

Forme lissée de rapports de normes ℓ_p/ℓ_q (SPOQ) pour la reconstruction des signaux avec pénalisation parcimonieuse

Afef Cherni^a, Emilie Chouzenoux^b, Laurent Duval^c, Jean-Christophe Pesquet^b

^a Aix Marseille Univ., CNRS, Centrale Marseille, I2M, Marseille, France

^b CVN, CentraleSupélec, INRIA Saclay et Université Paris-Saclay

^c IFP Energies nouvelles, 1 et 4 avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison Cedex

Résumé—Ce travail s'intéresse à la reconstruction des signaux parcimonieux par l'usage d'une nouvelle pénalité. Nous proposons une approximation lisse généralisée du rapport de normes ou quasi-normes ℓ_p/ℓ_q , émulant la mesure de parcimonie ℓ_0 . Une version de l'algorithme *Forward-Backward* à métrique variable localement ajustée sera proposée pour traiter ce problème de minimisation non-convexe. L'efficacité de cette nouvelle fonction de pénalisation (SPOQ : *Smoothed p-Over-q*) est illustrée par des tests réalisés sur des jeux de données en spectrométrie de masse.

I. PROBLÈME

Dans ce papier, on s'intéresse à l'estimation d'un signal parcimonieux $\mathbf{x} = (x_n)_{1 \leq n \leq N}$ à partir des observations $\mathbf{y} = (y_m)_{1 \leq m \leq M} \in \mathbb{R}^M$ dégradées, suivant le modèle $\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ où l'on désigne par $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ la matrice de mesure et par $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^M$ un bruit additif. Ce modèle est notamment adapté à la détermination de mélanges moléculaires complexes étudiés par des techniques de chimie analytique (chromatographie, spectrométrie de masse, résonance magnétique nucléaire, etc. [1]).

Une stratégie efficace pour estimer une solution $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^N$ revient à résoudre le problème suivant

$$\underset{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N}{\text{minimiser}} \Psi(\mathbf{x}) \quad \text{tel que} \quad \|\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \leq \xi, \quad (1)$$

où $\Psi: \mathbb{R}^N \rightarrow]-\infty, +\infty]$ est une fonction de pénalité qui renforce le degré de parcimonie de la solution et $\xi > 0$ est un paramètre que l'on peut relier aux caractéristiques du bruit additif. Le choix de fonctions de régularisation a fait l'objet de nombreux travaux. Si la mesure de parcimonie ℓ_0 semble être LA pénalité naturelle, son usage est compliqué en pratique, pour des raisons d'optimisation, de précision numérique, de bruit ou de complexité globale de calcul.

Présentant certaines propriétés d'équivalence vis-à-vis de l'optimisation, la norme ℓ_1 est devenue une pénalité standard, permettant de se placer dans le cadre convexe. Pour mieux approcher ℓ_0 , l'usage de quasi-normes ℓ_p , $0 < p < 1$, a connu un essor récent, rendant néanmoins le problème (1) non-convexe. Cependant, normes et quasi-normes répondent à un axiome d'homogénéité de degré 1 ($\|\lambda\mathbf{x}\|_p = |\lambda|\|\mathbf{x}\|_p$), tandis que la mesure de parcimonie ℓ_0 est de degré 0, ou invariante en échelle ($\|\lambda\mathbf{x}\|_0 = \|\mathbf{x}\|_0$ pour $\lambda \neq 0$). Choisir un rapport de normes est un moyen de retrouver naturellement l'invariance d'échelle souhaitée, par exemple pour le rapport ℓ_1/ℓ_2 [2], [3]. Dans ce papier, notre travail a pour objectif d'étendre ce choix de pénalité avec une forme généralisée et régularisée des rapports de quasi-normes ℓ_p/ℓ_q .

II. NOUVELLE APPROCHE

Notre proposition s'appuie sur des approximations lissées des rapports de quasi-normes ou de normes $\ell_{p,\alpha}$ ($p \in]0, 2]$) et $\ell_{q,\eta}$ ($q \in]2, +\infty[$) pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ et $(\alpha, \eta) \in]0, +\infty[^2$. Ces dernières sont définies par $\ell_{p,\alpha}(\mathbf{x}) = \left(\sum_{n=1}^N \left((x_n^2 + \alpha^2)^{p/2} - \alpha^p \right) \right)^{1/p}$ et

$\ell_{q,\eta}(\mathbf{x}) = \left(\eta^q + \sum_{n=1}^N |x_n|^q \right)^{1/q}$. Pour assurer la dérivabilité la fonction Ψ est donnée par

$$(\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N) \quad \Psi(\mathbf{x}) = \log \left(\frac{(\ell_{p,\alpha}^p(\mathbf{x}) + \beta^p)^{1/p}}{\ell_{q,\eta}(\mathbf{x})} \right). \quad (2)$$

La fonction Ψ possède deux propriétés mathématiques utiles telles que son caractère gradient lipschitzien dans \mathbb{R}^N , et sa majoration par une fonction quadratique telle que pour tout $\rho \in]0, +\infty[$ et en tout $\mathbf{x} \in \mathcal{B}_{q,\rho} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{n=1}^N |x_n|^q \geq \rho^q\}$:

$$\Psi(\mathbf{x}) \leq \Psi(\mathbf{x}') + \nabla \Psi(\mathbf{x}')^\top (\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^\top \mathbf{A}_{q,\rho}(\mathbf{x}') (\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3)$$

pour tout $\mathbf{x}' \in \mathcal{B}_{q,\rho}$ où $\mathbf{A}_{q,\rho}$ est donnée par

$$\mathbf{A}_{q,\rho}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\ell_{p,\alpha}^p(\mathbf{x}) + \beta^p} \mathcal{D}((x_n^2 + \alpha^2)^{p/2-1})_{1 \leq n \leq N} + \frac{q-1}{(\eta^q + \rho^q)^{2/q}} \mathbf{I}_N. \quad (4)$$

Comme Ψ peut être majorée sur des domaines bornés $\mathcal{B}_{q,\rho}$, nous proposons une extension de la stratégie *Forward-Backward* à métrique variable [4] pour résoudre le problème (1). Par la suite, à chaque itération $k = 0, 1, \dots$, la nouvelle version de l'algorithme *Forward-Backward* à métrique variable localement ajustée s'appuie sur le calcul de la métrique $\mathbf{A}_{q,\rho}$ [5] paramétrée par ρ dépendant du point où est calculée la majorante locale, telle que

$$\rho_{k,i} = \begin{cases} \sum_{n=1}^N |x_{n,k}|^q & \text{si } i = 1, \\ \theta \rho_{k,i-1} & \text{si } 2 \leq i \leq B-1, \\ 0 & \text{si } i = B. \end{cases} \quad (5)$$

Cette stratégie donne lieu à l'algorithme 1. A chaque itération, il est nécessaire de calculer la projection \mathbf{P} sur l'ensemble des $\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid \|\mathbf{H}\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \leq \xi\}$ selon la métrique $\mathbf{A}_{q,\rho}$. Notons que cette projection ne possède pas une forme explicite. Nous envisageons donc de la calculer avec l'algorithme *Dual Forward-Backward* [6].

Algorithme 1 *Forward-Backward* à métrique variable localement ajustée

$\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^N$, $B \in \mathbb{N}^*$, $\theta \in]0, 1[$, $(\gamma_k)_{k \in \mathbb{N}} \in]0, 2[$

Pour $k = 0, 1, \dots$:

 Pour $i = 1, \dots, B$:

 Construire $\rho_{k,i}$ selon (5).

 Construire $\mathbf{A}_{k,i} = \mathbf{A}_{q,\rho_{k,i}}(\mathbf{x}_k)$ selon (4).

$\mathbf{z}_{k,i} = \mathbf{P}_{\mathbf{A}_{k,i}, \|\mathbf{H} \cdot - \mathbf{y}\| \leq \xi}(\mathbf{x}_k - \gamma_k (\mathbf{A}_{k,i})^{-1} \nabla \Psi(\mathbf{x}_k))$

 Si $\mathbf{z}_{k,i} \in \mathcal{B}_{q,\rho_{k,i}}$: Fin pour

$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{z}_{k,i}$

Nous avons prouvé la convergence de $(\mathbf{x}_k)_{k \in \mathbb{N}}$ vers un point critique du problème (1) sous certaines hypothèses (pour plus de détails, nous renvoyons vers [7]).

III. APPLICATION EN SPECTROMÉTRIE DE MASSE

La spectrométrie de masse est une technique d'analyse physico-chimique très efficace et utilisée dans les domaines des analyses de données chimiques et biologiques [8], [9]. Les spectres de masses sont caractérisés par un degré de parcimonie élevé dont nous avons récemment traité la reconstruction dans [10] avec une nouvelle approche par dictionnaire qui résout le problème (1), où \mathbf{H} est construit selon le modèle dit *averagine* [11], [12] et Ψ est définie par la norme ℓ_1 . Nous proposons par le présent travail d'utiliser le même dictionnaire \mathbf{H} avec la nouvelle fonction de pénalité SPOQ Ψ donnée par (2) et de comparer les résultats en utilisant d'autres fonctions de régularisations telles que la norme ℓ_1 , et les deux pénalités non-convexes Cauchy et Welsh [13], [14], [4].

Nous considérons un exemple synthétique de deux spectres de masse A et B, de taille $N = 2000$, présentant un nombre de pics P . Le signal mesuré sera généré avec un dictionnaire \mathbf{H} de dimension $(N \times N)$ et un bruit gaussien d'écart-type $\sigma = 10^{-2}$ (voir figure 1).

Nous utilisons l'algorithme 1 avec un maximum de 100 itérations. Par ailleurs, nous utilisons l'algorithme *Dual Forward-Backward* avec 10 000 itérations pour calculer la projection approchée. Notons que les paramètres α , β et η sont optimisés de manière manuelle afin de maximiser le rapport signal-à-bruit (RSB) donné par :

$$\text{RSB} = 20 \log_{10} \left(\frac{\|\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}\|} \right) \quad (6)$$

où l'on désigne par \mathbf{x} le signal référence et $\hat{\mathbf{x}}$ le signal estimé.

Nous présentons dans le tableau I la moyenne et l'écart-type pour 20 réalisations du bruit, des trois métriques suivantes : RSB (6), RSBS défini par le RSB calculé uniquement sur le support du signal, et le degré de parcimonie défini par le nombre des pics du signal reconstruit ayant une amplitude supérieure à 10^{-4} .

En observant les résultats, nous remarquons que la nouvelle fonction de régularisation Ψ assure, globalement, des meilleures performances, notamment pour le rapport défini par $p = 0.25$ (quasi-norme) et $q = 2$ (norme).

IV. CONCLUSION

Utiliser un rapport de normes comme pénalité émulant la mesure de parcimonie ℓ_0 apporte des bénéfices dans la reconstruction de signaux parcimonieux. Cette observation vaut pour des métriques d'écart comme pour le degré de parcimonie estimé du signal considéré. Une étude plus exhaustive des paramètres déterminants prolonge ce travail pour identifier les rapports de quasi-normes les plus favorables [7].

RÉFÉRENCES

- [1] L. Duval, L. T. Duarte, and C. Jutten, "An overview of signal processing issues in chemical sensing," in *Proc. Int. Conf. Acoust. Speech Signal Process.*, Vancouver, BC, Canada, May 26-31, 2013, pp. 8742-8746. [Online]. Available : <http://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?arnumber=6639373>
- [2] A. Repetti, M. Q. Pham, L. Duval, E. Chouzenoux, and J.-C. Pesquet, "Euclid in a taxicab : Sparse blind deconvolution with smoothed ℓ_1/ℓ_2 regularization," *IEEE Signal Process. Lett.*, vol. 22, no. 5, pp. 539-543, May 2015. [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1109/LSP.2014.2362861>
- [3] Y. Rahimi, C. Wang, H. Dong, and Y. Lou, "A scale invariant approach for sparse signal recovery," *PREPRINT*, 2019.

		P	$\ell_{0.25}/\ell_2$	$\ell_{0.5}/\ell_2$	ℓ_1/ℓ_2	ℓ_1	Cauchy	Welsh
Signal A	RSB	49	45.64	43.82	41.73	4.73	43.77	35.85
			0.664	0.769	0.420	0.715	0.483	0.345
	RSBS	49	44.66	46.37	49.87	44.79	43.86	36.84
			0.678	0.804	1.188	0.744	0.490	0.382
	Degré de parcimonie	49	49	77	700	96	1814	615
			0.410	5.169	26.816	5.851	30.337	34.337
Signal B	RSB	97	45.70	43.08	43.27	45.62	21.16	33.58
			0.475	0.330	0.335	0.654	23.632	0.385
	RSBS	97	47.51	49.93	49.36	46.10	22.33	35.06
			0.481	0.583	0.780	0.714	22.688	0.405
	Degré de parcimonie	97	116	360	746	164	1870	515
			4.867	12.753	22.478	12.804	76.105	15.901

Tableau I
MOYENNE ET ÉCART TYPE DES RSB, RSBS ET DEGRÉ DE PARCIMONIE, CALCULÉS POUR 20 RÉALISATIONS DU BRUIT AVEC DIFFÉRENTES FONCTIONS DE RÉGULARISATION.

- [4] E. Chouzenoux, A. Jezierska, J.-C. Pesquet, and H. Talbot, "A majorize-minimize subspace approach for ℓ_2 - ℓ_0 image regularization," *SIAM J. Imaging Sci.*, vol. 6, no. 1, pp. 563-591, Mar. 2013. [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1137/11085997X>
- [5] F. Abboud, E. Chouzenoux, J.-C. Pesquet, J.-H. Chenot, and L. Laborelli, "Dual block-coordinate forward-backward algorithm with application to deconvolution and deinterlacing of video sequences," *J. Math. Imaging Vision*, vol. 59, no. 3, pp. 415-431, Nov. 2017.
- [6] P. L. Combettes, D. Dũng, and B. C. Vũ, "Dualization of signal recovery problems," *Set-Valued Var. Anal.*, vol. 18, no. 3-4, pp. 373-404, Dec. 2010.
- [7] A. Cherni, E. Chouzenoux, L. Duval, and J.-C. Pesquet, "SPOQ : a smoothed scale-invariant ℓ_p -over- ℓ_q norm ratio penalty regularization for sparse signal recovery," *PREPRINT*, 2019.
- [8] R. Colton, A. D'Agostino, and J. C. Traeger, "Electrospray mass spectrometry applied to inorganic and organometallic chemistry," *Mass Spectrom. Rev.*, vol. 14, no. 2, pp. 79-106, Mar. 1995.
- [9] B. Wang, A. Fang, J. Heim, B. Bogdanov, S. Pugh, M. Libardoni, and X. Zhang, "DISCO : Distance and spectrum correlation optimization alignment for two-dimensional gas chromatography time-of-flight mass spectrometry-based metabolomics," *Anal. Chem.*, vol. 82, no. 12, pp. 5069-5081, Jun. 2010. [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1021/ac100064b>
- [10] A. Cherni, E. Chouzenoux, and M.-A. Delsuc, "Fast dictionary-based approach for mass spectrometry data analysis," in *Proc. Int. Conf. Acoust. Speech Signal Process.*, Apr. 15-20, 2018, pp. 816-820.
- [11] M. W. Senko, J. P. Speir, and F. W. McLafferty, "Collisional activation of large multiply charged ions using Fourier transform mass spectrometry," *Anal. Chem.*, vol. 66, no. 18, pp. 2801-2808, 1994.
- [12] M. W. Senko, S. C. Beu, and F. W. McLafferty, "Determination of monoisotopic masses and ion populations for large biomolecules from resolved isotopic distributions," *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, vol. 6, no. 4, pp. 229-233, Arp. 1995.
- [13] R. E. Welsh and R. A. Becker, "Robust non-linear regression using the dogleg algorithm," Computer research center for economics and management science, Tech. Rep. 76, Mar. 1975.
- [14] J. E. Dennis, Jr. and R. E. Welsh, "Techniques for nonlinear least squares and robust regression," *Commun. Stat. Simul. C.*, vol. 7, no. 4, pp. 345-359, 1978.

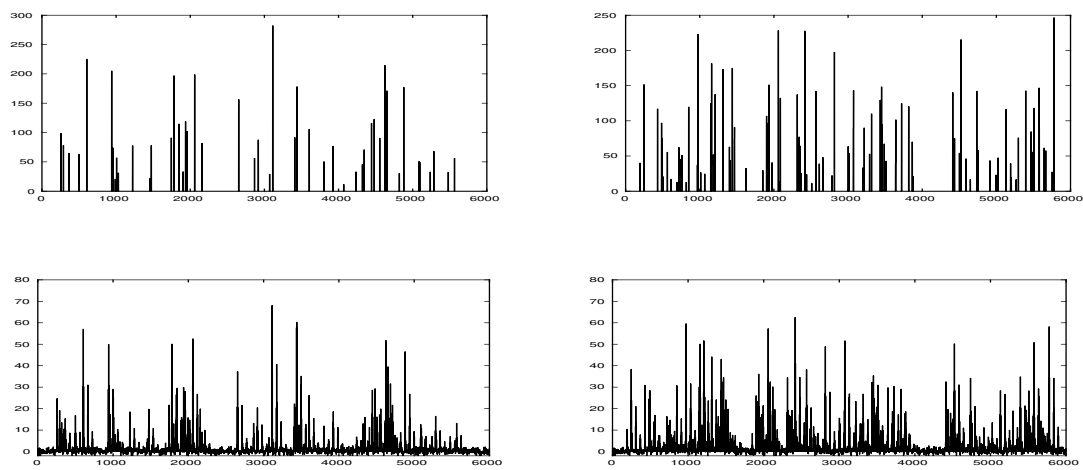


FIGURE 1. Signaux originaux et mesures associés des jeux de données A (à droite $N = 2000$, $P = 49$) et B (à gauche $N = 2000$, $P = 97$). En haut : signal synthétique, en bas : le spectre de masse mesuré avec un bruit gaussien d'écart-type $\sigma = 10^{-2}$.