

# Séparation bayésienne de sources spectrales sous contraintes de positivité et d'additivité

Nicolas DOBIGEON<sup>1</sup>, Saïd MOUSSAOUI<sup>2</sup>, Jean-Yves TOURNERET<sup>1</sup>

<sup>1</sup>IRIT/ENSEEIH/TS&SA

2 rue Charles Camichel, BP 7122, 31071 Toulouse cedex 7, France

<sup>2</sup>IRCCyN – CNRS UMR 6597

1 rue de la Noë, BP 92101, 44321 Nantes Cedex 3, France

{Nicolas.Dobigeon, Jean-Yves.Tourneret}@enseeiht.fr, Said.Moussaoui@irccyn.ec-nantes.fr

**Résumé** – Cet article décrit une méthode d'analyse de mélanges de sources spectrales lorsque des contraintes d'additivité et de positivité sont imposées sur les coefficients du mélange. Nous définissons un modèle bayésien hiérarchique permettant de traduire ces contraintes qui sont alors prises en compte par méthode d'estimation bayésienne couplée à un échantillonneur de Gibbs. L'algorithme résultant est illustré sur un mélange synthétique.

**Abstract** – This paper addresses the problem of spectral unmixing under positivity and additivity constraints for the mixing coefficients. A hierarchical Bayesian model is introduced to satisfy these positivity and additivity constraints. A Gibbs sampler is then studied to simulate samples distributed according to the posterior of the unknown parameters associated to this Bayesian model. Simulation results conducted with synthetic data illustrate the performance of the proposed algorithm.

## 1 Introduction

Nous considérons dans cet article un problème de séparation de sources spectrales qui est rencontré en :

1. chimie analytique où le spectre d'absorbance d'une substance multicomposantes est d'après la loi de Beer-Lambert un mélange linéaire des signatures spectrales des composantes pondéré par les concentrations de ces composantes ;
2. imagerie hyperspectrale où le spectre de réflectance issu d'un pixel de l'image est interprété comme un mélange linéaire des réflectances de différents constituants de la zone géographique correspondant à ce pixel. La pondération de chaque spectre dans le mélange correspond à l'abondance du constituant.

Ainsi, sous hypothèse de linéarité du mélange, le modèle d'observation s'écrit :

$$y_{i,j} = \sum_{m=1}^M c_{i,m} s_{m,j} + e_{i,j}, \quad (1)$$

où  $y_{i,j}$  est le spectre du mélange observé à l'instant  $i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) dans la  $j^{\text{ième}}$  bande spectrale ( $j = 1, \dots, L$ ),  $N$  est la taille de l'échantillon,  $M$  est le nombre de composants dans la substance observée et  $L$  est le nombre de longueurs d'onde (ou le nombre de bandes spectrales). Le coefficient  $c_{i,m}$  est la contribution du  $m^{\text{ième}}$  composant chimique à l'instant  $i$  et  $e_{i,j}$  est un bruit additif modélisant les erreurs de mesure et du modèle. Les séquences de bruit  $\mathbf{e}_i = [e_{i,1}, \dots, e_{i,L}]^T$  sont supposées indépendantes, identiquement distribuées (i.i.d.) suivant une loi normale centrée de variance  $\sigma_{e,i}^2$ . Des notations matricielles standard permettent d'écrire pour les  $N$  observations dans les

$L$  bandes spectrales :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{C}\mathbf{S} + \mathbf{E}, \quad (2)$$

où  $\mathbf{Y} = [y_{i,j}]_{i,j} \in \mathbb{R}^{N \times L}$ ,  $\mathbf{C} = [c_{i,m}]_{i,m} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ ,  $\mathbf{S} = [s_{m,j}]_{m,j} \in \mathbb{R}^{M \times L}$  et  $\mathbf{E} = [e_{i,j}]_{i,j} \in \mathbb{R}^{N \times L}$ . En vertu de considérations physiques évidentes, les vecteurs de concentrations  $\mathbf{c}_i = [c_{i,1}, \dots, c_{i,M}]^T$  et les spectres  $\mathbf{s}_m = [s_{m,1}, \dots, s_{m,L}]^T$ , pour  $m = 1, \dots, M$ , doivent vérifier des contraintes de positivité. De plus, certaines analyses comme les cinétiques chimiques [1] nécessitent que les coefficients de concentration  $[c_{i,1}, \dots, c_{i,M}]$  soient soumis également à des contraintes d'additivité. Le problème de démixage spectral étudié dans cet article consiste donc à estimer conjointement la matrice des concentrations  $\mathbf{C}$  et la matrice des spectres  $\mathbf{S}$  sous les contraintes de positivité et d'additivité suivantes :

$$\begin{cases} s_{m,j} \geq 0 \text{ et } c_{i,m} \geq 0, & \forall (i, m, j), \\ \sum_{m=1}^M c_{i,m} = 1 & \forall i. \end{cases} \quad (3)$$

Dans [2], une méthode d'inférence bayésienne est proposée pour réaliser la séparation de sources sous la contrainte de positivité des sources et des coefficients de mélange. Nous présentons dans ce papier, une méthode permettant d'inclure également la contrainte d'additivité dans le modèle bayésien, en proposant une loi *a priori* adéquate. De plus, la prise en compte de cette contrainte d'additivité va permettre de lever l'indétermination d'échelle (point évoqué dans [3]).

## 2 Modèle bayésien hiérarchique

### 2.1 Fonction de vraisemblance

Les propriétés statistiques du vecteur de bruit  $\mathbf{e}_i$  ainsi que le modèle de mélange linéaire (1) nous permettent d'écrire  $\mathbf{y}_i \sim \mathcal{N}(\mathbf{S}^\top \mathbf{c}_i, \sigma_{e,i}^2 \mathbf{I}_L)$ , avec  $\mathbf{y}_i = [y_{i,1}, \dots, y_{i,L}]^\top$ , où  $\mathcal{N}(\cdot, \cdot)$  représente la loi normale et  $\mathbf{I}_L$  est la matrice identité de taille  $L \times L$ . En supposant l'indépendance entre les vecteurs  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_N$ , la vraisemblance des observations  $\mathbf{Y}$  est :

$$f(\mathbf{Y}|\mathbf{C}, \mathbf{S}, \sigma_e^2) \propto \frac{1}{\prod_{i=1}^N \sigma_{e,i}^L} \exp \left[ \sum_{i=1}^N -\frac{\|\mathbf{y}_i - \mathbf{S} \mathbf{c}_i^\top\|^2}{2\sigma_{e,i}^2} \right], \quad (4)$$

où  $\sigma_e^2 = [\sigma_{e,1}^2, \dots, \sigma_{e,N}^2]^\top$ ,  $\|\mathbf{x}\|^2 = \mathbf{x}^\top \mathbf{x}$  est la norme  $L^2$  et  $\propto$  signifie "proportionnel à".

### 2.2 Lois *a priori* des paramètres

#### 2.2.1 Coefficients de concentration

En utilisant les contraintes d'additivité introduites dans (3), les vecteurs de régression peuvent être décomposés sous la forme  $\mathbf{c}_i = [\mathbf{a}_i^\top, c_{i,M}]^\top$  avec  $\mathbf{a}_i^\top = [c_{i,1}, \dots, c_{i,M-1}]$  et  $c_{i,M} = 1 - \sum_{m=1}^{M-1} c_{i,m}$ . La loi *a priori* naturelle pour les vecteurs  $\mathbf{a}_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , est une loi uniforme sur le simplexe suivant<sup>1</sup> :

$$\mathbb{S} = \left\{ \mathbf{a}_i \mid a_{i,m} \geq 0, \forall m = 1, \dots, M-1, \sum_{m=1}^{M-1} a_{i,m} \leq 1 \right\}. \quad (5)$$

En supposant l'indépendance *a priori* entre les vecteurs  $\mathbf{a}_i$ , la loi *a priori* pour la matrice d'abondance  $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_N]^\top$  s'écrit  $f(\mathbf{A}) = \prod_{i=1}^N \mathbf{1}_{\mathbb{S}}(\mathbf{a}_i)$ , où  $\mathbf{1}_{\mathbb{S}}(\cdot)$  est la fonction indicatrice définie sur le simplexe  $\mathbb{S}$ .

#### 2.2.2 Spectres des sources

Plusieurs lois à support positif peuvent être envisagées comme lois *a priori* du spectre de chaque source. Pour des raisons de simplifications calculatoires, il apparaît tout de même judicieux de choisir une loi qui soit conjuguée. Comme nous le verrons au paragraphe 3, il est en effet intéressant que la loi conditionnelle  $f(\mathbf{S}|\sigma_s^2, \mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$  soit simple à simuler. Nous nous limiterons dans les paragraphes 2.4 et 3 à décrire un modèle basé sur une loi normale tronquée. En revanche, au paragraphe 4, nous comparerons des résultats de démélange aveugle obtenus grâce à ce modèle et des résultats obtenus lorsqu'une loi exponentielle est choisie comme loi *a priori* pour les sources.

Une loi normale tronquée à support positif est donc choisie comme loi *a priori* pour chaque source  $\mathbf{s}_m$  :

$$\mathbf{s}_m | \sigma_{s,m}^2 \sim \mathcal{N}^+(\mathbf{0}_L, \sigma_{s,m}^2 \mathbf{I}_L), \quad (6)$$

où  $\mathbf{0}_L$  est le vecteur de  $L$  zéros et  $\mathcal{N}^+(\mathbf{u}, \mathbf{V})$  est une loi normale tronquée positive de vecteur moyenne  $\mathbf{u}$  et de matrice de covariance  $\mathbf{V}$ . La densité de probabilité de cette loi

multivariée tronquée notée  $\phi_+(\cdot|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma})$  vérifie la relation :

$$\phi^+(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma}) \propto \phi(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma}) \mathbf{1}_{\mathbb{R}_+^L}(\mathbf{x}), \quad (7)$$

où  $\phi(\cdot|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\Sigma})$  est la densité de probabilité de la loi normale multivariée usuelle sur  $\mathbb{R}^L$  de vecteur moyenne  $\boldsymbol{\theta}$  et de matrice de covariance  $\boldsymbol{\Sigma}$ . En supposant l'indépendance entre les spectres  $\mathbf{s}_m$  ( $m = 1, \dots, M$ ), la loi *a priori* de  $\mathbf{S}$  s'écrit :

$$f(\mathbf{S}|\sigma_s^2) = \prod_{m=1}^M \phi^+(\mathbf{s}_m|\mathbf{0}_L, \sigma_{s,m}^2 \mathbf{I}_L), \quad (8)$$

avec  $\sigma_s^2 = [\sigma_{s,1}^2, \dots, \sigma_{s,M}^2]^\top$ .

#### 2.2.3 Variance du bruit

Des lois *a priori* conjuguées inverse Gamma sont choisies pour  $\sigma_{e,i}^2$  :

$$\sigma_{e,i}^2 | \rho_e, \psi_e \sim \mathcal{IG} \left( \frac{\rho_e}{2}, \frac{\psi_e}{2} \right), \quad (9)$$

où  $\mathcal{IG} \left( \frac{\rho_e}{2}, \frac{\psi_e}{2} \right)$  désigne la loi inverse Gamma de paramètres  $\frac{\rho_e}{2}$  et  $\frac{\psi_e}{2}$ . En supposant l'indépendance entre les variances du bruit  $\sigma_{e,i}^2$ ,  $i = 1, \dots, N$ , la loi *a priori* de  $\sigma_e^2$  s'écrit :

$$f(\sigma_e^2 | \rho_e, \psi_e) = \prod_{i=1}^N f(\sigma_{e,i}^2 | \rho_e, \psi_e). \quad (10)$$

L'hyperparamètre  $\rho_e$  est fixé à  $\rho_e = 2$  tandis que  $\psi_e$  est un hyperparamètre ajustable comme dans [4].

### 2.3 Lois *a priori* des hyperparamètres

Une loi conjuguée inverse Gamma est choisie comme loi *a priori* pour chaque variance  $\sigma_{s,m}^2$ . En supposant l'indépendance *a priori* entre les différentes variances, la loi *a priori* de l'hyperparamètre  $\sigma_s^2$  s'écrit :

$$f(\sigma_s^2 | \rho_s, \psi_s) = \prod_{m=1}^M \mathcal{IG} \left( \sigma_{s,m}^2; \frac{\rho_s}{2}, \frac{\psi_s}{2} \right). \quad (11)$$

Les paramètres  $\rho_s$  et  $\psi_s$  sont fixés de manière à obtenir une loi *a priori* non informative.

La loi *a priori* de  $\psi_e$  est une loi non-informative de Jeffrey qui traduit l'absence de connaissance concernant cet hyperparamètre :

$$f(\psi_e) = \frac{1}{\psi_e} \mathbf{1}_{\mathbb{R}^+}(\psi_e). \quad (12)$$

L'indépendance entre les différents hyperparamètres permet d'exprimer la loi *a priori* du vecteur d'hyperparamètres  $\Phi = \{\sigma_s^2, \psi_e\}$  :

$$f(\Phi) \propto \prod_{m=1}^M \left[ \frac{1}{\sigma_{s,m}^{\rho_s+2}} \exp \left( -\frac{\psi_s}{2\sigma_{s,m}^2} \right) \right] \frac{1}{\psi_e} \mathbf{1}_{\mathbb{R}^+}(\psi_e). \quad (13)$$

### 2.4 Loi *a posteriori* de $\Theta$

La loi *a posteriori* du vecteur de paramètres inconnus  $\Theta = \{\mathbf{A}, \mathbf{S}, \sigma_e^2\}$  peut être calculée à partir de la structure hiérarchique suivante :

$$f(\Theta|\mathbf{Y}) \propto \int f(\mathbf{Y}|\Theta) f(\Theta|\Phi) f(\Phi) d\Phi, \quad (14)$$

<sup>1</sup>Nous remarquons que ce choix est équivalent à choisir des lois de Dirichlet  $\mathcal{D}_M(1, \dots, 1)$  comme lois *a priori* pour  $\mathbf{c}_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ).

où  $f(\mathbf{Y}|\Theta)$  et  $f(\Phi)$  ont été définies dans (4) et (13). De plus, en supposant l'indépendance entre  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{S}$  et  $\sigma_e^2$ , le résultat suivant peut-être obtenu :

$$f(\Theta|\Phi) = f(\mathbf{A}) f(\mathbf{S}|\sigma_s^2) f(\sigma_e^2|\rho_e, \psi_e), \quad (15)$$

où  $f(\mathbf{A})$ ,  $f(\mathbf{S}|\sigma_s^2)$  et  $f(\sigma_e^2|\rho_e, \psi_e)$  ont été définies précédemment. Cette structure hiérarchique nous permet d'intégrer le vecteur d'hyperparamètre  $\Phi = \{\psi_e, \sigma_s^2\}$  de la loi jointe  $f(\Theta, \Phi|\mathbf{Y})$  :

$$f(\mathbf{A}, \mathbf{S}, \sigma_e^2|\mathbf{Y}) \propto \prod_{m=1}^M \left[ \left[ \psi_s + \|\mathbf{s}_m\|^2 \right]^{-\frac{L+\rho_s}{2}} \mathbf{1}_{\mathbb{R}_+^L}(\mathbf{s}_m) \right] \\ \times \prod_{i=1}^N \mathbf{1}_{\mathbb{S}}(\mathbf{a}_i) \prod_{i=1}^N \left[ \left( \frac{1}{\sigma_{e,i}^2} \right)^{\frac{L}{2}+1} \exp \left[ -\frac{\|\mathbf{y}_i - \mathbf{S}\mathbf{c}_i\|^2}{2\sigma_{e,i}^2} \right] \right].$$

### 3 Méthodes MCMC

L'estimation des paramètres d'intérêt est effectuée en utilisant des méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov (MCMC). Compte tenu du nombre important d'inconnues, nous utilisons l'algorithme de Gibbs pour la génération d'échantillons distribués suivant la loi *a posteriori*  $f(\mathbf{A}, \mathbf{S}, \sigma_e^2|\mathbf{Y})$ . Les échantillons simulés sont ensuite utilisés pour estimer les sources et les concentrations. Les étapes principales de cet échantillonneur sont détaillées ci-dessous.

#### 3.1 Échantillonnage suivant $f(\mathbf{A}|\mathbf{S}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$

D'après le modèle d'observation et de la loi a priori sur les coefficients de mélange, nous pouvons écrire :

$$f(\mathbf{a}_i|\mathbf{S}, \sigma_{e,i}^2, \mathbf{y}_i) \propto \exp \left[ -\frac{(\mathbf{a}_i - \boldsymbol{\mu}_i)^\top \boldsymbol{\Lambda}_i^{-1} (\mathbf{a}_i - \boldsymbol{\mu}_i)}{2} \right] \mathbf{1}_{\mathbb{T}}(\mathbf{a}_i), \quad (16)$$

où

$$\begin{cases} \boldsymbol{\Lambda}_i = \left[ \frac{1}{\sigma_{e,i}^2} (\mathbf{S} - \mathbf{s}_M \mathbf{u}^\top)^\top (\mathbf{S} - \mathbf{s}_M \mathbf{u}^\top) \right]^{-1}, \\ \boldsymbol{\mu}_i = \boldsymbol{\Lambda}_i \left[ \frac{1}{\sigma_{e,i}^2} (\mathbf{S} - \mathbf{s}_M \mathbf{u}^\top)^\top (\mathbf{y}_i - \mathbf{s}_M) \right], \end{cases} \quad (17)$$

avec  $\mathbf{u} = [1, \dots, 1]^\top \in \mathbb{R}^{M-1}$ . Par conséquent,  $\mathbf{a}_i|\mathbf{S}, \sigma_{e,i}^2, \mathbf{y}_i$  est distribué suivant une loi multivariée normale tronquée définie sur le simplexe  $\mathbb{S}$  :

$$\mathbf{a}_i|\mathbf{S}, \sigma_{e,i}^2, \mathbf{y}_i \sim \mathcal{N}_{\mathbb{S}}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Lambda}_i). \quad (18)$$

Lorsque le nombre de composants chimiques est relativement faible, la génération des vecteurs  $\mathbf{a}_i|\mathbf{S}, \sigma_{e,i}^2, \mathbf{y}_i$  peut s'effectuer grâce à une étape classique de Metropolis Hastings (M-H). Pour des problèmes de dimensions plus importantes, le taux d'acceptation de l'algorithme de M-H peut devenir très petit, conduisant à de mauvaises propriétés de mélanges. Dans ce cas, une stratégie alternative basée sur un échantillonneur de Gibbs peut être utilisée (voir [5] et [6]).

#### 3.2 Échantillonnage suivant $f(\sigma_e^2|\mathbf{A}, \mathbf{S}, \mathbf{Y})$

La simulation suivant cette loi conditionnelle s'effectue en deux étapes :

- Simulation suivant  $f(\psi_e|\sigma_e^2)$  qui est exprimée selon :

$$\psi_e|\sigma_e^2 \sim \mathcal{IG} \left( \frac{N\rho_e}{2}, \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_{e,i}^2} \right), \quad (19)$$

- Simulation suivant  $f(\sigma_e^2|\psi_e, \mathbf{A}, \mathbf{S}, \mathbf{Y})$ . En regardant attentivement la loi jointe  $f(\sigma_e^2, \psi_e, \mathbf{A}|\mathbf{S}, \mathbf{Y})$ , la loi conditionnelle de  $\sigma_{e,i}^2|\mathbf{c}_i, \psi_e, \mathbf{S}, \mathbf{y}_i$  est, pour  $i \in \{1, \dots, N\}$ , la loi inverse Gamma suivante :

$$\sigma_{e,i}^2|\psi_e, \mathbf{c}_i, \mathbf{S}, \mathbf{y}_i \sim \mathcal{IG} \left( \frac{L + \rho_e}{2}, \frac{\psi_e + \|\mathbf{y}_i - \mathbf{S}\mathbf{c}_i\|^2}{2} \right). \quad (20)$$

#### 3.3 Échantillonnage suivant $f(\mathbf{S}|\mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$

Pour générer des échantillons distribués suivant la loi conditionnelle des sources  $f(\mathbf{S}|\mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$ , il est très pratique d'échantillonner suivant  $f(\sigma_s^2, \mathbf{S}|\mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$  de la manière suivante :

- Simulation suivant  $f(\sigma_s^2|\mathbf{S}, \mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$ . La loi conditionnelle de la variance de chaque spectre source est une loi inverse Gamma ( $m = 1, \dots, M$ ) :

$$\sigma_{s,m}^2|\mathbf{s}_m \sim \mathcal{IG} \left( \frac{L + \rho_s}{2}, \frac{\psi_s + \|\mathbf{s}_m\|^2}{2} \right). \quad (21)$$

- Simulation suivant  $f(\mathbf{S}|\sigma_s^2, \mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$ . La loi conditionnelle de chaque spectre source  $f(\mathbf{s}_m|\sigma_s^2, \mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y})$  est une loi normale à support positif ( $m = 1, \dots, M$ ) :

$$\mathbf{s}_m|\sigma_s^2, \mathbf{A}, \sigma_e^2, \mathbf{Y} \sim \mathcal{N}_+(\boldsymbol{\lambda}_m, \delta_m^2 \mathbf{I}_L), \quad (22)$$

où

$$\begin{cases} \boldsymbol{\lambda}_m = \delta_m^2 \left[ \sum_{i=0}^N \frac{\boldsymbol{\epsilon}_{i,m}}{\eta_{i,m}^2} \right]^\top, \\ \delta_m^2 = \left[ \sum_{i=0}^N \frac{1}{\eta_{i,m}^2} \right]^{-1}, \\ \boldsymbol{\epsilon}_{i,m} = \frac{\mathbf{y}_i - \mathbf{S}_{-m} \mathbf{c}_{i,-m}}{c_{i,m}}, \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \eta_{0,m}^2 = \sigma_{s,m}^2, \\ \eta_{i,m}^2 = \frac{\sigma_{e,i}^2}{c_{i,m}^2}, \\ \boldsymbol{\epsilon}_{0,m} = \mathbf{0}_L, \end{cases} \quad (23)$$

et où  $\mathbf{S}_{-m}$  (respectivement  $\mathbf{c}_{i,-m}$ ) représente la matrice  $\mathbf{S}$  (respectivement le vecteur  $\mathbf{c}_i$ ) dans laquelle la  $m^{\text{ième}}$  colonne (respectivement dans lequel le  $m^{\text{ième}}$  coefficient) a été supprimée.

## 4 Illustration et discussion

### 4.1 Mélange synthétique

Afin d'illustrer la méthode proposée, nous considérons le cas d'une cinétique chimique faisant intervenir trois composantes ( $M=3$ ). Afin d'obtenir une forme de ces sources similaire à celle des spectres d'absorption, celles-ci sont simulées comme une superposition de motifs gaussiens et lorentziens de paramètres (position, amplitude et largeur) choisis de façon aléatoire. La réaction est observée à  $N = 15$  instants sur  $L = 1000$  longueurs d'onde (fréquences).

Nous avons également considéré que les coefficients de mélange ont les mêmes profils d'évolution qu'une cinétique chimique avec un seul intermédiaire réactionnel [3]. Un bruit i.i.d. gaussien de moyenne nulle et de variance adéquate est ajouté à chaque spectre de mélange de sorte à obtenir un rapport signal à bruit de 20dB. La figure 1 illustre une réalisation du mélange à l'aide de ce modèle synthétique.

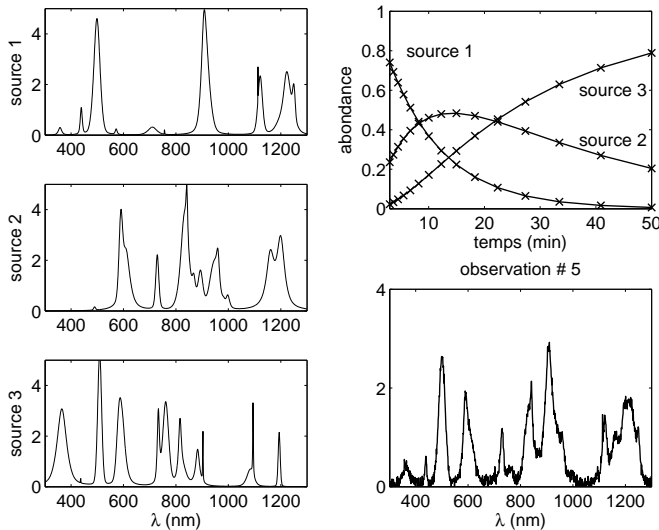


FIG. 1 – Exemple de mélange synthétique simulé

La figure FIG. 2-a montre une comparaison entre les coefficients de mélange simulés et les estimateurs MMSE obtenus pour une chaîne de Markov de longueur  $N_{MC} = 1000$  incluant  $N_{b-i} = 500$  itérations de chauffage. Les coefficients du mélange sont estimés correctement par la méthode proposée tout en satisfaisant les contraintes de positivité et d'additivité et permet également de lever l'indétermination d'échelle.

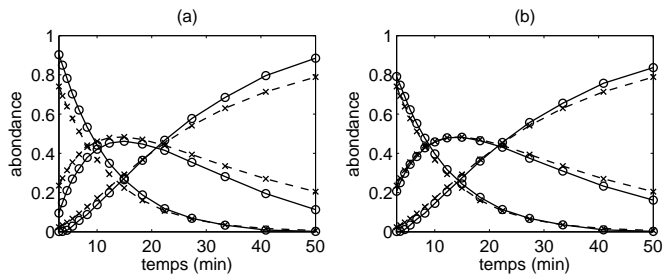


FIG. 2 – Coefficients de mélange simulés (croix) et estimés (cercles) avec un a priori gaussien positif (a) ou exponentiel (b) sur les sources.

## 4.2 Choix de la loi a priori sur les sources

Un second point de la discussion concerne le choix de la loi *a priori* sur les sources. Comme signalé précédemment, plusieurs choix de lois *a priori* sont possibles, pourvu que ces lois soient à support positif et permettent de traduire des informations disponibles sur les sources. Le premier modèle proposé est fondé sur une loi normale tronquée comme loi *a priori* des sources. Une analyse similaire est

menée en choisissant une loi exponentielle  $\mathcal{E}(\cdot)$  de paramètre  $\sigma_{s,m}^2$  :

$$f(\mathbf{s}_m | \sigma_{s,m}^2) = \prod_{j=1}^L \frac{1}{\sigma_{s,m}^2} \exp\left[-\frac{s_{m,j}}{\sigma_{s,m}^2}\right] \mathbf{1}_{\mathbb{R}^+}(s_{m,j}).$$

En comparaison, sont représentés sur la FIG. 2-b les estimateurs MMSE des concentrations fournis par le modèle bayésien basé sur cette alternative. Nous remarquons alors que les résultats sont sensiblement meilleurs que ceux obtenus avec une loi normale tronquée. Concernant la qualité de l'estimation des sources, le tableau 1 récapitule le résultat d'une simulation de Monte Carlo, avec 100 réalisations, en conservant la même matrice de concentrations mais en générant aléatoirement des sources. Les performances sont exprimées en terme d'erreur quadratique moyenne normalisée, définie selon :

$$\text{EQMN} = \frac{\sum_{m,j} (s_{m,j} - \hat{s}_{m,j})^2}{\sum_{m,j} (s_{m,j})^2}.$$

	gaussien positif	exponentiel
sources	0.0395	0.0117
concentrations	0.0355	0.0047

TAB. 1 – Erreur quadratique moyenne d'estimation des sources et des concentrations pour deux lois *a priori*.

Cette amélioration de la qualité de l'estimation à la fois des sources et des concentrations montre une meilleure adéquation de la loi exponentielle pour des signaux de spectroscopie d'absorption, comparée à une loi normale à support positif.

## Références

- [1] A. de Juan and R. Tauler, "Chemometrics applied to unravel multicomponent processes and mixtures : Revisiting latest trends in multivariate resolution," *Analytica Chimica Acta*, vol. 500, no. 1-2, pp. 195-210, Dec. 2003.
- [2] S. Moussaoui, D. Brie, A. Mohammad-Djafari, and C. Carteret, "Separation of non-negative mixture of non-negative sources using a Bayesian approach and MCMC sampling," *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 54, no. 11, pp. 4133-4145, Nov. 2006.
- [3] S. Moussaoui, C. Carteret, D. Brie, and A. Mohammad-Djafari, "Bayesian analysis of spectral mixture data using Markov chain Monte Carlo methods," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 81, no. 2, pp. 137-148, April 2006.
- [4] E. Punsakaya, C. Andrieu, A. Doucet, and W. Fitzgerald, "Bayesian curve fitting using MCMC with applications to signal segmentation," *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 50, no. 3, pp. 747-758, March 2002.
- [5] N. Dobigeon and J.-Y. Tourneret, "Efficient sampling according to a multivariate Gaussian distribution truncated on a simplex," IRT/ENSEEIH/TéSA, Tech. Rep., March 2007. [Online]. Available : <http://www.enseeiht.fr/~dobigeon>
- [6] C. P. Robert, "Simulation of truncated normal variables," *Statistics and Computing*, vol. 5, no. 2, pp. 121-125, June 1995.