k a(k)W(\ell - k) . \tag{3.4}$$

On peut montrer que X est lui aussi du second ordre, et que

$$\mathbb{E} \{X(\ell)\overline{X(\ell + \tau)}\} = \sum_{k,k'} a(k)\overline{a(k')}\delta_{\ell-k,\ell+\tau-k'} = \sum_k a(k)\overline{a(k + \tau)}$$

est indépendant de τ , donc X est stationnaire en moyenne quadratique. Il est possible de montrer que X admet une densité spectrale, égale à

$$\mathcal{S}_X(\nu) = \sigma^2 \left| \sum_k a(k) e^{-2i\pi k\nu} \right|^2 .$$

1. C'est à dire tette que pour tout Borélien A de \mathbb{R}^N , $\eta_S(A)^* = \eta_S(A)$

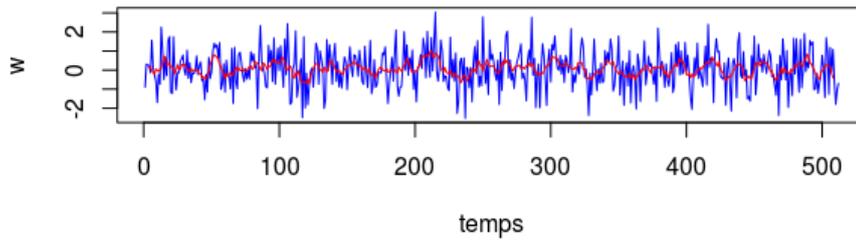


FIGURE 3.1 – Bruit blanc (bleu) et version filtrée par moyenne mobile (rouge)

Sous R, le package `stats`² fournit une fonction effectuant un filtrage de convolution tel que décrit dans l'exemple 3.2. Dans la terminologie des séries chronologiques, un signal filtré de ce type est appelé série MA (pour *moving average*).

La séquence d'instructions ci-dessous permet de générer des réalisations de signaux aléatoires stationnaires en moyenne quadratique. Ici le signal filtré est obtenu par moyenne mobile sur une fenêtre de longueur $K = 8$

```
# Dimensions
L = 512

# Génération d'un bruit blanc, d'un filtre, et filtrage
W = rnorm(L)
K = 8
a = rep(1,K)/K
X = filter(W,a,method='convolution',circular=T)
plot(W,type='l',col='blue',xlab='temps')
lines(X,col='red')
```

Le vecteur a est appelé réponse impulsionnelle du filtre. Le spectre du signal ainsi généré est obtenu à partir de la transformée de Fourier de a , calculée avec la fonction `fft` (voir un peu plus loin pour une description plus précise). Par exemple, la séquence d'instructions ci-dessous (qui utilise la fonction `fftshift` du package `pracma`, pour des raisons qu'on verra plus loin) produit le spectre du signal généré dans l'exemple 3.2, voir Figure 3.2. Notons que le spectre est pair, pour cette raison on représente généralement le demi-axe des fréquences positives seulement.

```
A = numeric(L)
A[1:K] = a
Achap = fft(A)
freq = (0:(L-1))/L - 1/2
plot(freq,fftshift(abs(Achap)^2),xlab='frequence',ylab='spectre',type='l',col='blue')
```

Exemple 3.3 (Filtrage récursif). De façon similaire, toujours pour $N = 1$, soit $W : \ell \in \mathbb{Z} \mapsto W(\ell)$ une suite de variables aléatoires du second ordre, indépendantes identiquement distribuées (bruit blanc) : par exemple $\mathbb{E}\{W(\ell)\overline{W(\ell')}\} = \sigma^2\delta_{\ell\ell'}$, et soient $a, b \in \ell^1(\mathbb{Z})$ deux suites numériques. Il est possible de démontrer que sous certaines conditions (en particulier $a(k) = 0$ et $a(k) = 0$ pour tout $k < 0$, et $z \in \mathbb{C} \rightarrow \sum_k a(k)z^{-k} \neq 0$ pour tout $|z| \leq 1$), l'équation

$$a * X = b * W : \quad \sum_k a(k)X(\ell - k) = \sum_k b(k)W(\ell - k) \quad (3.5)$$

2. Il faut signaler que le package `signal` fournit une fonction, également appelée `filter`, qui est plus élaborée.

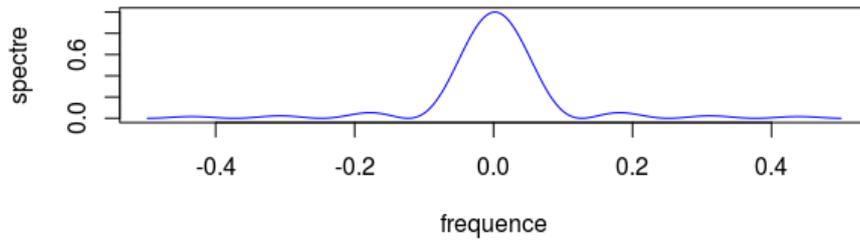


FIGURE 3.2 – Densité spectrale du bruit blanc filtré par filtrage de convolution

possède une solution X unique, qui est du second ordre et stationnaire en moyenne quadratique, et admet une densité spectrale donnée par

$$\mathcal{S}_X(\nu) = \sigma^2 \left| \frac{\sum_k b(k)e^{-2i\pi k\nu}}{\sum_k a(k)e^{-2i\pi k\nu}} \right|^2 .$$

Différents choix de a et b permettent de construire des signaux aléatoires avec différentes propriétés. Dans la terminologie des séries chronologiques, un signal filtré de ce type est appelé série ARMA (pour *auto regressive with moving average*).

Sous R, le package `signal` fournit des outils de filtrage plus élaborés que la fonction `filter` du package `stats`. La fonction `arima.sim` permet de simuler directement des signaux stationnaires (en fixant à 0 le troisième paramètre du modèle).

Remarque 3.1 (Propriétés de la densité spectrale matricielle). 1. Pour tout $\nu \in [-1/2, 1/2]$, la matrice $\mathcal{S}_X(\nu)$ est Hermitienne et semi-définie positive :

$$\mathcal{S}_X(\nu)^* = \mathcal{S}_X(\nu) , \quad \langle \mathcal{S}_X(\nu)v, v \rangle \geq 0 \quad \forall v \in \mathbb{C}^M .$$

Elle vérifie aussi

$$\mathcal{S}_X(-\nu) = \overline{\mathcal{S}_X(\nu)} = \mathcal{S}_X(\nu)^T .$$

2. — Pour tout m , la fonction $\nu \rightarrow (\mathcal{S}_X(\nu))_{mm}$ est intégrable, à valeurs réelles et paire.
- Pour tout couple (m, m') , la fonction $\nu \rightarrow (\mathcal{S}_X(\nu))_{mm'}$ est intégrable, à valeurs complexes ; sa partie réelle est paire, sa partie imaginaire est impaire.

Remarque 3.2 (Cas des processus non centrés). Il est possible de montrer qu'un signal aléatoire non centré ne peut pas admettre de densité spectrale.

3.1.2 Mélanges de sources colorées

Posons maintenant les hypothèses de notre modèle. On va modéliser les observations comme réalisations d'un processus aléatoire du second ordre $X : \ell \in \mathbb{Z} \rightarrow X(\ell) \in L_M^2(\mathcal{A}, \mathbb{P})$, obtenu par mélange instantané

$$X = AS : \quad X(\ell) = AS(\ell) , \quad \ell \in \mathbb{Z}$$

d'un processus aléatoire du second ordre $S : \ell \in \mathbb{Z} \rightarrow S(\ell) \in L_M^2(\mathcal{A}, \mathbb{P})$, où $A \in \mathcal{M}_M(\mathbb{R})$ est une matrice, **que l'on suppose ici carrée et inversible**. On suppose en outre que S est centré, et que les composantes de S sont décorrélatées, c'est à dire telles que pour tout τ ,

$$\mathcal{R}_S(\tau) = \text{diag}(r_1(\tau), \dots, r_M(\tau)) . \quad (3.6)$$

Proposition 3.1. *Sous ces hypothèses, X est du second ordre, stationnaire en moyenne quadratique, et ses matrices d'autocovariance valent*

$$\mathcal{R}_X(\tau) = A\mathcal{R}_S(\tau)A^* ,$$

et sont donc simultanément diagonalisables.

Les algorithmes de séparation seront donc basés sur la diagonalisation simultanée de ces matrices d'autocorrélation.

3.1.3 Questions d'identifiabilité

Les mêmes questions se posent que dans les cas précédents. La matrice A ne pourra être identifiée qu'à des indéterminations près, à savoir

1. Normalisation : matrice diagonale
2. Permutation : ordre

Examinons maintenant ces questions de plus près, dans l'esprit de la remarque 2.1. Supposons comme plus haut que $\mathbb{E}\{S(\ell)S^*(\ell)\} = I_M$, et écrivons $A = U\Lambda V^*$ la SVD de A . Comme nous l'avons déjà vu,

$$\mathcal{R}_X(0) = \mathbb{E}\{X(\ell)X^*(\ell)\} = AA^* = U\Lambda^2U^* , \quad (3.7)$$

de sorte que V ne peut être identifiée à partir de $\mathcal{R}_X(0)$. Néanmoins, soit $W = \mathcal{R}_X(0)^{-1/2} = \Lambda^{-1}U^*$ une racine carrée de $\mathcal{R}_X(0)$, et posons

$$Z(\ell) = WX(\ell) . \quad (3.8)$$

Clairement, Z est blanc : $\mathbb{E}\{Z(\ell)Z(\ell)^*\} = I_M$. Considérons maintenant

$$\mathcal{R}_Z(\tau) = \mathbb{E}\{Z(\ell)Z(\ell - \tau)^*\} = W\mathbb{E}\{X(\ell)X(\ell - \tau)^*\}W^* = \Lambda^{-1}U^*A\mathcal{R}_S(\tau)A^*U\Lambda^{-1} = V^*\mathcal{R}_S(\tau)V . \quad (3.9)$$

Ceci suggère que la diagonalisation de $\mathcal{R}_Z(\tau)$ peut permettre d'identifier la matrice V . De là, on pourra obtenir A par sa SVD $A = U\Lambda V^*$, et donc les sources via

$$Y = VZ = VWX .$$

et donc un algorithme : diagonaliser $\mathcal{R}_X(0)$ comme en (3.7) ce qui conduit aux signaux blanchis Z (equation (3.8)), puis diagonaliser $\mathcal{R}_Z(\tau)$ pour un certain τ .

Remarque 3.3. Il se peut que les matrices considérées possèdent des valeurs propres multiples. Dans ce cas, on peut lever les indéterminations en considérant encore une autre valeur du décalage, et diagonaliser $\mathcal{R}_Y(\tau')$, et ainsi de suite jusqu'à ce que tous les vecteurs propres aient été identifiés sans ambiguïté.

3.2 Estimation des matrices d'autocorrélation, estimation spectrale

3.2.1 Matrices d'autocorrélation

Soit X un signal aléatoire multivarié X de dimension N , du second ordre stationnaire en moyenne quadratique, que l'on supposera centré pour simplifier.

Étant donnée une réalisation de X de longueur L (supposé paire) $\{X(1-L/2), \dots, X(L/2)\}$, l'estimateur naturel des matrices d'autocorrélation de X est donné par

$$\hat{\mathcal{R}}_X(\tau) = \frac{1}{L - \tau} \sum_{\ell=\tau+1-L/2}^{L/2} X(\ell)X(\ell - \tau)^* , \quad \tau = 0, \dots, L - 1 . \quad (3.10)$$

Il est facile de montrer que $\widehat{\mathcal{R}}_X(\tau)$ est un estimateur sans biais de $\mathcal{R}_X(\tau)$ pour tout $\tau < L$. Ceci dit, plus τ est grand, plus la variance de l'estimateur est grande (car la somme porte sur $L - \tau$ termes). Ceci peut être montré assez facilement dans le cas Gaussien (il faut pour cela utiliser la formule d'Isserlis), plus difficilement dans le cas général.

Lorsque plusieurs réalisations du signal aléatoire sont disponibles, l'estimateur correspondant est la moyenne des estimateurs correspondants à chaque réalisation.

3.2.2 Estimation spectrale

Dans le cadre de la séparation de sources colorées, la densité spectrale matricielle des sources est diagonale (ou approximativement diagonale dans le cas de sources estimées). On peut donc se limiter au cas unidimensionnel ($M = 1$) pour discuter le problème d'estimation spectrale.

Le problème d'estimation spectrale se formule comme suit : étant donnée(s) une (ou plusieurs) réalisation(s) d'un signal aléatoire stationnaire en moyenne quadratique, en déduire une estimée de sa mesure spectrale, ou plus particulièrement sa densité spectrale lorsqu'elle existe. La méthode de référence pour l'estimation spectrale est le périodogramme, qui est l'estimateur défini par

$$\widehat{\mathcal{F}}_X(\nu) = \left| \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1-L/2}^{L/2} X(\ell) e^{-2i\pi\nu\ell} \right|^2, \quad \nu \in (-1/2, 1/2].$$

Cette expression se base sur le fait que le théorème de Wiener-Khinchin exprime en fait la mesure spectrale comme transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation, d'où le recours à une transformation de Fourier.

La transformation de Fourier est une transformation linéaire, il n'est donc généralement pas pertinent de calculer plus de L valeurs du périodogramme si on ne dispose que de L valeurs du signal. On se limite alors aux valeurs

$$\nu_k = -\frac{1}{2} + \frac{k}{L}, \quad k = 0 \dots L-1,$$

ce qui conduit à l'expression

$$\widehat{\mathcal{F}}_X(\nu_k) = \left| \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{\ell=1-L/2}^{L/2} X(\ell) e^{-2i\pi k\ell/L} \right|^2, \quad k = 0 \dots L-1,$$

dont on voit qu'elle se base sur la transformée de Fourier finie \hat{X} du signal X

$$\hat{X}(k) = \sum_{\ell=1-L/2}^{L/2} X(\ell) e^{-2i\pi k\ell/L}, \quad (3.11)$$

qui peut être calculée de façon extrêmement efficace en utilisant la transformation de Fourier rapide (FFT).

Remarque 3.4 (Symétries de la transformation de Fourier finie). *Notons que la FFT possède des symétries importantes : elle est L -périodique ($\hat{X}(k+L) = \hat{X}(k)$), de sorte que les valeurs de l'index $k \geq L/2$ peuvent aussi être interprétées comme des valeurs négatives : $\hat{X}(k) = \hat{X}(k-N)$. La fonction `fft` de \mathbb{R} associe à un vecteur X de longueur L le vecteur $\hat{X}(k)$ correspondant aux valeurs $k = 0, 1, \dots, L-1$. Pour obtenir une version symétrique faisant apparaître tout d'abord les fréquences négatives, on peut utiliser la fonction `fftshift` du package `pracma`, comme on l'a fait plus haut.*

Sous des hypothèses assez générales, il est possible de montrer que l'estimateur ainsi obtenu est un estimateur asymptotiquement sans biais. Malheureusement, il est aussi de variance constante (c'est à dire indépendante de la taille de l'échantillon), donc inconsistant :

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \mathbb{E} \left\{ \widehat{\mathcal{F}}_X(\nu_k) \right\} = \mathcal{S}_X(\nu_k), \quad \lim_{L \rightarrow \infty} \text{Var} \left\{ \widehat{\mathcal{F}}_X(\nu_k) \right\} = \frac{1}{2} \mathcal{S}_X(\nu_k)^2. \quad (3.12)$$

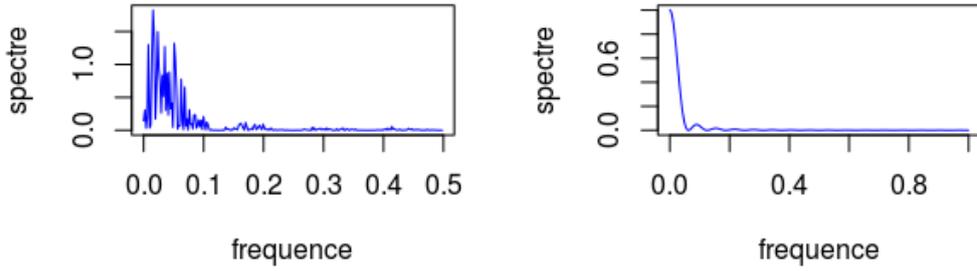


FIGURE 3.3 – Estimée du spectre du bruit blanc filtré de l'exemple 3.2 (gauche) et vrai spectre (droite). Compte tenu de la parité du spectre et son estimée, seules les valeurs correspondant aux fréquences positives sont représentées.

Par ailleurs, le périodogramme est asymptotiquement décorrélé

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \text{Cov} \left\{ \widehat{\mathcal{F}}_X(\nu_k), \widehat{\mathcal{F}}_X(\nu_{k'}) \right\} = \frac{1}{2} \mathcal{S}_X(\nu_k)^2 \delta_{kk'} .$$

Ainsi, une estimée de spectre obtenue par périodogramme est généralement extrêmement irrégulière, même si le spectre \mathcal{S}_X lui-même est lisse.

Il existe des techniques pour réduire la variance et obtenir des estimées plus régulières, au prix d'une augmentation du biais. La méthode la plus classique est appelée périodogramme de Welch, qui se base sur une approche par fenêtrage : on effectue plusieurs estimations par périodogrammes sur des segments chevauchants du signal, que l'on moyenne ensuite : soient $I_1, \dots, I_M \subset \{1 - L/2, \dots, L/2\}$ des intervalles de longueur constante L_M , dont les intersections sont également de longueur constante. Le périodogramme fenêtré est défini par

$$\widehat{\mathcal{F}}_X^{(M)} \left(\frac{k}{L_M} \right) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left| \frac{1}{\sqrt{L_M}} \sum_{\ell \in I_m} X(\ell) e^{-2i\pi k \ell / L_M} \right|^2 .$$

Sous R, la fonction `spec.pgram` implémente l'estimation spectrale basée sur cette approche. Les quelques lignes ci-dessous fournissent une estimée du spectre du signal blanc filtré de l'exemple 3.2, l'estimée est représentée en Figure 3.3.

```
sp.est = spec.pgram(x, plot=F)
par(mfrow=c(1,2))
sp.est.length = length(sp.est$spec)
freq = (0:(sp.est.length-1))/2/sp.est.length
plot(freq, sp.est$spec, xlab='frequence', ylab='spectre', type='l', col='blue')
Lsur2 = round(L/2)
freq = (0:(Lsur2-1))/Lsur2
plot(freq, abs(Achap[1:Lsur2])^2, xlab='frequence', ylab='spectre', type='l', col='blue')
```

3.3 Séparation de sources colorées

On suppose que \underline{S} est une réalisation d'un processus aléatoire $\ell \rightarrow S(\ell) \in \mathbb{C}^M$ de moyenne nulle, stationnaire en moyenne quadratique. On notera $\mathcal{R}_S = \{\mathcal{R}_S(\tau)\}$. Compte tenu des indéterminations, on peut supposer comme précédemment que les sources sont blanches, c'est à dire telles que $\mathcal{R}_S(0) = I_N$.

Le principe de la séparation est ici de chercher à diagonaliser conjointement deux matrices d'auto-corrélation $\widehat{\mathcal{R}}_X(0)$ et $\widehat{\mathcal{R}}_X(\tau)$, ou plus généralement un ensemble de matrices d'autocorrélation $\widehat{\mathcal{R}}_X(\tau_k)$, avec $\tau_0 = 0$.

3.3.1 Pré-blanchiment, réduction de dimension

La première étape est une étape de blanchiment, généralement accompagnée de réduction de dimension. Etant donnée une matrice d'observations $\underline{X} \in \mathcal{M}_{NL}$, une SVD de \underline{X} permet la diagonalisation de \mathcal{R}_X

$$\widehat{\mathcal{R}}_X = \frac{1}{L} \underline{X} \underline{X}^* = U \Lambda^2 U^* , \quad (3.13)$$

où les valeurs singulières sont rangées dans Λ par ordre décroissant (et vecteurs singuliers sont rangés dans le même ordre dans $U \in \mathcal{M}_N$).

On procède comme précédemment. Soit $M \leq \text{rg}(\underline{X})$, soient $\Lambda_M \in \mathcal{M}_M$ et $U_M \in \mathcal{M}_{NM}$ les sous-matrices correspondant aux M premières valeurs singulières, on pose

$$\underline{Z}_M = \Lambda_M^{-1} U_M^* \underline{X} \in \mathcal{M}_{ML} , \quad (3.14)$$

C'est à partir de cette matrice que l'on va chercher à identifier une matrice de mélange.

3.3.2 Algorithmes de séparation : AMUSE et SOBI

- AMUSE (*Algorithm for Multiple Unknown Signals Extraction*) : la méthode AMUSE exploite les développements ci-dessus : une valeur du décalage τ est fixée, et la matrice $\widehat{\mathcal{R}}_{\underline{Z}}(\tau)$ est diagonalisée. Il est nécessaire de choisir τ tel que les éléments de la matrice diagonale associée à $\widehat{\mathcal{R}}_{\underline{Z}}$ soient différents, et en pratique, suffisamment éloignés. Différentes heuristiques ont été proposées pour cela.
- SOBI (*Second Order Blind Identification*) : la méthode SOBI est basée sur la diagonalisation simultanée approchée de plusieurs matrices $\widehat{\mathcal{R}}_{\underline{Z}}(\tau_k)$: on cherche la matrice unitaire U telle que

$$\text{Off}(U) = \sum_{k=1}^K \sum_{m \neq m'} \left| \left(U^* \widehat{\mathcal{R}}_{\underline{Z}}(\tau_k) U \right)_{mm'} \right|^2 \quad (3.15)$$

soit minimal. Cette minimisation peut s'effectuer de différentes façons, notamment via un algorithme itératif de Jacobi comme vu dans la section précédente.

Exemple 3.4 (Exemple de mélange synthétique). Dans cet exemple, on génère des sources gaussiennes synthétiques par filtrage de deux réalisations d'un bruit blanc Gaussien, avec deux filtres différents (voir Exercice 3.4 ci-dessous pour un exemple). Les sources originales se trouvent en Figure 3.4, et les mélanges en Figure 3.5. Les auto-corrélations (et donc les spectres, qui sont ici représentés) sont assez différents.

Le démélange a été effectué en utilisant la méthode SOBI. Les résultats se trouvent dans la figure 3.6. Comme on peut le voir, les sources ont été correctement estimées, aux indéterminations (ordre et amplitude) près.

3.4 Exercices

Exercice 3.1 (Filtrage de convolution).

On se place dans le cadre de l'exemple 3.2. Etant donnée une suite numérique $a \in \ell^1(\mathbb{Z})$, sa transformée de Fourier discrète $\hat{a} : [-1/2, 1/2] \rightarrow \mathbb{R}$ est définie par

$$\hat{a}(\nu) = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} a(\ell) e^{-2i\pi\nu\ell} .$$

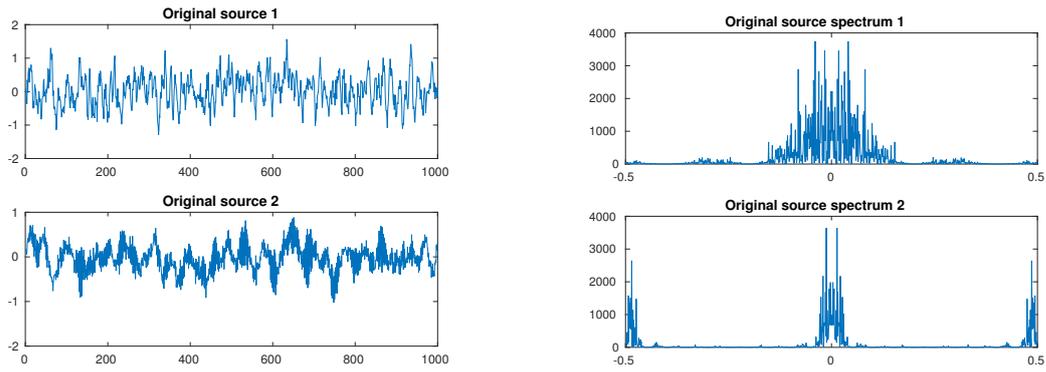


FIGURE 3.4 – Sources originales : signaux (gauche) et spectres (droite)

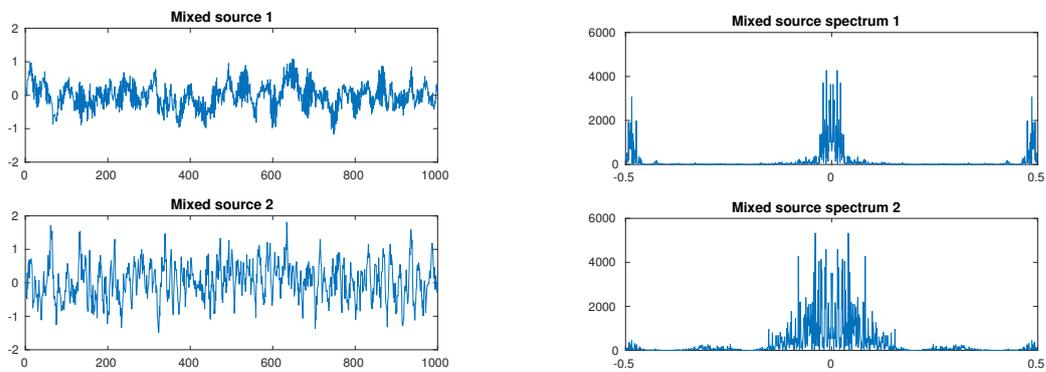


FIGURE 3.5 – Mélanges : signaux (gauche) et spectres (droite)

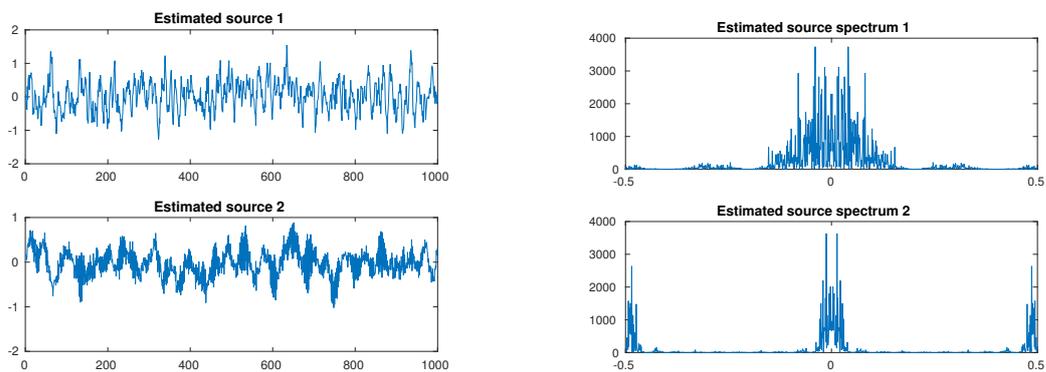


FIGURE 3.6 – Sources estimées : signaux (gauche) et spectres (droite)

Etant donnée une telle suite numérique a et un bruit blanc (une suite infinie $W(\ell)$ de variables aléatoires du second ordre i.i.d. de moyenne nulle et variance σ^2), on introduit le bruit blanc filtré par le produit de convolution

$$X = a * W : \quad X(\ell) = \sum_k a(k)W(\ell - k) .$$

1. Montrer que \hat{a} est une fonction bornée, et que pour tout ℓ , on a

$$a(\ell) = \int_{-1/2}^{1/2} \hat{a}(\nu) e^{2i\pi\nu\ell} d\nu .$$

2. Montrer que X est de moyenne nulle, et est stationnaire :

$$\mathbb{E} \{X(\ell)\overline{X(\ell + \tau)}\} = \sum_k a(k)\overline{a(k + \tau)} .$$

3. En utilisant l'expression des coefficients $a(\ell)$, donner l'expression de la mesure spectrale de X , et montrer qu'elle admet une densité spectrale.

Exercice 3.2 (Densité spectrale matricielle). _____

1. Démontrer les propriétés de la densité spectrale matricielle de la Remarque 3.1.
2. Démontrer la proposition 3.1.

Exercice 3.3 (Simulation et estimation spectrale). _____

1. En utilisant les fonctions `rnorm` et `filter` du *package stats*, générer (comme dans l'exemple 3.2) une réalisation d'un signal aléatoire gaussien, stationnaire en moyenne quadratique, par filtrage d'un bruit blanc. Calculer son spectre en utilisant `fft`.
2. En utilisant la fonction `spec.pgram`, estimer le spectre du signal aléatoire à partir de la réalisation obtenue. On pourra faire plusieurs tests, en variant la longueur du signal.

Exercice 3.4 (Simulation et SOBI). _____

1. En utilisant le *package stats* et/ou le *package signal* générer M réalisations de signaux aléatoires stationnaires indépendants avec des filtres différents. Générer une matrice de mélange $A \in \mathcal{M}_M(\mathbb{R})$ et l'utiliser pour générer M mélanges. Utiliser `amuse` et `sobi` pour effectuer le démixage et analyser les résultats. On pourra utiliser les fonctions `SOBI` et `AMUSE` du *package JADE*, ou fonction `eSOBI` du *package BSSasyp*
2. Tester aussi `JADE` ou `fastICA` dans ce cas, et comparer les résultats.

Exercice 3.5 (SOBI et AMUSE sur signaux benchmark). _____

Tester `Sobi` sur des signaux de la base `Benchmarks`. On pourra en particulier comparer `Jade` et `Sobi` sur les signaux de parole `10halo`, et écouter la qualité de la séparation. On pourra aussi générer davantage d'observations que de sources, et tester la qualité des résultats ainsi obtenus.

Exercice 3.6 (Indice d'Amari). _____

Se documenter sur l'indice d'Amari, implémenté dans `JADE` dans la fonction `amari.error`.

4 NMF : factorisation en matrices non-négatives

Dans ce chapitre, nous tournons le dos à la modélisation probabiliste, et nous focalisons sur une approche plus algorithmique, qui va faire appel à d'autres techniques. Il s'agit ici de se focaliser sur des situations où aussi bien les sources que la matrice de mélange sont non-négatives. Il s'agit alors d'exploiter cette propriété, qui va s'avérer être une contrainte forte. On va voir que sous certaines hypothèses, on est alors conduits à des méthodes extrêmement efficaces.

Il existe de nombreuses situations dans lesquelles des données à analyser sont non-négatives. Par exemple, des images, des spectres (RMN ou autre), des comptages d'occurrences, des stocks, des cours d'action,... sont des données non-négatives. Le principe de la séparation aveugle de sources est de chercher à les décomposer comme combinaisons linéaires de sources élémentaires, et pour des questions d'interprétabilité de ces dernières il est souvent pertinent de les supposer non-négatives aussi.

Remarque 4.1 (Projection sur un ensemble de matrices non-négatives). *Etant donné l'espace vectoriel $\mathcal{M}_{IJ}(\mathbb{R})$ des matrices $I \times J$ à coefficients réels, on voit facilement que le sous-ensemble $\mathcal{M}_{IJ}(\mathbb{R}^+)$ des matrices à coefficients non-négatifs est un cône convexe. La projection orthogonale sur ce cône est bien définie, et s'écrit sous la forme*

$$\Pi_{\geq} : A \in \mathcal{M}_{IJ}(\mathbb{R}) \rightarrow \Pi_{\geq}(A) \in \mathcal{M}_{IJ}(\mathbb{R}^+) : \quad [\Pi_{\geq}(A)]_{ij} = \begin{cases} a_{ij} & \text{si } a_{ij} \geq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

en d'autres termes, elle force à zéro les coefficients négatifs.

4.1 Position du problème

Comme précédemment, on suppose disposer d'une matrice $\underline{X} \in \mathcal{M}_{M,L}$ dont les lignes sont M signaux observés, supposés être de la forme

$$\underline{X} = \underline{A}\underline{S},$$

où on suppose tous les coefficients de \underline{A} aussi bien que de \underline{S} sont non-négatifs (positifs ou nuls). On va se focaliser ici sur des approches dites variationnelles, dans lesquelles on va rechercher \underline{A} et \underline{S} par optimisation d'une fonction d'objectif $\Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S})$ bien choisie. Cette fonction d'objectif inclut une mesure de divergence entre \underline{X} et $\underline{A}\underline{S}$, et peut également intégrer des termes supplémentaires implémentant des informations supposées connues sur \underline{A} et \underline{S} .

On se limitera ici au cas le plus simple (sans termes supplémentaires) et on va donc chercher à résoudre le problème d'optimisation

$$\min_{\underline{A}, \underline{S}} \Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}) \quad \text{sous contraintes} \quad \underline{A} \succeq 0 \quad \text{et} \quad \underline{S} \succeq 0 \tag{4.1}$$

où on a utilisé la notation $A \succeq 0$ pour indiquer que tous les éléments de la matrice A sont positifs ou nuls.

La grande majorité des méthodes attaquent ce problème par des optimisations alternées par rapport à \underline{A} et \underline{S} : on cherche \underline{A} à \underline{S} fixé puis \underline{S} à \underline{A} fixé et ainsi de suite, jusqu'à ce qu'un certain critère de convergence soit atteint. Ceci dit, il faut signaler un certain nombre de difficultés :

- Même lorsque la mesure de divergence Φ est convexe par rapport à A et par rapport à \underline{S} (ce qui assure dans les deux cas l'existence d'un minimum global), il arrive très rarement qu'elle soit convexe par rapport à A et \underline{S} conjointement. Donc l'existence d'un minimum global n'est généralement pas garantie.
- Une situation dans laquelle apparaît cette difficulté est fournie par les indéterminations d'amplitude et de permutation déjà rencontrées. L'indétermination d'amplitude est levée en imposant des conditions de normalisation sur les lignes de \underline{S} (ou les colonnes de A). L'indétermination de permutation conduit à l'existence de minima locaux équivalents, donc sans gravité.

4.2 Fonction objectif quadratique

Le cas le plus simple consiste à utiliser comme mesure de divergence une norme euclidienne au carré

$$\Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}) = \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|_F^2, \quad (4.2)$$

qui est aussi la norme de Frobenius de la différence $\underline{X} - \underline{A}\underline{S}$ au carré¹. Dans ce cas le problème s'écrit donc sous la forme

$$\min_{\underline{A}, \underline{S}} \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|_F^2 \quad \text{sous contraintes} \quad \underline{A} \succeq 0 \quad \text{et} \quad \underline{S} \succeq 0.$$

L'approche la plus immédiate consiste à alterner mises à jour de A et \underline{S} , jusqu'à convergence (éventuelle). Deux points sont à souligner :

- Il faut s'assurer que les mises à jour préservent la contrainte de non-négativité
- Compte tenu de l'indétermination d'amplitude, il va être nécessaire d'imposer une contrainte de normalisation sur les colonnes de A (et donc les lignes de \underline{S}).

Par la suite nous aurons besoin du gradient du critère quadratique par rapport à A et \underline{S} . Comme toutes les matrices considérées sont réelles, Les adjointes de ces matrices sont égales aux transposées : $A^* = A^T$ et $\underline{S}^* = \underline{S}^T$.

Lemme 4.1. *Les gradients de la distance euclidienne au carré sont donnés par*

$$\begin{aligned} \nabla_A \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|^2 &= 2\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T - 2\underline{X}\underline{S}^T \\ \nabla_{\underline{S}} \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|^2 &= 2A^T\underline{A}\underline{S} - 2A^T\underline{X} \end{aligned}$$

4.2.1 Un algorithme simple : moindres carrés projetés alternés

L'approche la plus simple consiste à effectuer les optimisations par rapport à A et \underline{S} de façon alternée, en imposant à chaque itération les contraintes de non-négativité, ainsi qu'une condition de normalisation. Un corollaire immédiat du Lemme 4.1 est

Propriétés 4.1. — *Supposant \underline{S} connue, la matrice A qui minimise $\|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|^2$ est obtenue en résolvant le système*

$$\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T = \underline{X}\underline{S}^T, \quad (4.3)$$

et si $\underline{S}\underline{S}^T$ est inversible, est donnée par

$$A_{\text{opt}} = \underline{X}\underline{S}^T(\underline{S}\underline{S}^T)^{-1}. \quad (4.4)$$

— *Supposant A connue, la matrice \underline{S} qui minimise $\|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|^2$ est obtenue en résolvant le système*

$$A^T\underline{A}\underline{S} = A^T\underline{X}, \quad (4.5)$$

et si $A^T A$ est inversible, est donnée par

$$\underline{S}_{\text{opt}} = (A^T A)^{-1} A^T \underline{X}. \quad (4.6)$$

1. On rappelle que la norme de Frobenius d'une matrice A est égale $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{m,n} |A_{mn}|^2} = \sqrt{\text{Tr}(AA^*)}$.

La série de remarques suivante va nous conduire à la spécification de l'algorithme, qui demande d'effectuer un certain nombre de choix

Remarque 4.2. — Chacune des mises à jour ci-dessus génère des matrices dont certains coefficients peuvent être négatifs. Les matrices obtenues sont projetées sur le cône des matrices non-négatives en forçant à zéro les coefficients négatifs (voir Remarque 4.1).

- L'indétermination de normalisation doit être levée, en fixant une normalisation soit sur les lignes de \underline{S} soit sur les colonnes de A . Dans ce qui suit, on fixe la normalisation sur les colonnes de la matrice de mélange, en leur imposant d'avoir une norme Euclidienne égale à 1.
- On fait aussi le choix de débiter les itérations par la mise à jour de la matrice de mélange, une valeur initiale de la matrice de sources est donc nécessaire.
- Il est nécessaire de se donner un critère de fin pour l'algorithme itératif. Pour cela on fixe un nombre maximal d'itération. Des critères d'arrêt sur l'évolution d'itérées consécutives de A et \underline{S} peuvent être utilisées, par exemple

$$\delta_A = \frac{\|A^{(t+1)} - A^{(t)}\|_F}{\|A^{(t)}\|_F}, \quad \delta_{\underline{S}} = \frac{\|\underline{S}^{(t+1)} - \underline{S}^{(t)}\|_F}{\|\underline{S}^{(t)}\|_F},$$

où t numérote les itérations. On décide de stopper les itérations lorsque $\delta_A(t)$ et $\delta_{\underline{S}}(t)$ sont inférieurs à un seuil fixé à l'avance.

Dans la mesure où le critère fait uniquement intervenir un terme d'attache aux données, on peut aussi utiliser comme critère d'arrêt

$$\delta_{\underline{X}} = \frac{\|\underline{X} - A\underline{S}\|_F}{\|\underline{X}\|_F},$$

et stopper l'algorithme lorsque $\delta_{\underline{X}}$ est inférieur à un seuil fixé à l'avance.

En choisissant de débiter par la mise à jour de la matrice de mélange (plutôt que la matrice de sources), de normaliser les colonnes de celle ci plutôt que les lignes de \underline{S} , et d'utiliser δ_A et $\delta_{\underline{S}}$ comme critères d'arrêt, l'algorithme s'écrit alors simplement

Résultat : Factorisation en matrices non-négatives

$t = 0;$

$\underline{S}^0 = \underline{S}_{\text{init}};$

tant que $t \leq \text{iter_max}$ **et** $(\delta_A(t) > \epsilon$ **ou** $\delta_{\underline{S}}(t) > \epsilon)$ **faire**

- Mise à jour de A via (4.4) : $A^{t+1} = \underline{X} (\underline{S}^t)^\dagger;$
- Mise à zéro des coefficients négatifs de A : $A^{t+1} = \Pi_+(A^{t+1});$
- Normalisation des colonnes de A : $A_{:,m}^{t+1} = A_{:,m}^{t+1} / \|A_{:,m}^{t+1}\|, m = 1, \dots, M;$
- Mise à jour de \underline{S} via (4.6) : $\underline{S}^{t+1} = (A^{t+1})^\dagger \underline{X};$
- Mise à zéro des coefficients négatifs de \underline{S} : $\underline{S}^{t+1} = \Pi_+(\underline{S}^{t+1});$
- $t = t + 1;$

fin

Algorithme 2 : NMF par moindres carrés projetés alternés.

Remarque 4.3. — Normalement il aurait aussi fallu accompagner la normalisation des colonnes de A par une normalisation correspondante des lignes de \underline{S} , afin que le produit $A\underline{S}$ reste inchangé : $\underline{S}_{m,:}^t = \underline{S}_{m,:}^t * \|A_{:,m}^{t+1}\|, m = 1, \dots, M$. Mais ceci n'est pas nécessaire ici car la ligne suivante calcule une mise à jour \underline{S}^{t+1} qui ne dépend pas de \underline{S}^t .

- Il est facile de modifier l'algorithme en fonction d'autres choix (par exemple normalisation de \underline{S} plutôt que A , ou autre critère d'arrêt).
- Il est important de signaler que cet algorithme ne présente pas de garantie de convergence. En effet, à chaque itération la minimisation de $\|\underline{X} - A\underline{S}\|_F$ garantit la décroissance du critère.

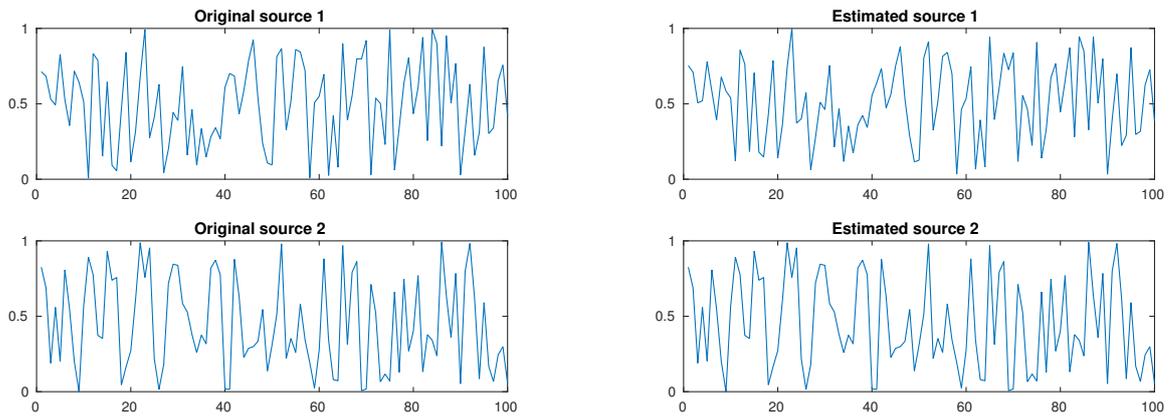


FIGURE 4.1 – Estimation de sources non-négatives par ALS-NMF

Malheureusement, la projection sur le cône des matrices A (ou S) non-négatives fait croître celui-ci, et rien ne garantit que la combinaison des deux opérations résulte en une diminution du critère. Le *package* `nnls` de R fournit une fonction effectuant la minimisation de systèmes $x - As$, dans le cas où x et s sont des vecteurs (et pas des matrices), qui peut (après adaptation) être utilisé à la place de `solve` dans l'algorithme ci-dessus. La décroissance de la fonction objectif est alors garantie, au prix d'un plus grand temps de calcul.

Exemple 4.1. Dans cet exemple on génère des sources non-négatives aléatoires et une matrice de mélange non-négative aléatoire, et l'algorithme ALS est utilisé pour l'estimation.

Données numériques : $N = M = 2$, $L = 1000$, l'algorithme effectue 1000 itérations. L'erreur relative sur les sources est de l'ordre de quelques pourcents.

Les quelques lignes ci-dessous donnent un exemple d'utilisation d'une fonction `als.nmf`, qui prend comme variables d'entrée une matrice de données X , le nombre d'itérations et des matrices de mélange et sources initiales, et retourne une liste contenant deux champs : la matrice de mélange et la matrice de sources estimées. Suite à cela, il est possible de comparer les sources et matrice de mélange obtenues à celles qui ont été utilisées pour générer les données.

```
# Parametres, données
nb.src = 2
nb.obs = 5
nb.time.pts = 200
A0 = matrix(runif(nb.src*nb.obs),ncol=nb.src)
tmp = diag(1/colSums(A0))
A0 = A0 %*% tmp
S0 = matrix(runif(nb.src*nb.time.pts),nrow=nb.src)
X = A0 %*% S0

# Initialisation
Ai = matrix(runif(nb.src*nb.obs),ncol=nb.src)
Si = matrix(runif(nb.src*nb.time.pts),nrow=nb.src)
nb.iter = 5000

# als nmf
tmp = als.nmf(X,nb.iter,Ai,Si)
A = tmp$A
S = tmp$S
```

Remarque 4.4. Le package NMF de R fournit des implémentations de 12 algorithmes différents de NMF, incluant l'algorithme ALS décrit ci-dessus. Il fournit également plusieurs variantes concernant l'initialisation, le critère d'arrêt,...

La syntaxe la plus simple est `tmp = nmf(X,nb.src)` (les variables d'entrée minimales sont les données `X` et le nombre de sources demandées `nb.src`). En reprenant l'Exemple 4.1, on peut remplacer les dernières instructions par les lignes suivantes pour obtenir une matrice de mélange et une matrice de sources. L'algorithme par défaut est l'algorithme multiplicatif de Lee et Seung (décrit plus bas), se renseigner pour voir comment obtenir les autres.

```
tmp = nmf(X,nb.src)
A = tmp@fit@W
S = tmp@fit@H
```

4.2.2 Gradient projeté

L'idée est ici d'utiliser les expressions obtenues au Lemme 4.1 pour en déduire un autre algorithme itératif basé sur une descente de gradient, combinée à une projection sur le cône des matrices non-négatives.

Une fois choisi un pas de gradient $\eta \in \mathbb{R}^+$, les règles de mise à jour correspondantes sont de la forme

$$A^{(t+1)} = \Pi_+ \left[A^{(t)} - \eta^A \nabla_A \Phi(\underline{X} | A^{(t)} \underline{S}^{(t)}) \right] \quad (4.7)$$

$$\underline{S}^{(t+1)} = \Pi_+ \left[\underline{S}^{(t)} - \eta^S \nabla_S \Phi(\underline{X} | A^{(t+1)} \underline{S}^{(t)}) \right], \quad (4.8)$$

où Π_+ est le projecteur orthogonal sur le cône des matrices non-négatives (voir Remarque 4.1).

Les remarques ci-dessus restent d'actualité. En particulier, il est nécessaire d'introduire une règle de normalisation.

Résultat : Factorisation en matrices non-négatives

$t = 0;$

$\underline{S}^0 = \underline{S}_{\text{init}};$

tant que $t \leq \text{iter_max}$ **et** $(\delta_A(t) > \epsilon$ **ou** $\delta_S(t) > \epsilon)$ **faire**

Mise à jour de A : $A^{(t+1)} = A^{(t)} - \eta^A \nabla_A \Phi(\underline{X} | A^{(t)} \underline{S}^{(t)});$

Mise à zéro des coefficients négatifs de A : $A^{(t+1)} = \Pi_+ (A^{(t+1)});$

Normalisation des colonnes de A : $A_{:,m}^{t+1} = A_{:,m}^{t+1} / \|A_{:,m}^{t+1}\|, m = 1, \dots, M;$

Normalisation des lignes de \underline{S} : $\underline{S}_{m,:}^t = \underline{S}_{m,:}^t * \|A_{:,m}^{t+1}\|, m = 1, \dots, M;$

Mise à jour de \underline{S} : $\underline{S}^{(t+1)} = \underline{S}^{(t)} - \eta^S \nabla_S \Phi(\underline{X} | A^{(t+1)} \underline{S}^{(t)});$

Mise à zéro des coefficients négatifs de \underline{S} : $\underline{S}^{(t+1)} = \Pi_+ (\underline{S}^{(t+1)});$

$t = t + 1;$

fin

Algorithme 3 : NMF par descentes de gradients projetés alternés.

4.2.3 Algorithmes multiplicatifs

L'algorithme ALS ci-dessus (ainsi que sa version basée sur `nnls`) fait intervenir à chaque itération deux résolutions de systèmes linéaires. Ceci peut devenir coûteux dans les cas de grande dimension et quand le nombre d'itérations devient important. Par ailleurs, comme on l'a mentionné, la projection sur le cône non-négatif peut contrarier la convergence de l'algorithme.

Pour cette raison, des algorithmes faisant intervenir des itérations plus simples ont été proposés. Le premier d'entre eux [15, 16], qui fait intervenir des mises à jour multiplicatives, a ouvert la voie à de nombreuses variantes.

L'idée de [15, 16] est d'adapter un simple algorithme de descente de gradient en choisissant soigneusement le pas, de sorte que les mises à jour deviennent multiplicatives. Dans le cas de la divergence quadratique, on procède comme suit. Nous savons déjà que

$$[\nabla_A \Phi(\underline{X} | \underline{A} \underline{S})]_{nm} = -2 [\underline{X} \underline{S}^T - \underline{A} \underline{S} \underline{S}^T]_{nm} .$$

De là, une descente de gradient pondérée de la forme

$$a_{nm} \rightarrow a_{nm} - \eta_{nm} \frac{\partial}{\partial a_{nm}} \|\underline{X} - \underline{A} \underline{S}\|^2 = a_{nm} + 2\eta_{nm} [\underline{X} \underline{S}^T - \underline{A} \underline{S} \underline{S}^T]_{nm}$$

se ramène, en prenant pour le pas η_{nm} la valeur

$$\eta_{nm}^A = \frac{1}{2} \frac{a_{nm}}{[\underline{A} \underline{S} \underline{S}^T]_{nm}}$$

à une mise à jour de forme multiplicative

$$a_{nm} \rightarrow p_{nm}^A a_{nm} , \quad \text{avec} \quad p_{nm}^A = \frac{[\underline{X} \underline{S}^T]_{nm}}{[\underline{A} \underline{S} \underline{S}^T]_{nm}} a_{nm} . \quad (4.9)$$

Remarque 4.5. On a implicitement supposé ici que $[\underline{A} \underline{S} \underline{S}^T]_{nm} \neq 0$. Compte tenu de la non-négativité des matrices considérées, $[\underline{A} \underline{S} \underline{S}^T]_{nm} \neq 0$ équivaut à $a_{nk} [\underline{S} \underline{S}^T]_{km} = 0$ pour tout k : donc soit la n -ième ligne de A est uniformément nulle, soit la m -ième colonne de $\underline{S} \underline{S}^T$ est uniformément nulle. La première hypothèse est à rejeter car dans ce cas là, l'observation x_n serait uniformément nulle. La seconde hypothèse implique quant à elle que la m -ième source est uniformément nulle, auquel cas il convient de réduire le nombre de sources recherchées.

De même, partant de

$$[\nabla_S \Phi(\underline{X} | \underline{A} \underline{S})]_{ml} = -2 [A^T \underline{X} - A^T \underline{A} \underline{S}]_{ml} ,$$

une descente de gradient de la forme

$$s_{ml} \rightarrow s_{ml} - \eta_{ml} \frac{\partial}{\partial s_{ml}} \|\underline{X} - \underline{A} \underline{S}\|^2 = s_{ml} + 2\eta_{ml} [A^T \underline{X} - A^T \underline{A} \underline{S}]_{ml}$$

se ramène, en prenant comme pas

$$\eta_{ml}^S = \frac{1}{2} \frac{s_{ml}}{[A^T \underline{A} \underline{S}]_{ml}}$$

à une mise à jour de forme multiplicative

$$s_{ml} \rightarrow p_{ml}^S s_{ml} , \quad \text{avec} \quad p_{ml}^S = \frac{[A^T \underline{X}]_{ml}}{[A^T \underline{A} \underline{S}]_{ml}} . \quad (4.10)$$

Remarque 4.6. On peut faire une remarque similaire à la remarque 4.5 quant à la bonne définition du pas de gradient.

On rappelle la définition du produit de Hadamard.

Définition 4.1 (Produit de Hadamard). Soient $A, B \in \mathcal{M}_{MN}$ deux matrices de même taille. Leur produit de Hadamard est la matrice $A \odot B$ défini par multiplication point par point des éléments de matrices :

$$(A \odot B)_{mn} = a_{mn} b_{mn} .$$

On note similairement les quotients et puissances : si $A, B \in \mathcal{M}_{mn}$ sont telles que $b_{mn} \neq 0 \forall m, n$ et si $\alpha \in \mathbb{R}$,

$$(A \oslash B)_{mn} = a_{mn} / b_{mn} , \quad (A^{\odot \alpha})_{mn} = a_{mn}^\alpha$$

Avec cette notation, l'algorithme de Lee et Seung se base sur les mises à jour multiplicatives

$$A^{(t)} \mapsto A^{(t+1)} = P^A \odot A^{(t)}, \quad \text{avec} \quad P^A = \left(\left[\underline{X} \left(\underline{S}^{(t)} \right)^T \right] \odot \left[A^{(t)} \underline{S}^{(t+1)} \left(\underline{S}^{(t+1)} \right)^T \right] \right) \quad (4.11)$$

$$\underline{S}^{(t)} \mapsto \underline{S}^{(t+1)} = P^S \odot \underline{S}^{(t)}, \quad \text{avec} \quad P^S = \left(\left[\left(A^{(t+1)} \right)^T \underline{X} \right] \odot \left[\left(A^{(t+1)} \right)^T A^{(t+1)} \underline{S}^{(t)} \right] \right) \quad (4.12)$$

Résultat : Factorisation en matrices non-négatives

$t = 0$;

$\underline{S}^0 = \underline{S}_{\text{init}}$;

tant que $t \leq \text{iter_max}$ **et** $(\delta_A(t) > \epsilon$ **ou** $\delta_S(t) > \epsilon)$ **faire**

Mise à jour de A : $A^{(t+1)} = P^A(A^{(t)}, \underline{S}^{(t)}) \odot A^{(t)}$;

Normalisation des colonnes de A : $A_{:,m}^{(t+1)} = A_{:,m}^{(t+1)} / \|A_{:,m}^{(t+1)}\|$, $m = 1, \dots, M$;

Normalisation des lignes de \underline{S} : $\underline{S}_{m,:}^{(t)} = \underline{S}_{m,:}^{(t)} * \|A_{:,m}^{(t+1)}\|$, $m = 1, \dots, M$;

Mise à jour de \underline{S} : $\underline{S}^{(t+1)} = P^S(A^{(t+1)}, \underline{S}^{(t)}) \odot \underline{S}^{(t)}$;

$t = t + 1$;

fin

Algorithme 4 : NMF avec critère quadratique, algorithme multiplicatif.

Remarque 4.7. On a donné ci-dessus une version de l'algorithme dans laquelle on commence par la ré-estimation de \underline{S} . Il va de soi qu'on peut également commencer par la ré-estimation de A .

Remarque 4.8. Comme mentionné dans les remarques 4.5 et 4.6, les dénominateurs dans ces expressions peuvent s'annuler. Par ailleurs, le pas de gradient peut s'annuler. Ces deux problèmes font qu'il n'existe pas à l'heure actuelle de preuve rigoureuse de convergence pour cet algorithme.

Dans [17], C.S. Lin propose de modifier les pas de gradient des algorithmes de Lee et Seung de la façon suivante

$$\eta_{nm}^A = \frac{1}{2} \frac{a_{nm}^{(\sigma)}}{[A \underline{S} \underline{S}^T]_{nm} + \delta} \quad \text{avec} \quad a_{nm}^{(\sigma)} = \begin{cases} a_{nm} & \text{si } (\nabla_A \Phi)_{nm} \geq 0 \\ \max(a_{nm}, \sigma) & \text{si } (\nabla_A \Phi)_{nm} < 0 \end{cases} \quad (4.13)$$

$$\eta_{ml}^S = \frac{1}{2} \frac{s_{ml}^{(\sigma)}}{[A^T A \underline{S}]_{ml} + \delta} \quad \text{avec} \quad s_{ml}^{(\sigma)} = \begin{cases} s_{ml} & \text{si } (\nabla_S \Phi)_{ml} \geq 0 \\ \max(s_{ml}, \sigma) & \text{si } (\nabla_S \Phi)_{ml} < 0 \end{cases} \quad (4.14)$$

où $\delta, \sigma > 0$ sont de petits paramètres. La convergence de l'itération vers un point stationnaire peut alors être prouvée.

Ceci étant, l'algorithme résultant n'est alors plus un algorithme multiplicatif, mais sa complexité reste du même ordre.

4.3 Une famille de divergences : les β -divergences, et les algorithmes multiplicatifs correspondants

4.3.1 β -divergences

Définition 4.2 (Divergences de Bregman). *Soit ϕ une fonction à valeurs réelles, convexe et différentiable. La divergence de Bregman associée est la fonction de deux variables réelles*

$$d_\phi(x, \mu) = \phi(x) - \phi(\mu) - (x - \mu)\phi'(\mu) .$$

On peut noter que $d_\phi(x, \mu)$ n'est autre que le reste du développement de Taylor au premier ordre de $\phi(x)$ au voisinage de μ .

Le cas des β -divergences, s'obtient en prenant pour ϕ la famille paramétrique (uniquement pour $\beta \notin \{0, 1\}$) :

$$\phi_\beta(x) = x^\beta / (\beta(\beta - 1)) \quad \text{pour } \beta \notin \{0, 1\} , \quad (4.15)$$

les cas $\beta = 0$ et $\beta = 1$ s'obtiennent par des passages à la limite. Notons que ϕ_β n'est convexe que si $\beta \geq 1$, ce qui garantit que la divergence correspondante est bornée inférieurement. Plus explicitement, on a

$$d_\beta(x|y) = \begin{cases} \frac{1}{\beta(\beta-1)}(x^\beta + (\beta-1)y^\beta - \beta xy^{\beta-1}) , & \beta \in \mathbb{R} \setminus \{0, 1\} , \\ x \log \frac{x}{y} - x + y , & \beta = 1 , \\ \frac{x}{y} - \log \frac{x}{y} - 1 , & \beta = 0 . \end{cases} \quad (4.16)$$

On peut noter que cette famille inclut comme cas limite la divergence de Kullback-Leibler (KL) quand $\beta \rightarrow 1$, alors que le cas $\beta = 2$ donne le carré de la distance euclidienne. Quelques exemples sont tracés en Figure 4.2.

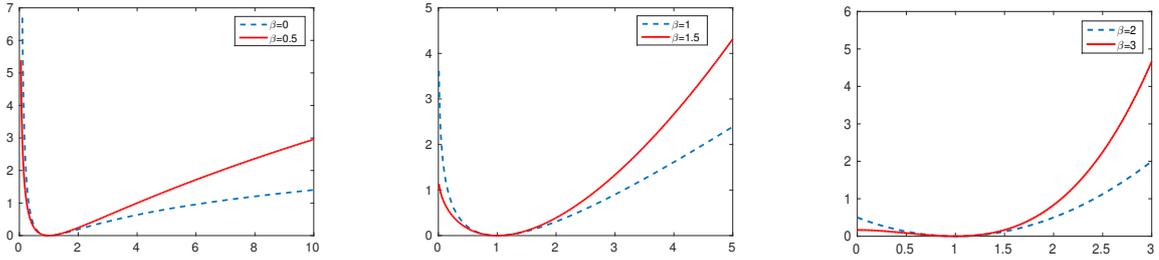


FIGURE 4.2 – β -divergences $d_\beta(1, y)$ en fonction de y pour différentes valeurs de β .

Revenant à notre problème de factorisation $\underline{X} = \underline{A}\underline{S}$, nous allons rechercher des solutions en minimisant une fonctionnelle

$$D_\beta(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}) = \sum_{n,\ell} d_\beta\left(x_{n\ell} \middle| \sum_m a_{nm}s_{m\ell}\right) . \quad (4.17)$$

Il est possible de construire des algorithmes de descente de gradient pour la minimisation de telles divergences, qu'il faut combiner avec une projection sur le cône correspondant à la contrainte de non-négativité. Dans ce qui suit, on va adopter une stratégie différente, appelée **Majoration-Minimisation**, qui consiste à minimiser à chaque étape une borne supérieure de la fonction d'objectif. Une telle stratégie est effective dès que l'on peut calculer simplement de telles bornes supérieures et que leur minimisation peut être effectuée efficacement.

Dans ce qui suit, les majorations seront basées sur une décomposition de la fonction d_β en composantes différentiables convexe, concave et constante, les deux premières étant faciles à majorer (la composante constante ne jouant aucun rôle) :

- Une fonction concave f peut être majorée au voisinage d'un point \tilde{x} par sa tangente à ce point :

$$f(x) \leq f(\tilde{x}) + (x - \tilde{x})f'(\tilde{x})$$

- Une fonction convexe peut être majorée grâce à l'inégalité de Jensen : pour tous x_1, \dots, x_n et p_1, \dots, p_n tels que $\sum_{n=1}^N p_n = 1$,

$$f\left(\sum_{n=1}^N p_n x_n\right) \leq \sum_{n=1}^N p_n f(x_n) .$$

Il se trouve que la définition des fonctions d_β fait apparaître directement de telles composantes concaves, convexes et constantes, qui sont données dans la Table 4.1, avec leurs dérivées respectives

β	$\check{d}(x y)$	$\check{d}'(x y)$	$\hat{d}(x y)$	$\hat{d}'(x y)$	$\bar{d}(x y)$
$\beta < 1, \beta \neq 0$	$-\frac{1}{\beta-1}xy^{\beta-1}$	$-xy^{\beta-2}$	$\frac{1}{\beta}y^\beta$	$y^{\beta-1}$	$\frac{1}{\beta(\beta-1)}x^\beta$
$\beta = 0$	xy^{-1}	$-xy^{-2}$	$\log y$	y^{-1}	$x(\log x - 1)$
$1 \leq \beta \leq 2$	$\frac{1}{\beta}y^\beta - \frac{1}{\beta-1}xy^{\beta-1}$	$\frac{1}{\beta(\beta-1)}x^\beta - xy^{\beta-2}$	0	0	$\frac{1}{\beta(\beta-1)}x^\beta$
$\beta > 2$	$\frac{1}{\beta}y^\beta$	$y^{\beta-1}$	$-\frac{1}{\beta-1}xy^{\beta-1}$	$-xy^{\beta-2}$	$\frac{1}{\beta(\beta-1)}x^\beta$

 TABLE 4.1 – Composantes différentiables convexe, concave et constante de la β -divergence.

Lemme 4.2. Soient \tilde{s}_{kj} et \tilde{a}_{ik} des valeurs de référence pour les éléments de A et \underline{S} respectivement.

1. Les composantes convexes de d_β peuvent être bornées comme

$$\check{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m a_{nm} s_{kj} \right.\right) \leq \sum_m \frac{a_{nm} \tilde{s}_{m\ell}}{\sum_{m'} a_{nm'} \tilde{s}_{m'\ell}} \check{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_{m'} a_{nm'} \tilde{s}_{m'\ell} \frac{s_{m\ell}}{\tilde{s}_{m\ell}} \right.\right)$$

$$\check{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m a_{nm} s_{m\ell} \right.\right) \leq \sum_m \frac{\tilde{a}_{nm} s_{n\ell}}{\sum_{m'} \tilde{a}_{nm'} s_{m'\ell}} \check{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_{m'} \tilde{a}_{nm'} s_{m'\ell} \frac{a_{nm}}{\tilde{a}_{nm}} \right.\right)$$

2. Les composantes concaves de d_β peuvent être bornées comme

$$\hat{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m a_{nm} s_{m\ell} \right.\right) \leq \hat{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m a_{nm} \tilde{s}_{m\ell} \right.\right) + \sum_m a_{nm} (s_{m\ell} - \tilde{s}_{m\ell}) \hat{d}'_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m a_{nm} \tilde{s}_{m\ell} \right.\right)$$

$$\hat{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m a_{nm} s_{m\ell} \right.\right) \leq \hat{d}_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m \tilde{a}_{nm} s_{m\ell} \right.\right) + \sum_k (a_{nm} - \tilde{a}_{nm}) s_{m\ell} \hat{d}'_\beta\left(x_{n\ell} \left| \sum_m \tilde{a}_{nm} s_{m\ell} \right.\right)$$

4.3.2 Algorithmes “Majoration-Minimisation”

Le principe des algorithmes de majoration-minimisation est de rechercher des minima d’une fonction différentiable en utilisant des fonctions de remplacement.

Soit $f : \theta \rightarrow f(\theta) \in \mathbb{R}$ une fonction à minimiser, qu’on suppose différentiable et bornée inférieurement. Pour tout $\tilde{\theta} \in \mathbb{R}$, supposons qu’il existe une fonction $g : \theta \rightarrow g_{\tilde{\theta}}(\theta)$ telle que

$$g_{\tilde{\theta}}(\theta) \geq f(\theta), \quad \text{et} \quad g_{\tilde{\theta}}(\tilde{\theta}) = f(\tilde{\theta}). \quad (4.18)$$

On définit l’itération

$$n \rightarrow \theta_n = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} g_{\theta_{n-1}}(\theta) \quad (4.19)$$

Alors

$$f(\theta_{n+1}) \leq g_{\theta_n}(\theta_{n+1}) \leq g_{\theta_n}(\theta_n) = f(\theta_n),$$

donc chaque itération fait décroître la fonction d’objectif. Si cette dernière est bornée inférieurement, la suite des $f(\theta_n)$ converge.

4.3.3 β -NMF et algorithmes multiplicatifs

On étudie dans cette section la stratégie MM appliquée au problème de NMF basé sur les β divergences. Comme on va le voir, cette stratégie a l’intérêt de conduire dans ce cas à des algorithmes dont les mises à jour sont multiplicatives, et évitent de demander la résolution de problèmes matriciels à chaque itération.

Compte tenu des différentes formes de la décomposition des β divergences, on doit distinguer plusieurs cas. On n’en traite qu’un en détails ici.

Le cas $\beta \geq 2$:

Dans ce cas, on a

$$\check{d}_\beta(x|y) = \frac{1}{\beta} y^\beta, \quad \hat{d}_\beta(x|y) = -\frac{1}{\beta-1} x y^{\beta-1}.$$

1. *Estimation de \underline{S} pour A fixé :* Soit \tilde{S} une matrice de référence (par exemple résultat de l'itération précédente) Pour tout m, ℓ tels que $\tilde{s}_{m\ell} \neq 0$ on pose

$$u_{m\ell} = s_{m\ell} / \tilde{s}_{m\ell}, \quad \text{et} \quad \tilde{x}_{n\ell} = (A\tilde{S})_{n\ell}.$$

On écrit alors

$$\check{d}_\beta(x_{n\ell} | \sum_m a_{nm} s_{m\ell}) \leq \frac{1}{\beta} \sum_m \frac{a_{nm} \tilde{s}_{m\ell}}{\tilde{x}_{n\ell}} (\tilde{x}_{n\ell} u_{m\ell})^\beta = \frac{1}{\beta} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-1} \sum_m a_{nm} \tilde{s}_{m\ell} u_{m\ell}^\beta$$

et

$$\hat{d}_\beta(x_{n\ell} | \sum_m a_{nm} s_{m\ell}) \leq \hat{d}_\beta(x_{n\ell} | \tilde{x}_{n\ell}) - x_{n\ell} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-2} \sum_m a_{nm} \tilde{s}_{m\ell} (u_{m\ell} - 1).$$

On a donc

$$D_\beta(\underline{X} | A\underline{S}) \leq \sum_{n,\ell} \left[\hat{d}_\beta(x_{n\ell} | \tilde{x}_{n\ell}) + \sum_m a_{nm} \tilde{s}_{m\ell} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-2} \left(x_{n\ell} (1 - u_{m\ell}) + \frac{1}{\beta} \tilde{x}_{n\ell} u_{m\ell}^\beta \right) \right] \quad (4.20)$$

Ecrivons maintenant l'équation normale de cette borne supérieure par rapport à un $u_{m\ell}$ particulier :

$$u_{m\ell}^{\beta-1} \sum_n a_{nm} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-1} = \sum_n a_{nm} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-2} x_{n\ell}$$

conduit à

$$u_{m\ell} = \left(\frac{\sum_n a_{nm} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-2} x_{n\ell}}{\sum_n a_{nm} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-1}} \right)^{1/(\beta-1)}$$

soit encore la formule de mise à jour

$$s_{m\ell} = \left(\frac{\sum_n a_{nm} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-2} x_{n\ell}}{\sum_n a_{nm} \tilde{x}_{n\ell}^{\beta-1}} \right)^{1/(\beta-1)} \tilde{s}_{m\ell} \quad (4.21)$$

On peut mettre cette expression sous forme matricielle, en utilisant le produit de Hadamard

$$\underline{S} = \left\{ \left[A^T \left(\tilde{X}^{\odot(\beta-2)} \odot X \right) \right] \odot \left(A^T \tilde{X}^{\odot(\beta-1)} \right) \right\}^{\odot 1/(\beta-1)} \odot \tilde{S} \quad (4.22)$$

2. *Estimation de A pour \underline{S} fixé :* Soit \tilde{A} une matrice de référence (par exemple résultat de l'itération précédente). Pour tout (n, m) tels que $\tilde{a}_{nm} \neq 0$ et tout (n, ℓ) , on pose

$$v_{nm} = a_{nm} / \tilde{a}_{nm}, \quad \text{et} \quad \tilde{y}_{n\ell} = (\tilde{A}\underline{S})_{n\ell}.$$

On écrit alors

$$\check{d}_\beta(x_{n\ell} | \sum_m a_{nm} s_{m\ell}) \leq \frac{1}{\beta} \sum_m \frac{\tilde{a}_{nm} s_{m\ell}}{\tilde{y}_{n\ell}} (\tilde{y}_{n\ell} v_{nm})^\beta = \frac{1}{\beta} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-1} \sum_m \tilde{a}_{nm} s_{m\ell} v_{nm}^\beta$$

et

$$\hat{d}_\beta(x_{n\ell} | \sum_m a_{nm} s_{m\ell}) \leq \hat{d}_\beta(x_{n\ell} | \tilde{y}_{n\ell}) - x_{n\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-2} \sum_m \tilde{a}_{nm} (v_{nm} - 1) s_{m\ell}.$$

ce qui conduit à

$$D_\beta(\underline{X}|\underline{AS}) \leq \sum_{n,\ell} \left[\hat{d}_\beta(x_{n\ell}|\tilde{y}_{n\ell}) + \sum_m \tilde{a}_{nm} s_{m\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-2} \left(x_{n\ell}(1 - v_{nm}) + \frac{1}{\beta} \tilde{y}_{n\ell} v_{nm}^\beta \right) \right].$$

L'équation normale s'écrit

$$v_{nm}^{\beta-1} \sum_\ell s_{m\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-1} = \sum_\ell s_{m\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-2} x_{n\ell},$$

soit

$$v_{nm} = \left(\frac{\sum_\ell s_{m\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-2} x_{n\ell}}{\sum_\ell s_{m\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-1}} \right)^{1/(\beta-1)}.$$

Ainsi on obtient la règle de mise à jour

$$a_{nm} = \left(\frac{\sum_\ell s_{m\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-2} x_{n\ell}}{\sum_\ell s_{m\ell} \tilde{y}_{n\ell}^{\beta-1}} \right)^{1/(\beta-1)} \tilde{a}_{nm} \quad (4.23)$$

qui peut se mettre sous forme matricielle

$$A = \left\{ \left[\left(\tilde{Y}^{\odot(\beta-2)} \odot X \right) \underline{S}^T \right] \odot \left[\left(\tilde{Y}^{\odot(\beta-1)} \right) \underline{S}^T \right] \right\}^{\odot 1/(\beta-1)} \odot \tilde{A} \quad (4.24)$$

Le cas général

Avec les mêmes techniques, on obtient des règles de mise à jour multiplicatives similaires dans le cas général. Le résultat général est dû à C. Févotte et J. Idier [11].

Proposition 4.1. *Avec les notations précédentes, et en choisissant de débiter chaque itération par la mise à jour de la matrice de mélange les règles de mise à jour associées à la stratégie MM pour l'optimisation de la β -divergence s'écrivent sous forme multiplicative*

$$A^{(t)} \mapsto A^{(t+1)} = P^A \odot A^{(t)}, \quad \underline{S}^{(t)} \mapsto \underline{S}^{(t+1)} = P^S \odot \underline{S}^{(t)}$$

où les matrices P^A et P^S sont données par

$$P^A = P^A(A^{(t)}, \underline{S}^{(t)}) = \left\{ \left[\left(\left(A^{(t)} \underline{S}^{(t)} \right)^{\odot(\beta-2)} \odot X \right) \left(\underline{S}^{(t)} \right)^T \right] \odot \left[\left(\left(A^{(t)} \underline{S}^{(t)} \right)^{\odot(\beta-1)} \right) \left(\underline{S}^{(t)} \right)^T \right] \right\}^{\odot \gamma(\beta)}$$

$$P^S = P^S(A^{(t+1)}, \underline{S}^{(t)}) = \left\{ \left[\left(A^{(t+1)} \right)^T \left(\left(A^{(t+1)} \underline{S}^{(t)} \right)^{\odot(\beta-2)} \odot X \right) \right] \odot \left[\left(A^{(t+1)} \right)^T \left(A^{(t+1)} \underline{S}^{(t)} \right)^{\odot(\beta-1)} \right] \right\}^{\odot \gamma(\beta)}$$

où on a posé

$$\tilde{Y} = A^{(t)} \underline{S}^{(t)}, \quad \tilde{X} = A^{(t+1)} \underline{S}^{(t)},$$

et l'exposant γ est donné par

$$\gamma(\beta) = \begin{cases} 1/(2-\beta) & \text{si } \beta \leq 1 \\ 1 & \text{si } 1 \leq \beta \leq 2 \\ 1/(\beta-1) & \text{si } \beta \geq 2 \end{cases}$$

On peut noter que ces expressions généralisent les formules de mise à jour (4.12) et (4.11).

Remarque 4.9. De nouveau, il faut remarquer que ces formules de mise à jour font intervenir un dénominateur, lequel est susceptible de s'annuler. Par conséquent, il est difficile de montrer la convergence de tels algorithmes, d'autant plus que les β -divergences ne sont pas des fonctions convexes en général.

De façon pratique, on peut régulariser les mises à jour en ajoutant un petit paramètre positif au dénominateur et éviter ainsi des instabilités numériques.

4.4 Exercices

Exercice 4.1 (Moindres carrés alternés).

En prenant pour fonction objectif $\Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S})$ la norme de Frobenius au carré, calculer les gradients

$$\nabla_A \Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}), \quad \nabla_S \Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}).$$

On pourra utiliser des formules utiles données dans [18].

En déduire les matrices optimales A_{opt} et S_{opt} de la Propriété 4.1.

Exercice 4.2 (Moindres carrés pénalisés alternés).

On considère maintenant la fonction objectif

$$\Psi(\underline{X}, A, S) = \Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}) + \lambda \|A\|_F^2 + \mu \|S\|_F^2$$

où Φ est le terme quadratique précédent, et où λ et μ sont deux réels strictement positifs.

Calculer les gradients de Ψ par rapport à A et S , et en déduire un algorithme alterné de minimisation de Ψ sous contrainte de non-négativité pour A et S .

Exercice 4.3 (Implementation de l'algorithme ALS).

Implémenter l'algorithme ALS décrit à la section 4.2.1. Le tester sur des mélanges synthétiques non-négatifs.

Exercice 4.4 (β -NMF).

Démontrer les règles de mise à jour de β -NMF de la Proposition 4.1 dans les cas non traités dans la section 4.3.

Exercice 4.5 (Implémentation de l'algorithme β -NMF).

Implémenter β -NMF et le tester sur des mélanges synthétiques, ainsi que sur des exemples à télécharger sur le site web du cours. Il faudra être particulièrement attentif aux problèmes posés par des puissances non-entières de quantités qui peuvent s'annuler, ainsi qu'aux dénominateurs.

Solutions des exercices

5.1 Généralités

Solution de l'exercice 1.1 (Pseudo-inverse)

Vérifions les pseudo-inverses de l'exemple 1.3.

- Par construction la matrice A est de rang inférieur ou égal à 2. Son rang est en fait égal à 2 car ses deux lignes sont linéairement indépendantes. Puisque le rang est égal au nombre de lignes, alors on a

$$A^\dagger = A^T(AA^T)^{-1} = \frac{1}{18} \begin{pmatrix} -17 & 8 \\ -2 & 2 \\ 13 & -4 \end{pmatrix}$$

(calculs effectués sous \mathbb{R}).

- Par construction la matrice B est de rang inférieur ou égal à 2. Son rang est en fait égal à 2 car ses deux colonnes sont linéairement indépendantes. Puisque le rang est égal au nombre de colonnes, alors on a

$$B^\dagger = (B^T B)^{-1} B^T = \frac{1}{18} \begin{pmatrix} -17 & -2 & 13 \\ 8 & 2 & -4 \end{pmatrix}.$$

- Pour ce qui concerne la matrice C , on peut vérifier que son déterminant est nul, elle n'est donc pas inversible. On peut vérifier (avec n'importe quel logiciel de calcul formel ou numérique) que

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}, \quad C^\dagger = \frac{1}{36} \begin{pmatrix} -23 & -6 & 11 \\ -1 & 0 & 2 \\ 19 & 6 & -7 \end{pmatrix}.$$

On peut aussi vérifier directement les résultats sous \mathbb{R} en utilisant la fonction `pinv` du package `lintools`.

Solution de l'exercice 1.2 (Tenseurs)

1. Soient $X, Y \in \mathbb{R}^N = \mathcal{M}_{N,1}(\mathbb{R}) = \mathcal{T}_N^{(1)}(\mathbb{R})$, on considère leur produit scalaire $X \cdot Y = Y^T X$. On peut écrire, composante par composante

$$X \cdot Y = \sum_{n=1}^N X_{n1} Y_{n1} = \sum_{n=1}^N X_{n1} (Y^T)_{1n} = X \bullet_1 Y^T.$$

On peut aussi écrire

$$X \cdot Y = \sum_{n=1}^N (X^T)_{1n} (Y^T)_{1n} = X^T \bullet_2 Y^T.$$

2. Soient $X \in \mathbb{R}^N = \mathcal{T}_N^{(1)}$, et $A \in \mathcal{M}_{MN}(\mathbb{R})$. Alors

$$(AX)_m = \sum_n A_{mn} X_{n1} = (X \bullet_1 A)_m, \quad \text{donc} \quad AX = X \bullet_1 A.$$

3. Dans l'exemple 1.4, $A \in \mathcal{M}_{MP}(\mathbb{R})$ et $B \in \mathcal{M}_{PN}(\mathbb{R})$. Calculons

$$(AB)_{mn} = \sum_p A_{mp} B_{pn} = (B \bullet_1 A)_{mn}.$$

De même,

$$(AB)_{mn} = \sum_p A_{mp} B_{pn} = \sum_p A_{mp} (B^T)_{np} = (A \bullet_2 B^T)_{mn}$$

Solution de l'exercice 1.3 (Equivariance de la densité de probabilités)

Démontrer les propriétés d'équivariance de la densité de probabilités énoncées dans les Propriétés 1.2.

1. Dans le cas unidimensionnel, calculons pour une fonction continue φ arbitraire

$$\mathbb{E}\{\varphi(Y)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(y(x)) \rho_X(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(ax+b) \rho_X(x) dx = \frac{1}{|a|} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(u) \rho_X\left(\frac{u-b}{a}\right) du.$$

Comme on a aussi

$$\mathbb{E}\{\varphi(Y)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(y) \rho_Y(y) dy$$

on en conclut que

$$\rho_Y(y) = \frac{1}{|a|} \rho_X\left(\frac{y-b}{a}\right).$$

2. Dans le cas multidimensionnel, le raisonnement est le même. Soit $\varphi \in C(\mathbb{R}^N)$, quelconque, et calculons

$$\mathbb{E}\{\varphi(Y)\} = \int_{\mathbb{R}^N} \varphi(y(x)) \rho_X(x) dx = \int_{\mathbb{R}^N} \varphi(Ax+B) \rho_X(x) dx = \frac{1}{|\det(A)|} \int_{\mathbb{R}^N} \varphi(u) \rho_X(A^{-1}(u-B)) du.$$

Comme on a aussi

$$\mathbb{E}\{\varphi(Y)\} = \int_{\mathbb{R}^N} \varphi(y) \rho_Y(y) dy$$

on en déduit

$$\rho_Y(y) = \frac{1}{|\det(A)|} \rho_X(A^{-1}(y-B)).$$

Solution de l'exercice 1.4 (Un vecteur gaussien)

Soit X un vecteur gaussien centré de dimension 3, de matrice de covariance

$$\Gamma = \begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

1. X possède une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^3 si et seulement si $\det(\Gamma) > 0$. Le calcul donne $\det(\Gamma) = 16$, donc X a bien une densité. Pour l'obtenir, il faut calculer

$$\Gamma^{-1} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

de sorte que la densité s'écrit, pour tout $x = (x_1, x_2, x_3)$

$$\begin{aligned}\rho_X(x) &= \frac{1}{4(2\pi)^{3/2}} \exp \left[-\frac{1}{16} x^T \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} x \right] \\ &= \frac{1}{4(2\pi)^{3/2}} \exp \left[-\frac{1}{16} (3x_1^2 + 3x_2^2 + 4x_3^2 + 2x_1x_2) \right].\end{aligned}$$

2. Soit $A \in \mathcal{M}_3(\mathbb{R})$, et soit $Y = (Y_1, Y_2, Y_3) = AX$. Toutes les combinaisons linéaires des composantes de Y sont aussi combinaisons linéaires de composantes de X , et sont donc des variables aléatoires normales. Donc Y est un vecteur gaussien. On sait donc que ses coordonnées sont indépendantes si et seulement si elles sont décorrélées, ce qui équivaut à dire que la matrice de covariance de Y est diagonale, on la notera D . Or on sait que

$$D = A\Gamma A^T.$$

Γ étant réelle symétrique, ceci équivaut à la diagonalisation de Γ . Le calcul donne

$$\Gamma = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

on peut donc prendre

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

ou tout multiple de cette matrice.

3. On note $X = (X_1, X_2, X_3)^T$. $Z = X_1 + 2X_2 - X_3$ est une combinaison linéaire des coordonnées de X qui est un vecteur gaussien, Z est donc une variable aléatoire normale. X étant centré, Z l'est aussi : $\mathbb{E}\{Z\} = 0$. Il suffit donc de déterminer la variance de Z . Pour cela, il suffit d'écrire que $Z = BX$, où B est la matrice ligne $B = (1 \ 2 \ -1)$. On a alors

$$\sigma_Z^2 = B\Gamma B^T = (1 \ 2 \ -1) \begin{pmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} = 13.$$

Par conséquent, $Z \sim \mathcal{N}(0, 13)$.

Solution de l'exercice 1.5 (Génération d'un vecteur gaussien)

En supposant X_1, X_2 normales centrées réduites et indépendantes, et en posant $Z = AX + B$, on voit facilement que $Z \sim \mathcal{N}(B, AA^T)$. Il faut donc prendre

$$B = m^T,$$

et trouver A telle que $\Sigma = AA^T$. Pour cela, il suffit de partir d'une diagonalisation de Σ , soit $\Sigma = PDP^T$ (rappelons que Σ est réelle symétrique). Par ailleurs, Σ étant semi-définie positive, les valeurs propres sont positives ou nulles, donc la matrice diagonale $D^{1/2}$ est bien définie. On peut donc écrire $\Sigma = (PD^{1/2})(PD^{1/2})^T$, ce qui suggère de choisir

$$A = PD^{1/2}.$$

Comme alternative, on peut aussi utiliser une factorisation de Cholesky : si M est une matrice réelle symétrique semi-définie positive, il existe une matrice réelle triangulaire inférieure L telle que $M = LL^T$. On peut donc prendre pour A la matrice triangulaire inférieure L telle que $\Sigma = LL^T$.

Solution de l'exercice 2.2 (Cumulants)

1. D'après la formule, on voit facilement que

$$\mathcal{C}_X^{(1)} = \mathbb{E}\{X\}, \quad \left(\mathcal{C}_X^{(2)}\right)_{ij} = \mathbb{E}\{X_i X_j\} - \mathbb{E}\{X_i\}\mathbb{E}\{X_j\} = (\Sigma_X)_{ij}.$$

A l'ordre 3, on a

$$\left(\mathcal{C}_X^{(3)}\right)_{ijk} = \mathbb{E}\{X_i X_j X_k\} - [\mathbb{E}\{X_i X_j\}\mathbb{E}\{X_k\} + \text{perm.}] + 2\mathbb{E}\{X_i\}\mathbb{E}\{X_j\}\mathbb{E}\{X_k\},$$

où l'expression +perm. signifie que l'on somme toutes les permutations des indices, et à l'ordre 4

$$\begin{aligned} \left(\mathcal{C}_X^{(4)}\right)_{ijkl} &= \mathbb{E}\{X_i X_j X_k X_\ell\} - [\mathbb{E}\{X_i X_j\}\mathbb{E}\{X_k X_\ell\} + \text{perm.}] \\ &\quad - [\mathbb{E}\{X_i X_j X_k\}\mathbb{E}\{X_\ell\} + \text{perm.}] + 2[\mathbb{E}\{X_i X_j\}\mathbb{E}\{X_k X_\ell\} + \text{perm.}] \\ &\quad - 6\mathbb{E}\{X_i\}\mathbb{E}\{X_j\}\mathbb{E}\{X_k\}\mathbb{E}\{X_\ell\}. \end{aligned}$$

2. A l'ordre 1, on voit facilement que

$$\mathcal{M}_{AX}^{(1)} = \mathbb{E}\{AX\} = A\mathbb{E}\{X\} = A\mathcal{M}_X^{(1)} = \mathcal{M}_X^{(1)} \bullet_1 A,$$

d'après la question 2 de l'exercice 1.2. On a aussi

$$\mathcal{M}_{AX}^{(2)} = \mathbb{E}\{AXX^T A^T\} = A\mathbb{E}\{XX^T\}A^T = A\mathcal{M}_X^{(2)}A^T = \mathcal{M}_X^{(2)} \bullet_1 A \bullet_2 A,$$

d'après la question 3 de l'exercice 1.2.

Aux ordres supérieurs, on ne peut plus bénéficier du calcul matriciel. Calculons

$$\left(\mathcal{M}_{AX}^{(3)}\right)_{ijk} = \mathbb{E}\left\{\sum_{\ell,m,n} A_{\ell i} A_{m j} A_{n k} X_\ell X_m X_n\right\} = \sum_{\ell,m,n} A_{i\ell} A_{jm} A_{kn} \left(\mathcal{M}_X^{(3)}\right)_{\ell mn},$$

donc

$$\mathcal{M}_{AX}^{(3)} = \mathcal{M}_X^{(3)} \bullet_1 A \bullet_2 A \bullet_3 A$$

Le calcul à l'ordre 4 est rigoureusement identique, de même que les calculs à tous les ordres.

3. Pour démontrer que l'estimateur de la matrice de corrélations donné dans l'expression (1.27) est sans biais, il suffit de reprendre la démonstration de la même propriété pour la matrice de covariance usuelle.
- 4.

Solution de l'exercice 1.7 (Entropie)

1. a) Dans le cas fini, la contrainte $\sum_{n=1}^N p_n = 1$ peut être imposée en utilisant un multiplicateur de Lagrange. Ceci revient à chercher un maximum de la fonction

$$\Phi(P, \lambda) = -\sum_{n=1}^N p_n \log_2(p_n) + \lambda \left(\sum_{n=1}^N p_n - 1 \right).$$

Les équations normales par rapport aux probabilités p_n permettent d'exprimer ces dernières en fonction de λ , et l'équation normale par rapport à λ donne la contrainte, et fixe la valeur de λ . Plus précisément, en annulant la dérivée par rapport à un p_n particulier, on obtient

$$-\log_2(p_n) - \frac{1}{\ln(2)} + \lambda = 0,$$

donc les p_n sont constants. La contrainte donne alors $p_n = 1/N$ pour tout n . La valeur correspondante de l'entropie est donc

$$H_{\max} = \log_2(N) ,$$

c'est la valeur maximale. L'entropie est une fonction concave, sa valeur minimale est atteinte sur les bords du domaine $[0, 1]^N$ (sous contrainte $\sum_n p_n = 1$), soit quand toutes les probabilités p_n sont nulles sauf une qui vaut 1. On a alors

$$H_{\min} = 0 .$$

- b) Dans le cas continu : on introduit un multiplicateur de Lagrange λ pour la contrainte $\int \rho(x)dx = 1$ et un autre pour la contrainte $\int x^2 \rho(x)dx = 1$. Ceci conduit à maximiser par rapport à ρ la fonctionnelle

$$\begin{aligned} \Psi[\rho, \lambda, \mu] &= - \int \rho(x) \log_2(\rho(x)) dx + \lambda \left[\int \rho(x) dx - 1 \right] + \mu \left[\int x^2 \rho(x) dx - 1 \right] \\ &= \int \mathcal{L}[x, \rho(x), \rho'(x)] dx . \end{aligned}$$

Il suffit alors d'écrire l'équation d'Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho}[x, \rho(x), \rho'(x)] - \frac{d}{dx} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho'}[x, \rho(x), \rho'(x)] = 0 ,$$

qui donne

$$-\log_2(\rho(x)) - \frac{1}{\ln(2)} + \lambda + \mu x^2 = 0 ,$$

dont la solution est de la forme

$$\rho(x) = K e^{-ax^2} ,$$

où les constantes a et K sont à déterminer, en utilisant les contraintes. Le calcul donne $a = 1/2$ et $K = 1/\sqrt{2\pi}$, de sorte que

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} .$$

puis de procéder comme plus haut.

2. Pour démontrer la propriété d'équivariance de l'entropie du lemme 1.2, calculons

$$\begin{aligned} H_{AX} &= - \int_{\mathbb{R}^N} \rho_{AX}(y) \log_2(\rho_{AX}(y)) dy \\ &= - \frac{1}{|\det(A)|} \int_{\mathbb{R}^N} \rho_X(A^{-1}y) \log_2 \left(\frac{\rho_X(A^{-1}y)}{|\det A|} \right) dy \\ &= - \int_{\mathbb{R}^N} \rho_X(x) \log_2(\rho_X(x)) dx + \log_2(|\det(A)|) \\ &= H_X + \log_2(|\det(A)|) . \end{aligned}$$

Remarquons que cette propriété reste vraie si on remplace AX par $AX + B$, où B est un vecteur fixe.

Solution de l'exercice 1.8 (Inégalité de Gibbs)

Pour démontrer l'inégalité de Gibbs de la Proposition 1.1, calculons

$$KL(P^\circ|P) = \sum_n p_i \log_2 \left(\frac{p_i}{q_i} \right) = - \sum_n p_i \log_2 \left(\frac{q_i}{p_i} \right) \geq \log_2 \left(\sum_i p_i \frac{q_i}{p_i} \right) = \log_2 \left(\sum_i q_i \right) = 0 ,$$

où on a utilisé la concavité du logarithme : pour tous réels positifs u_1, \dots, u_N , et toute distribution de probabilités p_1, \dots, p_N ,

$$\log \left(\sum_i p_i u_i \right) \geq \sum_i p_i \log(u_i) ,$$

où \log représente le logarithme dans n'importe quelle base. La concavité du logarithme peut aussi s'écrire dans le cas continu : pour toute densité de probabilités ρ et toute fonction à valeurs positives ou nulles f telle que les intégrales ci-dessous soient convergentes, on a

$$\log \left(\int \rho(x) f(x) dx \right) \geq \int \rho(x) \log f(x) dx .$$

On peut en déduire l'inégalité de Gibbs pour les densités de probabilités.

Solution de l'exercice 1.9 (Information mutuelle)

Soit $\Sigma = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ une matrice symétrique définie positive. Le calcul donne

$$\mathbb{I}_{(X,Y)^T} = \frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{ac}{ac - b^2} \right) .$$

Le fait que Σ soit définie positive implique que $ac - b^2 > 0$. De plus, l'information mutuelle s'annule si et seulement si $ac = ac - b^2$, soit $b = 0$, le cas indépendant.

Solution de l'exercice 1.10 (Cumulants (2))**Solution de l'exercice 1.11 (ACP)****5.2 Analyse en composantes indépendantes****Solution de l'exercice 2.1 (Information mutuelle et négentropie)**

1. Soit X un vecteur aléatoire gaussien de moyenne μ et matrice de covariance Σ . On peut facilement montrer que $X = \Sigma^{1/2}W + \mu$, où W est un vecteur aléatoire gaussien centré réduit de même dimension que X . De la même façon que l'on a montré la relation d'équivariance de l'entropie, on montre que

$$H_X = H_W + \log_2 \left(\det \left(\Sigma^{1/2} \right) \right) = H_W + \frac{1}{2} \log(\det(\Sigma)) .$$

Reste à calculer l'entropie du vecteur aléatoire W . L'entropie d'un vecteur indépendant est la somme des entropies de ses composantes. Ici celles-ci sont $\mathcal{N}(0, 1)$, leur entropie vaut

$$\frac{-1}{\sqrt{2\pi} \ln(2)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \left[-\frac{1}{2} \ln(2\pi) - \frac{x^2}{2} \right] dx = \frac{1}{2 \ln(2)} [\ln(2\pi) + 1] = \frac{1}{2} \log_2(2\pi e) .$$

On obtient donc

$$H_X = \frac{N}{2} \log_2(2\pi e) + \frac{1}{2} \log_2(\det(\Sigma)) .$$

- 2.
3. Pour démontrer la formule (2.4), utilisons le résultat précédent, appliquée à un vecteur Gaussien $G \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ et au vecteur $G_I \sim \mathcal{N}(\mu_I, \Sigma_I)$ indépendant correspondant. Dans ce cas, $\mu_I = \mu$, et $\Sigma_I = \text{diag}(\Sigma)$, de sorte que $\text{Tr}(\Sigma_I^{-1}\Sigma) = N$. On a donc

$$\text{IM}_G = \frac{1}{2 \ln(2)} \ln \left(\frac{|\det(\Sigma_I)|}{|\det(\Sigma)|} \right) = \frac{1}{2} \log_2 \left(\frac{\prod_k \Sigma_{kk}}{|\det(\Sigma)|} \right) .$$

4. En utilisant la formule d'équivariance de la densité, on a $\rho_{AX}(y) = \rho_X(A^{-1}y)/|\det(A)|$. De plus, si $g(x)$ est la densité de la loi gaussienne de même covariance que X , alors la densité de la gaussienne de même covariance que AX est $y \rightarrow g(A^{-1}y)/|\det(A)|$. Calculons alors

$$\begin{aligned} J_{AX} &= \int_{\mathbb{R}^M} \frac{1}{|\det(A)|} \rho_X(A^{-1}y) \log_2 \left(\frac{\rho_X(A^{-1}y)}{g(A^{-1}y)} \right) dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^M} \rho_X(x) \log_2 \left(\frac{\rho(x)}{g(x)} \right) dx = J_X , \end{aligned}$$

où on a effectué le changement de variable $y \rightarrow x = A^{-1}y$.

5. Soit donc Y un vecteur aléatoire de dimension M , et calculons

$$\begin{aligned} \text{IM}_Y &= \int \rho_Y(y_1, \dots, y_M) \log_2 \left(\frac{\rho_Y(y_1, \dots, y_M)}{\rho_{Y_1}(y_1) \dots \rho_{Y_M}(y_M)} \right) dy_1 \dots dy_M \\ &= -H_Y + \int \rho_Y(y_1, \dots, y_M) \sum_{m=1}^M \log_2(\rho_{Y_m}(y_m)) dy_1 \dots dy_M \\ &= -H_Y + \sum_{m=1}^M H_{Y_m} , \end{aligned}$$

où la dernière ligne résulte du calcul de l'intégrale par rapport à tous les y_k , $k \neq m$.

Il suffit ensuite de remarquer que $H_Y = H_G + J_Y$, où G est un vecteur Gaussien de mêmes moyenne et covariance que Y , puis d'appliquer l'expression obtenue plus haut à G :

$$\text{IM}_G = -H_G + \sum_{m=1}^M H_{G_m} .$$

On obtient ainsi

$$\begin{aligned} \text{IM}_Y &= \text{IM}_G - J_Y + \sum_{m=1}^M H_{Y_m} - \sum_{m=1}^M H_{G_m} \\ &= \text{IM}_G - J_Y + \sum_{m=1}^M J_{Y_m} , \end{aligned}$$

ce qui est le résultat demandé.

Solution de l'exercice 2.2 (Cumulants)

Calculons, pour tout tenseur $T \in \mathcal{T}_{I_1, \dots, I_K}(\mathbb{R})$ d'ordre K , et toute matrice orthogonale $A \in O(I_n)$

$$\begin{aligned} \|T \bullet_n A\|_F^2 &= \sum_{i_1, \dots, i_K} |T \bullet_n A|_{i_1, \dots, i_K}^2 \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_n, \dots, i_K} \sum_{j, j'=1}^{I_n} T_{i_1 \dots j \dots i_K} A_{i_n j} T_{i_1 \dots j' \dots i_K} A_{i_n j'} \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_K} |T|_{i_1, \dots, i_K}^2 = \|T\|_F^2 , \end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que

$$\sum_{i_n=1}^{I_n} A_{i_n j} A_{i_n j'} = (A^T A)_{j j'} = \delta_{j j'} ,$$

puisque A est orthogonale (c'est à dire telle que $A^T A = I_{I_n}$).

5.3 Identification à l'ordre deux

Solution de l'exercice 3.1 (Filtrage de convolution)

On se place dans le cadre de l'exemple 3.2. Etant donnée une suite numérique $a \in \ell^1(\mathbb{Z})$, sa transformée de Fourier discrète $\hat{a} : [-1/2, 1/2] \rightarrow \mathbb{R}$ est définie par

$$\hat{a}(\nu) = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} a(\ell) e^{-2i\pi\nu\ell} .$$

Etant donnée une telle suite numérique a et un bruit blanc (une suite infinie $W(\ell)$ de variables aléatoires du second ordre i.i.d. de moyenne nulle et variance σ^2), on introduit le bruit blanc filtré par le produit de convolution

$$X = a * W : \quad X(\ell) = \sum_k a(k) W(\ell - k) .$$

1. On voit que pour tout entier positif L ,

$$\left| \sum_{\ell=-L}^L a(\ell) e^{-2i\pi\nu\ell} \right| \leq \sum_{\ell=-L}^L |a(\ell)| \leq \|a\|_1 ,$$

on en déduit donc par passage à la limite que $|\hat{a}(\nu)| \leq \|a\|_1$ pour tout ν . \hat{a} est donc bornée. Par ailleurs, soit $L > |\ell|$ posons $\hat{a}_L(\nu) = \sum_{n=-L}^L a(n) e^{-2i\pi\nu n}$, et calculons

$$\begin{aligned} \int_{-1/2}^{1/2} \hat{a}_L(\nu) e^{2i\pi\nu\ell} d\nu &= \int_{-1/2}^{1/2} \sum_{n=-L}^L a(n) e^{-2i\pi\nu n} e^{2i\pi\nu\ell} d\nu \\ &= \sum_{n=-L}^L a(n) \int_{-1/2}^{1/2} e^{2i\pi\nu(\ell-n)} d\nu \\ &= \sum_{n=-L}^L a(n) \delta_{n\ell} = a(\ell) , \end{aligned}$$

où l'interversion de la somme et l'intégrale est justifiée par le fait que la somme est finie. Le passage à la limite $L \rightarrow \infty$ conduit au résultat.

2. Par linéarité de l'espérance, on a

$$\mathbb{E} \{X(\ell)\} = \sum_k a(k) \mathbb{E} \{W(\ell - k)\} = 0 ,$$

donc X est centré. Par ailleurs calculons

$$\mathbb{E} \{X(\ell) \overline{X}(\ell - \tau)\} = \sum_{k, k'} a(k) \overline{a(k')} \mathbb{E} \{W(\ell - k) \overline{W}(\ell - \tau - k')\} = \sum_k a(k) \overline{a(k - \tau)} ,$$

qui est indépendant de ℓ , X est donc stationnaire en moyenne quadratique.

3. De là on déduit

$$\mathbb{E} \{X(\ell)\overline{X}(\ell - \tau)\} = \sum_k \int_{-1/2}^{1/2} \int_{-1/2}^{1/2} \hat{a}(\nu) e^{2i\pi\nu k} \overline{\hat{a}(\nu')} e^{-2i\pi\nu'(k-\tau)} d\nu d\nu' = \int_{-1/2}^{1/2} |\hat{a}(\nu)|^2 e^{2i\pi\nu\tau} d\nu ,$$

où on a utilisé la formule sommatoire de Poisson $\sum_k e^{2i\pi\alpha k} = \sum_n \delta(\alpha - n)$. On en déduit que X admet la densité spectrale

$$\mathcal{S}_X(\nu) = |\hat{a}(\nu)|^2 .$$

Solution de l'exercice 3.2 (Densité spectrale matricielle) _____

Soit donc X un signal aléatoire multivarié du second ordre, stationnaire en moyenne quadratique, et notons $\tau \rightarrow \mathcal{R}_X(\tau) = \mathbb{E} \{X(\tau)X(0)^*\}$ ses matrices d'autocorrélation.

1. Commençons par remarquer que $\mathcal{R}_X(\tau)^* = \mathcal{R}_X(-\tau)$. On en déduit alors, pour tout τ

$$\int_{-1/2}^{1/2} e^{-2i\pi\nu\tau} \mathcal{S}_X(\tau)^* d\tau = \int_{-1/2}^{1/2} e^{-2i\pi\nu\tau} \mathcal{S}_X(\tau) d\tau ,$$

d'où on déduit $\mathcal{S}_X(\tau) = \mathcal{S}_X(\tau)^*$, ainsi que $\mathcal{S}_X(-\tau) = \overline{\mathcal{S}_X(\tau)}$.

A suivre...

2. Comme S est du second ordre, X est du second ordre aussi (les composantes de X sont des combinaisons linéaires finies de composantes de S). Similairement, S centré implique que X est centré aussi. On a vu aussi que la stationnarité en moyenne quadratique de X entraîne celle de S . Calculons maintenant

$$\mathcal{R}_X(\tau) = \mathbb{E} \{X(\tau)X(0)^*\} = \mathbb{E} \{AS(\tau)S(0)^*A^*\} = A\mathbb{E} \{S(\tau)S(0)^*\}A^T = A\mathcal{R}_S(\tau)A^* ,$$

ce qui est le résultat désiré (dans le cas réel, remplacer les adjoints "*" par des transpositions).

Solution de l'exercice 3.3 (Simulation et estimation spectrale) _____

Solution de l'exercice 3.4 (Simulation, SOBI et AMUSE) _____

Solution de l'exercice 3.5 (SOBI et AMUSE sur signaux benchmark) _____

Solution de l'exercice 3.6 (Indice d'Amari) _____

L'indice d'Amari est une mesure de dissimilarité entre deux matrices non singulières, utilisé pour tester des solutions en séparation de sources (mais aussi analyser les propriétés de convergence d'un algorithme). Etant données deux matrices carrées $W_1, W_2 \in \mathcal{M}_M(\mathbb{R})$, en supposant W_2 inversible, on pose $A = W_1W_2^{-1}$ et on introduit l'indice

$$D(W_1|W_2) = \frac{1}{2M(M-1)} \sum_{j=1}^M \left(\frac{\sum_i |a_{ij}|}{\max_i |a_{ij}|} - 1 \right) + \frac{1}{2M(M-1)} \sum_{i=1}^M \left(\frac{\sum_j |a_{ij}|}{\max_j |a_{ij}|} - 1 \right)$$

$D(W_1|W_2)$ est d'autant plus petit que les deux matrices W_1 et W_2 sont proches.

L'indice d'Amari est implémenté dans JADE dans la fonction `amari.error`.

5.4 NMF

Solution de l'exercice 4.1 (Moindres carrés alternés)

Pour calculer les gradients

$$\nabla_A \Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}) , \quad \nabla_A \Phi(\underline{X}|\underline{A}\underline{S}) ,$$

il est utile de rappeler quelques notions sur la norme de Frobenius, le produit scalaire correspondant et des règles de dérivation vectorielles et matricielles. On rappelle donc qu'étant données deux matrices A, B de même taille, on définit leur produit scalaire de Frobenius par

$$\langle A, B \rangle_F = \text{Tr}(AB^*) = \sum_{i,j} a_{ij} \bar{b}_{ji} ,$$

et que la propriété de la trace implique que $\langle B, A \rangle_F = \text{Tr}(BA^*) = \text{Tr}(A^*B) = \overline{\langle A, B \rangle_F}$ assure la propriété d'Hermiticité du produit scalaire de Frobenius. La norme de Frobenius est définie par $\|A\|_F = \sqrt{\langle A, A \rangle_F} = \sqrt{\text{Tr}(AA^*)}$ (dans le cas réel, remplacer A^* par A^T et B^* par B^T).

On écrit tout d'abord le critère

$$\begin{aligned} \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|_F^2 &= \|\underline{X}\|_F^2 - \text{Tr}(\underline{X}\underline{S}^T A^T) - \text{Tr}(\underline{X}^T \underline{A}\underline{S}) + \text{Tr}(\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T A^T) \\ &= \|\underline{X}\|_F^2 - 2\text{Tr}(\underline{X}^T \underline{A}\underline{S}) + \text{Tr}(\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T A^T) . \end{aligned}$$

Il est possible de calculer les gradients de ces termes composante par composante. Ceci dit, il est plus rapide d'utiliser les formules de dérivation matricielle (voir par exemple dans [18]), en particulier

$$\nabla_X \text{Tr}(AX) = A^T , \quad \nabla_X \text{Tr}(AXBX^T C) = A^T C^T X B^T + C A X B ,$$

pour toutes matrices conformantes (c'est à dire telles que les produits existent). On en déduit

$$\nabla_A \text{Tr}(\underline{X}^T \underline{A}\underline{S}) = \nabla_A \text{Tr}(\underline{A}\underline{S}\underline{X}^T) = \underline{X}\underline{S}^T , \quad \nabla_S \text{Tr}(\underline{X}^T \underline{A}\underline{S}) = \nabla_S \text{Tr}(\underline{S}\underline{X}^T A) = A^T \underline{X} ,$$

ainsi que

$$\nabla_A \text{Tr}(\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T A^T) = 2\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T , \quad \nabla_S \text{Tr}(\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T A^T) = \nabla_S \text{Tr}(\underline{S}\underline{S}^T A^T A) = 2A^T \underline{A}\underline{S} .$$

De là on tire

$$\begin{aligned} \nabla_A \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|_F^2 &= 2(\underline{A}\underline{S}\underline{S}^T - \underline{X}\underline{S}^T) \\ \nabla_S \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|_F^2 &= 2(A^T \underline{A}\underline{S} - A^T \underline{X}) \end{aligned}$$

Finalement, supposant les matrices $A^T A$ et $\underline{S}\underline{S}^T$ inversibles, on obtient les expressions des matrices optimales A_{opt} et $\underline{S}_{\text{opt}}$ de la Propriété 4.1 :

$$\begin{aligned} A_{\text{opt}} &= \underline{X}\underline{S}^T(\underline{S}\underline{S}^T)^{-1} = \underline{X}\underline{S}^\dagger \\ \underline{S}_{\text{opt}} &= (A^T A)^{-1} A^T \underline{X} = A^\dagger \underline{X} , \end{aligned}$$

où on a noté respectivement \underline{S}^\dagger et A^\dagger les pseudo-inverses de \underline{S} et A .

Remarque. Si on veut se passer des règles de dérivation matricielle, on peut calculer composante par composante. Par exemple (attention aux indices, ne pas utiliser comme indices de sommation les indices de l'élément de matrice par rapport auquel on dérive)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a_{nm}} \|\underline{X} - \underline{A}\underline{S}\|_F^2 &= \frac{\partial}{\partial a_{nm}} \sum_{n',\ell} \left(x_{n'\ell} - \sum_{m'} a_{n'm'} s_{m'\ell} \right)^2 \\ &= \frac{\partial}{\partial a_{nm}} \left[\sum_{n',\ell} x_{n'\ell}^2 - 2 \sum_{n',m',\ell} x_{n'\ell} a_{n'm'} s_{m'\ell} + \sum_{n',\ell} \sum_{m',m''} a_{n'm'} s_{m'\ell} a_{n'm''} s_{m''\ell} \right] \end{aligned}$$

La dérivée du premier terme est nulle. Le second terme est linéaire par rapport aux coefficients de la matrice A , et donne

$$\frac{\partial}{\partial a_{nm}} \sum_{n',m',\ell} x_{n'\ell} a_{n'm'} s_{m'\ell} = \sum_{\ell} x_{n\ell} s_{m\ell} = (\underline{X} \underline{S}^T)_{nm} .$$

Le dernier terme est quadratique par rapport aux éléments de A . Ses dérivées partielles donnent

$$\frac{\partial}{\partial a_{nm}} \sum_{n',\ell} \sum_{m',m''} a_{n'm'} s_{m'\ell} a_{n'm''} s_{m''\ell} = \sum_{m'',\ell} s_{m\ell} a_{nm} s_{m''\ell} + \sum_{m',\ell} a_{nm'} s_{m'\ell} s_{m\ell} = 2(\underline{A} \underline{S} \underline{S}^T)_{nm} .$$

En recollant les morceaux on retrouve bien l'expression précédente $\nabla_A \|\underline{X} - \underline{A} \underline{S}\|_F^2 = 2(\underline{A} \underline{S} \underline{S}^T - \underline{X} \underline{S}^T)$. Le calcul de l'autre gradient se fait de façon similaire.

Solution de l'exercice 4.2 (Moindres carrés pénalisés alternés) _____

On a déjà calculé plus haut les gradients du terme d'attache aux données $\|\underline{X} - \underline{A} \underline{S}\|_F^2$. Avec des arguments similaires, on obtient

$$\nabla_A \|\underline{A}\|^2 = \nabla_A \text{Tr}(\underline{A} \underline{A}^T) = 2\underline{A} , \quad \nabla_{\underline{S}} \|\underline{S}\|^2 = 2\underline{S} .$$

Du coup, les équations normales prennent la forme

$$\underline{A} \underline{S} \underline{S}^T - \underline{X} \underline{S}^T + \lambda \underline{A} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \underline{A} = \underline{X} \underline{S}^T (\underline{S} \underline{S}^T + \lambda \mathbf{I})^{-1}$$

et

$$\underline{A}^T \underline{A} \underline{S} - \underline{A}^T \underline{X} + \mu \underline{S} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \underline{S} = (\underline{A}^T \underline{A} + \mu \mathbf{I})^{-1} \underline{A}^T \underline{X} .$$

Notons que cette fois, si λ et μ sont strictement positifs, les deux inverses existent. En effet, $\underline{A}^T \underline{A}$ est semi-définie positive (ses valeurs propres sont positives ou nulles), et ajouter un multiple strictement positif de l'identité rend les valeurs propres strictement positives. Même argument pour l'autre équation.

De là, on peut mettre en place un algorithme alterné du type `als` similaire à l'algorithme 2.

Solution de l'exercice 4.3 (Implementation de l'algorithme ALS) _____

Voir TP faits en cours.

Solution de l'exercice 4.4 (β -NMF) _____

Le cas $1 < \beta \leq 2$:

Dans ce cas, on a

$$\check{d}_\beta(x|y) = \frac{1}{\beta} y^\beta - \frac{1}{\beta-1} x y^{\beta-1} , \quad \hat{d}_\beta(x|y) = 0 ,$$

on n'a besoin que de l'inégalité de Jensen.

Démontrer les règles de mise à jour de β -NMF de la Proposition 4.1 dans les cas non traités ci-dessus.

Solution de l'exercice 4.5 (Implementation de l'algorithme β -NMF) _____



Index

- ACP, 19
- Algorithme Majoration-Minimisation, 58
- Analyse en composantes principales, 19

- Blanchiment, 28, 32

- Cocktail Party, 5
- Cumulants, 11
- Cumulants : estimation, 14

- Densité de probabilités, 10
- Densité spectrale, 42
- Densité spectrale matricielle, 42
- Densité : équivariance, 10
- Divergence de Kullback-Leibler, 16
- Décomposition de Karhunen-Loève, 18
- Décomposition en valeurs singulières, 20
- Déflation, 36

- Entropie de Shannon, 14
- Entropie différentielle, 15
- Entropie : estimation, 17
- Entropie : équivariance, 15
- Estimation spectrale, 46

- Factorisation, 7
- FFT, 46
- Fonction caractéristique, 10
- Formule de Leonov et Shirayev, 12

- Identifiabilité, 6
- Indétermination, 6
- InfoMax, 30
- Information mutuelle, 16
- Inégalité de Gibbs, 16

- Matrice circulante, 19

- Matrice de dé-mélange, 7
- Matrice de mélange, 6
- Matrices d'autocorrélation, 41
- Mesure interspectrale, 42
- Mesure spectrale, 42
- Mesure spectrale matricielle, 42
- Moments, 11
- Moments : estimation, 13
- Mélange linéaire instantané, 6
- Mélanges convolutifs, 7
- Mélanges non-linéaires, 7

- Négentropie, 30

- Processus stationnaire en moyenne quadratique, 41
- Produit k -mode, 9
- Produit de Hadamard, 56
- Pré-blanchiment, 31
- Pseudo-inverse, 8
- Puce à ADN, 5
- Périodogramme, 46
- Périodogramme de Welch, 47

- Réponse impulsionnelle, 43

- Seconde fonction caractéristique, 12
- Signal aléatoire, 41
- SVD, 20
- Système MIMO, 5

- Tenseur, 8, 9
- Tenseur des cumulants, 11
- Tenseur des moments, 11
- Transformation de Fourier finie, 46
- Transformation de Fourier rapide, 46

- Vecteur aléatoire cyclique, 19

Bibliographie

- [1] Bell, A. et Sejnowski, T.: *An information maximisation approach to blind separation and blind deconvolution*. Neural Computation, 7(6) :1129–1159, 1995.
- [2] Belouchrani, A., Abed-Meraim, K., Cardoso, J. F. et Moulines, E.: *Second-order blind separation of temporally correlated sources*. Dans *Proceedings of the International Conference on Digital Signal Processing*, p. 346–351, 1993.
- [3] Belouchrani, A., Abed-Meraim, K., Cardoso, J. F. et Moulines, E.: *A blind source separation technique using second-order statistics*. IEEE Transactions on Signal Processing, 45(2) :434–444, 1997.
- [4] Cardoso, J. F., Castella, M., Chevreuril, A., Comon, P., Dégerine, S., De Lathauer, L., Jutten, C., Macchi, O., Moreau, E., Pesquet, J. C., Pham, D. T. et Zaidi, A.: *Séparation de sources : concepts de base et analyse en composantes indépendantes*. Traité IC2 Information-Commande-Communication. Lavoisier, hermes sciences editions, 2007.
- [5] Cardoso, J. F. et Souloumiac, A.: *Blind beamforming for non-Gaussian signals*. IEE Proceedings F - Radar and Signal Processing, 140(6) :362–370, Dec 1993, ISSN 0956-375X.
- [6] Cardoso, J. F. et Souloumiac, A.: *Jacobi angles for simultaneous diagonalization*. SIAM journal on matrix analysis and applications, 17(1) :161–164, 1996.
- [7] Cichocki, A. et Amari, S. i.: *Adaptive Blind Signal and Image Processing*. Wiley, 2002.
- [8] Comon, P.: *Remarques sur la diagonalisation tensorielle par la méthode de Jacobi*. Dans *XIV-ième Colloque GRETSI, Juan les Pins, France, 1993*.
- [9] Comon, P.: *Independent component analysis, A new concept ?* Signal Processing, 36 :287–314, 1994.
- [10] Comon, P. et Sorensen, M.: *Tensor diagonalization by orthogonal transforms*. rap. tech., Report ISRN I3S-RR-2007-06-FR, 2007.
- [11] Févotte, C. et Idier, J.: *Algorithms for nonnegative matrix factorization with the β -divergence*. Neural Computation, 23(9) :2421–2456, 2011.
- [12] Hyvärinen, A.: *Fast and Robust Fixed-Point Algorithms for Independent Component Analysis*. IEEE Transactions on Neural Networks, 10(3) :626–634, 1999.
- [13] Hyvärinen, A., Karhunen, J. et Oja, E.: *Independent Component Analysis*. Wiley, 2001.
- [14] Lacoume, J. L., Amblard, P. O. et Comon, P.: *Statistiques d'ordre supérieur pour le traitement du signal*. Masson, 1997.
- [15] Lee, D. et Seung, H.: *Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization*. Nature, 401 :788–791, 1999.

- [16] Lee, D. et Seung, H.: *Algorithms for non-negative matrix factorization*. Advances in Neural Information Processing Systems, 13 :556–562, 2001.
- [17] Lin, C. J.: *On the Convergence of Multiplicative Update Algorithms for Nonnegative Matrix Factorization*. IEEE Transactions on Neural Networks, 18(6) :1589–1596, 2007.
- [18] Petersen, K. et Pedersen, M. S.: *The Matrix Cookbook*, November 2012. <http://www2.imm.dtu.dk/pubdb/p.php?3274>, Version 20121115.
- [19] Sheather, S. J.: *Density Estimation*. Statistical Science, 19(4) :588–597, 2004. http://www.stat.washington.edu/courses/stat527/s13/readings/Sheather_StatSci_2004.pdf.
- [20] Silverman, B. W.: *Density Estimation for Statistics and Data Analysis*. CRC Press, 1986.