



HAL
open science

Méthodes informées de factorisation matricielle non-négative. Application à l'identification de sources de particules industrielles.

Abdelhakim Limem

► **To cite this version:**

Abdelhakim Limem. Méthodes informées de factorisation matricielle non-négative. Application à l'identification de sources de particules industrielles.. Mathématiques [math]. Université du Littoral Côte d'Opale, 2014. Français. NNT: . tel-01526513

HAL Id: tel-01526513

<https://theses.hal.science/tel-01526513>

Submitted on 23 May 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 21 novembre 2014

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université du Littoral Côte d'Opale

(Discipline : Génie Logiciel, Automatique et Traitement du Signal)

par

Abdelhakim LIMEM

Titre :

Méthodes informées de factorisation matricielle non-négative. Application à l'identification de sources de particules industrielles.

Composition du jury

- Rapporteurs :* **Christian Jutten**
Professeur à l'Université Joseph Fourier et à l'Institut Universitaire de France
Cédric Richard
Professeur à l'Université Nice Sophia Antipolis et à l'Institut Universitaire de France
- Examineur :* **Yannick Deville**
Professeur à l'Université de Toulouse
- Directeurs de thèse :* **Gilles Roussel**
Maître de conférences HDR à l'Université du Littoral Côte d'Opale
Gilles Delmaire
Maître de conférences à l'Université du Littoral Côte d'Opale
- Invités :* **Dominique Courcot**
Professeur à l'Université du Littoral Côte d'Opale
Thérèse Desmots
Responsable environnement, ArcelorMittal
Matthieu Puigt
Maître de conférences à l'Université du Littoral Côte d'Opale

Table des matières

Table des figures	vii
Liste des tableaux	ix
Glossaire	xi
Liste des sigles et acronymes	xiii
Introduction générale	1
1 Cadre général	1
2 Objectif	3
3 Plan du manuscrit	3
3.1 État de l’art	4
3.2 Factorisation matricielle non-négative	4
3.3 NMF sous contraintes égalité	4
3.4 NMF sous contraintes de bornitude et de normalisation	5
3.5 Factorisation matricielle informée par un modèle physique	5
3.6 Conclusion générale	5
I Un état des lieux en factorisation matricielle	7
1 - Etat de l’art	9
1.1 Introduction	9
1.2 Les types de mélanges considérés dans la littérature	9
1.2.1 Mélanges linéaires instantanés	10
1.2.2 Mélanges à atténuation et décalages temporels	12
1.2.3 Mélanges convolutifs	13

1.2.4	Conclusion	15
1.3	Mélanges sur-déterminés et sous-déterminés	15
1.4	Panorama des hypothèses usuelles et des algorithmes de factorisation associés	15
1.4.1	Analyse en Composantes Principales	16
1.4.2	Analyse en Composantes Indépendantes	18
1.4.3	Méthodes faisant appel à la parcimonie des signaux sources	19
1.4.4	Méthodes utilisant la normalisation d'un facteur	20
1.4.5	Méthodes à base de non-négativité	23
1.5	Conclusion	26
2	- Factorisation matricielle non-négative	27
2.1	Introduction	27
2.2	Notions préliminaires	28
2.2.1	Optimisation d'une fonction	28
2.2.2	Conditions de Karush-Kuhn Tucker	29
2.3	Présentation du problème classique de NMF	30
2.3.1	Conditions de KKT pour le problème de NMF	30
2.3.2	Unicité de la solution NMF	31
2.3.2.1	Condition suffisante d'unicité pour la NMF approchée	31
2.3.2.2	Condition d'unicité dans le cadre de la factorisation exacte	32
2.4	Algorithmes de résolution du problème classique de NMF	33
2.4.1	Méthode Multiplicative	33
2.4.1.1	L'approche heuristique	34
2.4.1.2	L'approche Majoration-Minimisation	35
2.4.1.3	Convergence des algorithmes multiplicatifs	38
2.4.2	Méthodes des gradients projetés	39
2.4.2.1	Introduction aux méthodes de gradient	39
2.4.2.2	Les méthodes à base de gradients projetés	39
2.4.3	Les méthodes de recherche en Blocs de Coordonnées	43
2.4.3.1	Les méthodes ANLS	44
2.4.3.2	Les méthodes de partitionnement en $2 p$ blocs	45
2.5	Introduction de poids dans la NMF	47
2.5.1	Introduction	47
2.5.2	Obtention des KKT pour la NMF pondérée	47
2.5.3	Les algorithmes de NMF pondérés	49

2.6	Les méthodes NMF à base de la divergence de Kullback-Leibler	50
2.6.1	Propriétés de la divergence de KL	50
2.6.2	Les méthodes NMF à base de divergence de KL	51
2.7	La NMF utilisant des divergences paramétriques $\alpha\beta$	52
2.7.1	Définition et propriétés des divergences paramétriques $\alpha\beta$	53
2.7.1.1	Cas de la divergence α	54
2.7.1.2	Propriétés des divergences $\alpha\beta$	55
2.7.1.3	Récapitulatif des recommandations	57
2.7.2	Les NMF à base de divergence $\alpha\beta$	58
2.7.2.1	La NMF à base de divergence α	58
2.7.2.2	NMF à base de divergence β	60
2.7.2.3	NMF basée sur la divergence $\alpha\beta$	61
2.8	Conclusion	64

II Apport des connaissances expertes pour informer la NMF 65

3 - Factorisation matricielle non-négative sous contraintes égalité 67

3.1	Introduction	67
3.2	Paramétrisation de la recherche des profils de source	69
3.3	NMF informée à base de norme de Frobenius	71
3.3.1	Les conditions de KKT	71
3.3.2	Règles de mise à jour	72
3.4	NMF sous contrainte à base de divergence de KL	75
3.5	NMF sous contraintes à base de divergence α	77
3.6	NMF sous contraintes à base de divergence β	80
3.6.1	Première approche de NMF avec divergence β	80
3.6.2	Une variante de la NMF avec divergence β	82
3.7	NMF basée sur la divergence $\alpha\beta$	84
3.7.1	Rappel sur les divergences $\alpha\beta$	84
3.7.2	Règles de mise à jour par la première approche	85
3.7.3	Variante de la NMF sous contrainte à base de divergence $\alpha\beta$	86
3.7.4	Conditions de KKT pour la NMF informée à base de divergence $\alpha\beta$	87
3.8	Initialisation	88
3.9	Critère d'arrêt	89

3.10 Conclusion	91
4 - Factorisation matricielle sous contraintes de bornitude et de normalisation	93
4.1 Introduction	93
4.2 Factorisation matricielle non négative avec contraintes de type égalité et de normalisation	94
4.2.1 Présentation des contraintes vérifiées par un profil normalisé	94
4.2.2 Présentation du problème avec normalisation	95
4.2.3 Présentation de l’algorithme en deux étapes	95
4.2.4 Mise à jour en une seule étape	96
4.2.5 Mise à jour avec une normalisation des éléments libres des profils	98
4.2.6 Description des algorithmes et leurs acronymes	100
4.3 NMF sous contraintes de bornitude	100
4.3.1 Introduction	100
4.3.2 Définition du problème avec contraintes de bornitude	101
4.3.3 Présentation des aspects séquentiels de la résolution du problème	103
4.3.3.1 Méthodes de NMF sous contraintes de valeurs, de bornitude et de normalisation.	103
4.3.3.2 Méthodes de NMF sous contraintes de valeurs, de normalisation et de bornitude :	106
4.3.3.3 Description des algorithmes et leurs acronymes	107
4.4 Estimation de la qualité de la séparation	108
4.4.1 Rapport Signal à Bruit des données	108
4.4.2 Évaluation de la qualité d’estimation	108
4.4.2.1 Rapport signal sur interférence	109
4.4.2.2 Rapport mélange à erreur	109
4.5 Validation des méthodes sous contraintes de forçage et de normalisation	110
4.5.1 NMF à base de divergence β	112
4.5.2 NMF à base de divergence α	114
4.5.3 Méthodes de NMF informées à base de divergence $\alpha\beta$	115
4.5.4 Robustesse à l’initialisation	116
4.6 Expérimentations des méthodes de NMF sous contraintes de bornitude	121
4.7 Conclusion	123

III	Apport des connaissances d'un modèle pour informer la NMF	127
5	Factorisation matricielle informée par un modèle physique	129
5.1	Introduction	129
5.2	Etude des modèles de dispersion atmosphérique	130
5.2.1	Les modèles analytiques gaussiens	131
5.2.2	Les modèles intégraux	131
5.2.3	Les modèles CFD	132
5.2.4	Un modèle physique, pour quel usage ?	132
5.3	Présentation du modèle gaussien et de ses paramètres	133
5.3.1	Coordonnées sources, coordonnées capteur	133
5.3.2	Paramètres météorologiques	134
5.3.3	Équation de transfert	135
5.3.3.1	Changement de repère	136
5.3.3.2	Variables	136
5.3.3.3	Équation du transfert	136
5.4	Lien entre le modèle de transfert obtenu par modèle physique et le modèle récepteur	137
5.5	Structuration de la matrice de contribution par seuillage	140
5.6	Initialisation de la matrice de contribution par optimisation quadratique	141
5.7	Tests sur données de synthèse	144
5.7.1	Etude des performances des méthodes	144
5.7.2	Robustesse à l'initialisation	146
5.8	Tests sur données réelles	150
5.8.1	Contexte	150
5.8.2	Conduite du projet et instrumentation	150
5.8.3	Les données	151
5.8.4	Les sources en présence	151
5.8.5	Résultats des estimations des profils	154
5.8.6	Concordance des estimations par espèce chimique	157
5.8.7	Examen des contributions et des origines des poussières par groupe d'émetteurs.	158
5.9	Conclusion	159

6 - Conclusion générale	171
6.1 Bilan	171
6.2 Perspectives	173
A - Une approche géométrique de l'ACP	175
B - Conditions de Karush-Kuhn-Tucker pour la NMF de Frobenius sous contraintes égalité	179
C - Conditions de KKT pour la NMF contrainte à base divergence $\alpha\beta$	183
C.1 Différentiation du critère par rapport aux inconnus	183
C.2 Lagrangien et KKT	187
D - Autres profils estimés sur les jeux de données réelles	189
Bibliographie	197

Table des figures

2.1	Différents cas d'unicité de la factorisation non-négative.	33
2.2	Mise à jour dans un algorithme de Majoration-Minimisation.	37
2.3	Algorithme de descente de gradient.	40
2.4	Approximation d'un mélange p de deux gaussiennes par une gaussienne q [111].	55
2.5	Les différentes zones d'étude en fonction de α et β	57
3.1	Approches pour l'estimation des contributions des sources de pollution [153]. .	68
4.1	Performance des méthodes de NMF en fonction de β (critère de performances : MER (en dB))	112
4.2	Performances des NMF à base de divergence β en fonction du SNR : 5 contraintes, $\beta = 0.5$	113
4.3	Performances des méthodes NMF en fonction du SNR : 3 contraintes, $\beta = 0.5$	114
4.4	Comparaison des différentes méthodes en fonction de α pour un SNR de 30 dB	114
4.5	Performance des méthodes en fonction du SNR pour $\alpha = 0.3$	115
4.6	Les différents couples α, β étudiés	116
4.7	Performances des différentes méthodes en fonction du SNR	117
4.8	Répartition des MER en fonction de l'initialisation pour les différentes méthodes ($SNR = 30$ dB)	119
4.9	Répartition des MER en fonction de l'initialisation pour les différentes mé- thodes ($SNR = 17$ dB)	120
4.10	Comparaison des méthodes en fonction du SNR	124
4.11	Répartition des performances des différentes méthodes en fonction du SNR . .	125
4.12	Répartition des résultats en fonction des initialisations pour les différentes mé- thodes ($SNR=17$ dB, $\alpha = 0.8$ $\beta = 0.4$)	126
5.1	Structure de la méthode NMF informée.	130
5.2	Exemple de panache gaussien [163]. Le repère a pour origine le lieu d'émission de la source chimique.	131
5.3	Paramètres pour le calcul du transfert.	134
5.4	Zone couverte par les quatre projections coniques conformes de Lambert. . . .	135
5.5	Participation des sources aux différents échantillons.	145
5.6	Évaluation de la méthode de NMF informée en fonction du SNR des données.	146
5.7	Performances des différentes méthodes en fonction du SNR d'entrée (Moyenne et écart type des MER) pour $\alpha = 1$ et $\beta = 0.5$	147

Table des figures

5.8	Les solutions pour différentes initialisations pour les différentes méthodes (SNR=30dB).	148
5.9	Les solutions pour différentes initialisations pour les différentes méthodes (SNR=17dB).	149
5.10	Matériel utilisé pour l'échantillonnage.	152
5.11	Implantation du DA80.	153
5.12	Estimation du profil de la source marine.	160
5.13	Profil de la source Trafic sauf échappement.	161
5.14	Profil de la source Ascométal.	162
5.15	Profil de la source <i>Agglomération secondaire</i>	163
5.16	Profil de la source <i>Source d'agglomération ponctuelle</i>	164
5.17	Données estimées vs données réelles obtenues par [80].	165
5.18	Données estimées vs données réelles par la méthode $\alpha\beta$ -WNMF.	166
5.19	Données estimées vs données réelles par la méthode $\alpha\beta$ -BN ₂ -MCWNMF.	167
5.20	Contributions des sources industrielles par la méthode $\alpha\beta$ -BN ₂ -MCWNMF.	168
5.21	Estimation de la participation des sources dans les données	169
5.22	Estimation de l'espèce Fe dans les données	170
D.1	Profil de la source <i>Marine secondaire</i>	191
D.2	Profil de la source <i>crustale</i>	192
D.3	Profil de la source <i>Sulfates secondaires</i>	193
D.4	Profil de la source <i>Nitrates secondaires</i>	194
D.5	Profil de la source <i>Trafic échappement</i>	195
D.6	Profil de la source <i>Combustion biomasse</i>	196

Liste des tableaux

2.1	Propriété d'échelle de la divergence $\alpha\beta$.	55
2.2	Propriétés de l'Alpha-zoom.	56
2.3	Effet de la pondération sur la divergence $\alpha\beta$.	57
4.1	Les différentes méthodes avec normalisation	100
4.2	Les différentes méthodes avec bornes	108
4.3	Matrice de profil théorique	111
4.4	Matrice F_{init} pour les premières simulations	111
4.5	Matrice Ω^E utilisée dans les premières simulations pour toutes les méthodes informées	111
4.6	Matrice Φ^E utilisée dans les premières simulations pour toutes les méthodes informées	111
4.7	La matrice Ω^E utilisée dans les seconds tests	113
4.8	La matrice Φ^E utilisée dans les seconds tests	113
4.9	Influence de l'initialisation sur les performances de NMF pour $\alpha = 1, \beta = 1$ et SNR=30 dB	118
4.10	Matrice Ω^E pour les simulations avec bornitude	121
4.11	Matrice Φ^E pour les simulations avec bornitude	121
4.12	Matrice Ω^I pour les simulations avec bornitude	121
4.13	Matrice Φ^{I-}/Φ^{I+}	122
5.1	Exemple d'une classe de stabilité : classe de stabilité de Pasquill.	135
5.2	Matrice Ω^E utilisée dans les simulations utilisant un modèle physique.	144
5.3	Matrice Ω^E utilisée pour les tests sur données réelles.	155
5.4	Matrice Ω^I utilisée pour les tests sur données réelles.	155
5.5	Matrice Φ^{I-} utilisée pour les tests sur données réelles.	156
5.6	Matrice Φ^{I+} utilisée pour les tests sur données réelles.	156

Glossaire

Variables

Notations générales

- u : scalaire,
- \underline{u} : vecteur colonne,
- U : matrice,
- $U_{.,i}$: i -ème vecteur ligne extrait de la matrice U ,
- $U_{j,.}$: j -ème vecteur colonne extrait de la matrice U ,
- $1_{i \times j}$: matrice ($i \times j$) ne contenant que des 1,
- $0_{i \times j}$: matrice ($i \times j$) ne contenant que des 0,
- I_j : matrice identité de dimension ($j \times j$),

Notations spécifiques

- n : nombre d'échantillons,
- m : nombre d'espèces chimiques,
- p : nombre de sources,
- X : matrice ($n \times m$) des données observées,
- G : matrice ($n \times p$) des contributions des espèces chimiques dans les observations,
- F : matrice ($p \times m$) des profils chimiques,
- Σ : matrice des incertitudes liées aux données de la matrice X ,
- Ω^E ou Ω : masque binaire des contraintes de type égalité, appliquées à la matrice F ,
- Ω^I : masque binaire des contraintes de type bornitude, appliquées à la matrice F ,
- Ω_G : masque binaire des contraintes d'absence ou de présence d'une source, appliquées à la matrice G ,
- Φ^E ou Φ : matrice des valeurs connues de la matrice F ,
- Φ^{I+} et Φ^{I-} : matrices des bornes respectivement maximales et minimales des contraintes inégalité de la matrice F ,

Opérateurs

Opérateurs vectoriels et matriciels

- \tilde{U} : matrice mise à l'échelle (ou normalisée) selon les lignes,
- \hat{U} : matrice estimée,
- \underline{u}' : version centrée du vecteur u ,

- \check{u} : version concaténée du vecteur u ,
- T : opérateur de transposition,
- \circ : produit matriciel terme à terme,
- $/$: division matricielle terme à terme,
- \succeq, \preceq : opérateurs de comparaison, qui s'appliquent à chaque élément d'un vecteur ou d'une matrice ($X \succeq 0$ signifie que tous les éléments x_{ij} de X sont positifs ou nuls),
- Tr : trace d'une matrice,
- $\text{diag}(u)$: matrice carrée diagonale dont la diagonale contient les éléments du vecteur u ,
- $\mathcal{L}(\cdot)$: langrangien,
- $\mathcal{P}_{\Omega_I}(\cdot)$: opérateur de projection des données contraintes en dehors de leurs intervalles admissibles,
- U^+ : projection de U sur l'orthant non-négatif,

Autres opérateurs

- $\nabla f(u)$: gradient du critère f par rapport à u ,
- $\mathcal{J}(\cdot)$: fonction scalaire à optimiser,
- $\mathcal{D}(\cdot||\cdot)$: divergence entre deux scalaires, vecteurs ou matrices,
- $\mathcal{D}_W(\cdot||\cdot)$: divergence pondérée entre deux matrices,
- $\mathcal{D}_W^{\alpha,\beta}(\cdot||\cdot)$: divergence pondérée entre deux matrices,
- $\mathcal{D}_W^{\alpha,\beta}(\cdot||\cdot)$: divergence $\alpha\beta$ pondérée entre deux vecteurs ou deux matrices,
- $\mathcal{H}_{x,w}^{\alpha,\beta}(\cdot||\cdot)$: majorant de la divergence $\alpha\beta$ pondérée entre deux vecteurs, $x = 1, 2$

Ensembles

- \mathbb{N} : ensemble des entiers naturels,
- \mathbf{R} : ensemble des réels,
- \mathbb{A} : ensemble fini d'indices correspondant aux numéros de sources anthropiques (industrielles) avec $\mathbb{A} \subseteq \{1, \dots, p\}$
- $p^{\mathbb{A}}$: nombre de sources anthropiques, avec $p^{\mathbb{A}} \leq p$
- $\bar{\mathbb{A}}$: ensemble complémentaire de \mathbb{A} dans $\{1, \dots, p\}$,
- \mathbf{R}_+ : ensemble des réels positifs,
- \mathbf{R}_+^m : ensemble des vecteurs de taille m à composantes réelles positives ou nulles,
- $\mathbf{R}_+^{n \times m}$: ensemble des matrices de taille $(n \times m)$ à composantes réelles positives ou nulles,

Liste des sigles et acronymes

- ACP : Analyse en Composantes Principales ou *Principal Component Analysis* en anglais (famille de méthodes de pré-traitement de données),
- ACI : Analyse en Composantes Independantes ou *Independent Component Analysis* en anglais (famille de méthodes de séparation aveugle de sources),
- ALS : Moindres carrés alternés ou *Alternating Least Squares* en anglais (méthode d'optimisation),
- HALS : Moindres carrés alternés hiérarchiques ou *Hierarchical Alternating Least Squares* en anglais (méthode d'optimisation),
- ANLS : Moindres carrés alternés non-négatifs ou *Alternating Non-negative Least Squares* en anglais (méthode d'optimisation),
- BN_x -CWNMF(-R) : *Bounded and then Normalized Constrained Weighted Non-negative Matrix Factorization using (Residuals and) Normalization number $x = 1, 2$* (méthode de factorisation matricielle non-négative),
- BN_x -MCWNMF(-R) : *Bounded and then Normalized Model-Constrained Weighted Non-negative Matrix Factorization using (Residuals and) Normalization number $x = 1, 2$* (méthode de factorisation matricielle non-négative),
- CFD : *Computational Fluid Dynamics* (modèle de simulation physique),
- KKT (conditions) : Karush-Kuhn-Tucker,
- KL : Kullback-Leibler,
- MER : *Mixing Error Ratio* (mesure de la qualité d'estimation de la matrice de mélange en séparation aveugle de sources),
- MM : *Majoration-Minimisation* (méthode utilisée en optimisation),
- N_x -CWNMF(-R) : *Normalized and Constrained Weighted Non-negative Matrix Factorization using (Residuals and) Normalization number $x = 1, 2$* (méthode de factorisation matricielle non-négative),
- N_x -MCWNMF(-R) : *Normalized and Model-Constrained Weighted Non-negative Matrix Factorization using (Residuals and) Normalization number $x = 1, 2$* (méthode de factorisation matricielle non-négative),

- N_x B-CWNMF(-R) : *Normalized and then Bounded Constrained Weighted Non-negative Matrix Factorization using (Residuals and) Normalization number $x = 1, 2$* (méthode de factorisation matricielle non-négative),
- N_x B-MCWNMF(-R) : *Normalized and then Bounded Model-Constrained Weighted Non-negative Matrix Factorization using (Residuals and) Normalization number $x = 1, 2$* (méthode de factorisation matricielle non-négative),
- NMF : *Non-negative Matrix Factorization* (méthode de factorisation matricielle non-négative),
- PMF : *Positive Matrix Factorization* (méthode de factorisation matricielle non-négative),
- SAS : Séparation Aveugle de Sources,
- SCA : *Sparse Component Analysis* (famille de méthodes de séparation aveugle de sources),
- SIR : *Signal-to-Interference Ratio* (mesure de la qualité d'estimation des signaux extraits par une méthode de séparation aveugle de sources),
- SNR : *Signal-to-Noise Ratio*,
- SVD : *Singular Value Decomposition*,
- WNMF : *Weighted Nonnegative Matrix Factorization* (méthode de factorisation matricielle non-négative).

Introduction générale

1 Cadre général

L'Organisation Mondiale de la Santé (OMS) affirme dans plusieurs de ses études [170] que les particules en suspension dans l'air constituent un facteur important de risque pour la santé des populations. Ainsi, l'inhalation répétée de ces poussières engendre à minima des irritations chroniques des organes. Une seconde voie de contamination provient du dépôt de ces poussières conduisant à leur absorption par les plantes ou les animaux pour ainsi rentrer dans la chaîne alimentaire. Des conséquences plus graves (effets mutagènes) sont possibles dès lors que les particules contiennent, même en faible quantité des composés toxiques agissant directement sur les organes ou cellules.

Consciente de ces risques sanitaires, l'Europe a mis en place des normes définissant les valeurs limites en particules fines de taille inférieure ou égales à $10\ \mu\text{m}$ et $2.5\ \mu\text{m}$, respectivement désignées par les termes (PM 10, PM2.5). Aujourd'hui, la législation sur les niveaux de particules en suspension dans l'air stipule que les concentrations moyennes annuelles de PM 10 ne doivent pas excéder $40\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ en autorisant 35 dépassements de la limite journalière de $50\ \mu\text{g}/\text{m}^3$. La réglementation sur les PM2.5 fixe un objectif en moyenne annuelle de $25\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ pour 2015 et $20\ \mu\text{g}/\text{m}^3$ pour 2020 (Directive 2008/50/CE du 21 mai 2008). Ces particules de taille plus petites sont considérées comme plus dangereuses pour leur capacité à pénétrer plus profondément dans les voies respiratoires.

D'autre part, mieux comprendre les mécanismes perturbateurs qui engendrent cette pollution permet de mieux lutter pour en atténuer l'impact ou les causes. A ce titre, mieux identifier la part des différentes origines (anthropiques ou naturelles) des particules en suspension dans l'air qui contribuent à la pollution atmosphérique dans les zones urbaines denses, permettrait de mieux cibler les actions à entreprendre pour réduire les émissions à l'échelle locale ou à défaut de constater les origines plus lointaines du cocktail formant la charge particulaire. Ce travail est résolument tourné vers cet objectif, en voulant intégrer toute l'information utile (mesures, données météorologiques, connaissances expertes, contexte géographique) afin de pouvoir fournir une incertitude minimale sur l'identification des sources de particules fines en suspension. De

par les différents procédés intervenant dans l'élaboration de l'acier à partir de minerais de fer, l'activité sidérurgique fait partie des activités industrielles confrontées à la question de la maîtrise des rejets de particules dans l'atmosphère. Le groupe ArcelorMittal Atlantique et Lorraine, soucieux de son impact environnemental, a souhaité engager une étude permettant d'examiner les outils scientifiques existants pour réaliser un bilan de contribution des sources influençant la charge particulaire locale, sur le site de Dunkerque. Au delà d'un état de l'art du domaine, cette étude a permis de développer un outil logiciel adapté au problème particulier de d'identification des profils chimiques des sources participant à la charge particulaire, basée sur la technique connue sous le nom de modèle récepteur. Son principe considère des données de composition chimique (teneur en PM, ions, éléments métalliques, carbone,...) d'un grand nombre d'échantillons collectés sur un site récepteur. Cette méthode a déjà fait l'objet de travaux par la séparation statistique des sources, à partir d'algorithmes dits de *factorisation matricielle non-négative* maintenant connus dans la littérature. Toutefois, ces algorithmes "aveugles" de factorisation matricielle se révèlent limités en terme de robustesse et dans leur capacité à séparer certains profils de sources spécifiques [165]. Le travail de cette thèse consiste à introduire des informations supplémentaires visant à réduire l'espace des solutions admissibles et fournir une solution plus robuste. L'étude théorique porte donc sur la manière d'introduire théoriquement et pratiquement ces informations supplémentaires dont le détail est donné dans la section suivante. Un intérêt majeur est de pouvoir l'appliquer en premier lieu au site industriel-urbain de Dunkerque, où est implanté le pôle sidérurgique ArcelorMittal Atlantique. Un tel outil logiciel permet ainsi d'estimer la part des émissions de particules d'origine sidérurgique sur le niveau de teneur en particules dans l'air extérieur, à une échelle locale.

Ce travail entre dans le cadre d'une convention de recherche entre le groupe sidérurgique ArcelorMittal Atlantique et Lorraine. Il a été réalisé au sein de l'équipe Systèmes de Perception et Fusion d'Informations du Laboratoire d'Informatique Signal et Image de la Côte d'Opale (LISIC, ULCO, EA 4491). Il est aussi le fruit d'une étroite collaboration avec l'Unité de Chimie Environnementale et Interactions sur le Vivant (UCEIV, ULCO, EA 4492).

Des campagnes de mesures ont été conduites sous la responsabilité du Professeur Courcot et du Docteur Ledoux (UCEIV, ULCO, EA 4492) au cours desquels des échantillons de poussières fines ont été prélevés sur un site de typologie urbaine, à Dunkerque. Dans une seconde phase, l'ensemble des échantillons a été analysé afin d'accéder aux mesures de concentrations des espèces chimiques (éléments majeurs, éléments traces métalliques, espèces ioniques, espèces carbonées) présentes dans les particules atmosphériques et en évaluant la précision de ces mesures.

Ce travail s'attache non seulement à développer des méthodes théoriques innovantes pour favoriser une factorisation efficace et robuste, mais aussi de réaliser une application informatique

autonome pour permettre à des utilisateurs confirmés d'exploiter les multiples fonctionnalités du système.

2 Objectif

A partir d'une matrice de concentrations et d'incertitudes associées, l'objectif pratique de cette thèse est d'identifier les différentes sources émettrices ainsi que leur contribution. Une source est caractérisée par la notion de profil, stable au cours du temps, qui définit un ensemble de proportions d'espèces chimiques émises. Restaurer les profils des différentes sources et leurs contributions relatives au niveau du capteur constitue donc l'enjeu principal de cette thèse.

D'un point de vue théorique, ce problème est abordé sous l'angle de la factorisation matricielle où la matrice de profils et la matrice de contribution sont à estimer. Les matrices de données sont par ailleurs entachées d'un bruit aléatoire de distribution inconnue et non assimilable à un bruit gaussien. Le rapport signal à bruit des données est sans doute faible et les mesures sont corrompues par des points aberrants qui peuvent provenir de différentes origines physiques. De plus, nous disposons d'informations complémentaires classées en types d'informations et répartis soit sur les profils soit sur les contributions.

- Les profils et contributions sont non négatifs.
- Les profils sont de somme à 1.
- Certains éléments de profils sont connus.
- Certains éléments de profils sont bornés.
- La contribution de certaines sources locales est nulle pour certains échantillons suivant les directions de vent rencontrées au cours des prélèvements.

Nous envisageons donc à travers cette thèse, de résoudre un problème de factorisation de matrices non-négatives informées par les connaissances ci-dessus et soumis à des points aberrants. Les méthodes développées sont dédiées à l'identification de sources de pollution dans l'air.

3 Plan du manuscrit

En complément de cette introduction générale, le présent manuscrit est organisé en cinq chapitres et une conclusion générale. Les contributions originales de cette thèse sont concentrées dans les chapitres 3, 4 et 5. Le mémoire se décompose en une partie d'état de l'art des méthodes de factorisation matricielle, une partie intégrant les connaissances expertes dans la factorisation et enfin une partie permettant de prendre en compte, dans la factorisation matri-

cielle non-négative (NMF pour *Non-negative Matrix Factorization* en anglais), un modèle de comportement de la dispersion des particules à partir d'une source ponctuelle.

3.1 État de l'art

Le chapitre 1 se place volontairement sous l'angle de la factorisation matricielle. Dans un premier temps, nous abordons différents modèles classiques de mélanges rencontrés dans la littérature, qui se formulent tous comme une factorisation de matrice spécifique. Dans un second temps, nous recensons les différentes hypothèses associées à ces modèles tout en évitant de décrire le coeur des différentes méthodes correspondantes. Les principales hypothèses demandent soit l'orthogonalité des sources, soit leur indépendance statistique, soit leur parcimonie, leur normalisation à 1, ou leur positivité. Ces contraintes peuvent bien entendu être associées, conduisant ainsi à des contraintes mixtes.

En accord avec la définition de notre problématique pratique, nous nous orientons vers les méthodes de factorisation matricielle non-négative puisque la positivité des facteurs est l'hypothèse centrale de notre problème.

3.2 Factorisation matricielle non-négative

Contrairement au chapitre précédent, le chapitre 2 explore en détail les méthodes de NMF, en posant le problème sous la forme d'un problème d'optimisation différentiable. En commençant par examiner les conditions nécessaires d'un minimum local ainsi que les conditions d'unicité, nous présentons ensuite les grandes familles d'algorithmes pour le problème de NMF standard basé sur la norme de Frobenius. Nous élargissons le champ de ces méthodes à des familles de fonctions de coût, différentes de la norme de Frobenius, appelées *divergences*. En effet, l'étude de divergences paramétriques pour la NMF semble une piste intéressante pour répondre aux possibles points aberrants présents dans les données et permettre leur mise en évidence. Par ailleurs, les gammes de valeurs des concentrations chimiques étant très différentes ainsi que leurs incertitudes, il paraît judicieux d'intégrer dans les expressions des divergences la notion de poids. Enfin, compte tenu de l'importance de l'aspect applicatif de ce travail de thèse et afin de préserver la fidélité aux espèces majeures, nous avons aussi proposé des recommandations dans le choix des paramètres de ces divergences.

3.3 NMF sous contraintes égalité

Le chapitre 3 est consacré à l'exploitation des contraintes de type égalité sur les profils dans les algorithmes de NMF. Nous y formulons en particulier une paramétrisation qui intègre

naturellement l'ensemble des contraintes égalité. Cette paramétrisation permet d'exprimer le problème dans le sous espace des contraintes et ainsi de développer des règles multiplicatives de NMF pour toutes les fonctions de coût définies dans le chapitre précédent. De manière alternative, nous proposons aussi des variantes de ces règles à partir de critères légèrement modifiés.

3.4 NMF sous contraintes de bornitude et de normalisation

En complément des connaissances sur certains éléments de profils, nous apportons dans le chapitre 4 deux types d'informations supplémentaires.

1. La première information découle de la définition d'un profil dont chaque ligne se somme à 1. Nous proposons donc des règles de mise à jour qui prennent en compte cette information supplémentaire.
2. La seconde information provient de l'encadrement de certains éléments du profil par des bornes minimales et maximales. Associées aux autres contraintes, la prise en compte de ces bornes permet de développer des règles de mise à jour associées à plusieurs nouvelles méthodes.

Des validations y sont proposées dans différentes conditions opératoires en utilisant un jeu de données synthétiques de faible dimension comportant uniquement 3 sources.

3.5 Factorisation matricielle informée par un modèle physique

Dans le chapitre 5, nous utilisons un modèle physique afin de mieux discerner quelles sources industrielles contribuent à un échantillon donné. Cela permet ainsi de calculer une structure de la matrice de contribution qui sert comme information entrante dans l'initialisation et les algorithmes dédiés de NMF.

Une large part de ce chapitre est aussi consacrée à l'identification des sources industrielles et naturelles sur le site de Dunkerque. Une présentation de la méthodologie y est effectuée et une comparaison des résultats de nos méthodes avec celles de la littérature est réalisée.

3.6 Conclusion générale

Enfin, le chapitre 6 rappelle les multiples contributions théoriques introduites dans ce travail de thèse et présente plusieurs perspectives de ces travaux.

Première partie

Un état des lieux en factorisation matricielle

Chapitre 1

Etat de l'art

1.1 Introduction

Ce chapitre a pour objectif de parcourir les différents types de modèles de données rencontrés dans la littérature. Nous nous focalisons sur la famille des modèles linéaires dans laquelle les mélanges linéaires instantanés font référence. L'enjeu de ce chapitre est de rattacher l'ensemble des modèles à une factorisation matricielle approchée pouvant se formuler comme un problème d'optimisation.

Dans un second temps, nous dressons un panorama général des hypothèses usuelles rencontrées dans la bibliographie et nous examinons aussi l'association de ces hypothèses de base sous la forme contraintes souples ou fermes.

Enfin, à travers la description succincte de notre application, nous envisageons des pistes d'investigation qui seront développées tout au long de ce mémoire.

1.2 Les types de mélanges considérés dans la littérature

Les types de mélanges se classent en fonction du modèle d'observation, qualifié de modèle direct, qui relie les observations aux différentes sources. Nous dressons un panorama des mélanges courants rencontrés dans la littérature, à savoir les mélanges linéaires et leurs dérivations. Nous restreignons notre étude cependant aux modèles invariants dans le temps, et nous excluons de notre travail le cas des mélanges non-linéaires (et notamment le cas des mélanges post-non-linéaires) pour lesquels les capteurs présenteraient des non-linéarités usuelles telles que les saturations [41, Ch. 14]. On se limite donc aux mélanges linéaires pouvant être déclinés en trois catégories :

1. les mélanges linéaires instantanés,

2. les mélanges à atténuations et décalages temporels,
3. les mélanges convolutifs.

1.2.1 Mélanges linéaires instantanés

Nous supposons disposer de n observations contenant l'activité de p sources émettant à un instant quelconque t . Ces sources se mélangent mutuellement selon un gain propre à chaque liaison source capteur et ce mélange est observé au niveau des différents capteurs. L'observation $x_i(t)$ du capteur i à l'instant t s'écrit sous la forme d'une combinaison linéaire des différentes sources au même instant t :

$$x_i(t) = \sum_{j=1}^p g_{ij} f_j(t) \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (1.1)$$

où

- g_{ij} correspond à l'atténuation du canal de transmission depuis la source j jusqu'au capteur i , $\forall i = 1, \dots, n$,
- $f_j(t)$ est la valeur relative à l'émission d'une source j à l'instant t , $\forall j = 1, \dots, p$.

La concaténation des différents capteurs conduit à la formulation vectorielle suivante :

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1p} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{np} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1(t) \\ f_2(t) \\ \vdots \\ f_p(t) \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

et de façon plus compacte :

$$\underline{x}(t) = G \underline{f}(t), \quad (1.3)$$

où :

- G désigne la matrice de mélange de taille $(n \times p)$ et de terme général g_{ij} . Cette matrice est supposée invariante au cours du temps ou des échantillons.
- $\underline{x}(t) \triangleq [x_1(t), \dots, x_n(t)]^T$ est le vecteur colonne de taille n qui représente les observations à l'instant t .
- $\underline{f}(t) \triangleq [f_1(t), \dots, f_p(t)]^T$ désigne le vecteur colonne de taille p qui contient les différents signaux sources à l'instant t .

En considérant m échantillons $\underline{x}_k = \underline{x}(k \cdot T_e)$, où $k = 1, \dots, m$ et où T_e est la période d'échantillonnage, l'expression (1.3) s'écrit

$$\underline{x}_k = G \underline{f}_k, \quad (1.4)$$

où $\underline{f}_k = \underline{f}(k \cdot T_e)$. Le regroupement des échantillons permet d'écrire le modèle du mélange (1.4) en notation matricielle :

$$X = G \cdot F, \quad (1.5)$$

où $X \triangleq [\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_m]^T$ et $F \triangleq [\underline{f}_1, \dots, \underline{f}_m]^T$ représentent respectivement la matrice de taille $n \times m$ des observations et la matrice de taille $p \times m$ des signaux sources¹.

Notons que G et F jouent ici des rôles symétriques en remarquant que l'expression (1.5) peut s'écrire de manière équivalente sous la forme suivante :

$$X^T = F^T G^T. \quad (1.6)$$

Le modèle de mélange linéaire instantané est utilisé dans de nombreuses applications. Nous dressons ci-après une liste non-exhaustive des champs d'application possibles :

- Dans le domaine des télécommunications [45, 151], les auteurs considèrent le cas où plusieurs signaux de radio-identification (RFID) sont observés en même temps par plusieurs capteurs. Chaque observation consiste alors en un mélange linéaire instantané des divers signaux sources observés.
- En bio-médecine, il existe un grand nombre d'applications où le modèle (1.5) est utilisé. Citons par exemple les travaux dans le domaine de l'activité cardiaque [146, 88]. Dans [146], les auteurs séparent les activités auriculaires et ventriculaires à partir de données issues d'électrodes placées à la surface de la peau. Dans des études similaires en rapport avec l'électrocardiogramme de la femme enceinte [88], il s'agit de séparer l'activité du coeur du fœtus à celui de la maman grâce au modèle de mélange linéaire instantané.
- En acoustique et en traitement du signal audiophonique, le modèle linéaire instantané n'est généralement pas valide. Il existe cependant quelques exceptions. C'est par exemple le cas lorsque plusieurs sources sont séquentiellement enregistrées en studio puis mélangées par un ingénieur du son, à l'aide d'une table de mixage, sans qu'il ne rajoute d'effet de post-traitement [168, 128].
- Dans le cadre de l'imagerie multispectrale/hyperspectrale, des images d'une même zone géographique sont obtenues pour différentes longueurs d'onde, générant ainsi un cube de données dont deux axes indiquent les coordonnées spatiales alors que le troisième fournit l'information spectrale. Pour chaque pixel spatial du cube, l'information spectrale observée est perçue comme un mélange linéaire instantané des spectres sources. C'est par exemple la vision retrouvée en astrophysique [16, 117] ou en télédétection² [109]. De

1. Il est à noter que dans l'application considérée dans cette thèse, les grandeurs physiques associées à n et m ne sont pas les mêmes que celles rencontrées classiquement en séparation de sources. Nous reviendrons sur ce point dans les prochains chapitres.

2. Il est à noter que de nombreux auteurs, comme par exemple [26, 27, 49, 105, 106, 134], considèrent des

manière alternative, on peut considérer au contraire que, pour chaque longueur d'onde, les images observées sont des mélanges instantanés d'images sources, que ce soit en astrophysique [17] ou télédétection [78].

- En physico-chimie, les mesures de spectres optiques de fluorescence, de Raman ou infrarouge d'un échantillon sont considérées comme un mélange linéaire instantané de spectres sources [59, 115, 116]. De la même manière, en environnement, les mesures de pollution atmosphérique ou aquatique [79, 98, 4] peuvent être assimilées à un problème de mélange linéaire instantané, si les sources ne sont pas trop lointaines en rapport à la distance parcourue par l'air pendant la période d'échantillonnage des données et si les capteurs ne présentent pas de défaut de linéarité.

En résumé, le champ d'applications du modèle (1.5) est très vaste, sous réserve de vérifier certaines hypothèses.

1.2.2 Mélanges à atténuation et décalages temporels

Appelés aussi mélanges anéchoïques, ce type de mélange représente une extension des mélanges linéaires instantanés dans le cas où les temps d'arrivée des signaux sur les différents capteurs subissent des décalages différents dûs à la propagation mono-trajet des sources vers les capteurs. Les observations $x_i(t)$ s'écrivent alors sous la forme :

$$x_i(t) = \sum_{j=1}^p g_{ij} f_j(t - t_{ij}) \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (1.7)$$

où g_{ij} et t_{ij} correspondent respectivement à l'atténuation et au décalage temporel dûs à la propagation de la source j jusqu'au capteur i .

Les mélanges à atténuation et décalages temporels, qui ont été considérés par exemple dans [173, 174, 141, 10, 142, 5], sont un cas particulier des mélanges convolutifs. La formulation matricielle pourra donc être obtenue en consultant les résultats du paragraphe suivant.

Le modèle de mélange anéchoïque est principalement utilisé en acoustique, en supposant que l'environnement est faiblement réverbéré [174, 141, 5]. Il est à noter que ce type de modèle est très utilisé en localisation de sources [84] et que certaines méthodes de localisation de sources multiples, par exemple [21, 129], sont directement inspirées par les méthodes de séparation ci-dessus. Notons par ailleurs que l'approche [10] a été proposée pour le traitement d'images. Dans ce cas, le décalage n'est pas temporel mais spatial, c.-à-d. que chaque source est décalée horizontalement et verticalement dans chaque observation.

modèles non-linéaires en télédétection.

1.2.3 Mélanges convolutifs

Dans la plupart des cas, les émissions des sources vers les capteurs s'effectuent selon des propagations multi-trajets qui peuvent être vues comme une somme de différentes propagations mono-trajets de ces sources, c.-à-d.,

$$x_i(t) = \sum_{j=1}^p \sum_{q=0}^{+\infty} g_{ijq} f_j(t - t_{ijq}), \quad (1.8)$$

où g_{ijq} et t_{ijq} sont respectivement la $(q+1)$ ème atténuation et le $(q+1)$ ème décalage temporel dûs à la propagation de la source j jusqu'au capteur i . L'expression (1.8) peut s'écrire sous forme d'une combinaison linéaire de versions filtrées des sources :

$$x_i(t) = \sum_{j=1}^p g_{ij}(t) * f_j(t), \quad (1.9)$$

où le symbole $*$ désigne l'opérateur de convolution et où $g_{ij}(t)$ est le filtre de propagation de la source j au capteur i . En pratique, la plupart des approches de séparation aveugle de sources considèrent que les filtres g_{ij} sont des filtres à réponse impulsionnelle finie d'ordre Q , l'ordre maximal pour l'ensemble des canaux. En reprenant les notations discrètes explicitées dans la section 1.2.1, les équations (1.8) et (1.9) s'écrivent

$$x_i(k) = \sum_{j=1}^p \sum_{q=0}^Q g_{ij}(q) f_j(k-q) \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (1.10)$$

$$= \sum_{j=1}^p g_{ij}(k) * f_j(k) \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (1.11)$$

où le terme $g_{ij}(k)$ correspond à la modélisation de la réponse impulsionnelle du filtre représentant le canal de propagation depuis la source j jusqu'au capteur i dans les conditions de l'échantillon k . Soit G_k la matrice formée par les différentes réponses impulsionnelles $g_{ij}(k)$ pour un échantillon k . On peut écrire l'expression (1.10) sous forme matricielle en permutant l'ordre des symboles sommes et en faisant apparaître la matrice des réponses impulsionnelles,

$$\underline{x}_k = \sum_{q=0}^Q G_k \underline{f}_{k-q} \quad (1.12)$$

où $\underline{f}_{k-q} \triangleq [f_1(k-q), \dots, f_p(k-q)]^T$ et $\underline{x}_k \triangleq [x_1(k), \dots, x_n(k)]^T$. L'expression (1.12) peut aussi s'écrire comme un produit matriciel [61, 102, 131, 161] en considérant un bloc composé par K

échantillons. Les équations d'un tel bloc peuvent s'exprimer sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \underline{x}_k & = G_0 \underline{f}_k + \dots + G_Q \underline{f}_{k-Q}, \\ \underline{x}_{k-1} & = G_0 \underline{f}_{k-1} + \dots + G_Q \underline{f}_{k-Q-1}, \\ \vdots & \\ \underline{x}_{k-K+1} & = G_0 \underline{f}_{k-K+1} + \dots + G_Q \underline{f}_{k-K-Q+1}. \end{cases} \quad (1.13)$$

Sachant que \underline{x}_k est un vecteur de dimension n , il est possible de définir le vecteur $\check{\underline{x}}_k$ de taille $n \cdot K$ tel que :

$$\check{\underline{x}}_k \triangleq [\underline{x}_k, \underline{x}_{k-1}, \dots, \underline{x}_{k-K+1}]^T. \quad (1.14)$$

De la même manière, le vecteur $\check{\underline{f}}_k$ de taille $p \cdot (K+Q)$ est introduit :

$$\check{\underline{f}}_k \triangleq [\underline{f}_k, \underline{f}_{k+1}^T, \dots, \underline{f}_{k-K-Q+1}^T]^T. \quad (1.15)$$

Le mélange convolutif peut ainsi être formulé sous une forme de factorisation similaire à (1.6) :

$$\check{\underline{x}}_k = \check{\check{A}} \cdot \check{\underline{f}}_k, \quad (1.16)$$

dans laquelle la matrice $\check{\check{A}}$ est une matrice Toeplitz définie comme :

$$\check{\check{A}} = \begin{pmatrix} A_0 & \dots & A_Q & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_0 & \dots & A_Q & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & A_0 & A_1 & \dots & A_Q \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Il est à noter que, de manière alternative, de nombreuses approches travaillent dans le domaine fréquentiel, en appliquant une transformée temps-fréquence aux observations [131]. Le modèle de factorisation (1.5) est ensuite utilisé successivement et indépendamment pour chaque bande fréquentielle considérée. En effet, dans ce cas, pour chaque fréquence, le mélange considéré est approximativement linéaire instantané à valeurs complexes. Ce type de problème est donc plus simple à traiter que le problème explicité dans l'équation (1.17), mais d'autres difficultés apparaissent et compliquent la séparation lorsqu'il faut revenir dans le domaine temporel [131].

En terme d'applications, les mélanges convolutifs sont les mélanges linéaires les plus généraux et sont par exemple appliqués en acoustique [131, 161].

1.2.4 Conclusion

Nous venons de parcourir les différents types de mélanges linéaires étudiés dans la littérature. Nous avons montré comment ceux-ci permettent d'exprimer la matrice de données observées X en un produit entre deux matrices. L'estimation d'un ou des deux facteurs matriciels peut être obtenue en associant un certain nombre d'hypothèses, que nous parcourons dans la suite de ce chapitre.

1.3 Mélanges sur-déterminés et sous-déterminés

Parmi les difficultés de la factorisation matricielle, le rapport entre le nombre d'observations et le nombre de sources est un problème d'intérêt pour un grand nombre d'applications et a permis la taxonomie que nous rappelons ci-dessous. Dans la plupart des applications et s'appuyant sur la relation (1.5) pour les mélanges linéaires instantanés (mais le problème peut être étendu à tout autre type de mélange), le nombre m d'échantillons dans X est beaucoup plus grand que les nombres n d'observations et p de sources. On sépare alors le cas (sur-)déterminé et sous-déterminé selon que $p \leq n$ ou $p > n$ respectivement. Cependant, en utilisant la relation (1.6) et en supposant un cadre plus général où m peut être relativement petit, nous pouvons généraliser cette taxonomie comme suit :

- si $p = \min(n, m)$, le mélange est dit déterminé et est le cadre généralement considéré dans de nombreuses approches de séparation de sources.
- Si $p < \min(n, m)$, le mélange est sur-déterminé, c'est à dire que nous avons plus de données que nécessaire.
- Enfin, si $p > \min(n, m)$, le mélange est sous-déterminé. Dans ce cas, le problème est mal posé et ne peut être résolu qu'en utilisant des hypothèses supplémentaires telles que
 - que le recours à un modèle des sources permettant de les distinguer [15],
 - des hypothèses de parcimonie [140, Ch. 1],
 - et/ou encore un alphabet fini de valeurs possibles des sources [7].

Notre problématique correspond au cas sur-déterminé. En conséquence, nous n'évoquerons plus dans ce mémoire le cas des mélanges sous-déterminés.

1.4 Panorama des hypothèses usuelles et des algorithmes de factorisation associés

Nous nous intéressons dans la suite du document aux méthodes de factorisation, dans un cadre de mélange linéaire instantané. Toutes les méthodes que nous introduisons exigent une

information complémentaire relative aux sources recherchées. Elles se déclinent usuellement en cinq grandes catégories :

- l'orthogonalité des sources,
- l'indépendance statistique,
- l'hypothèse de parcimonie des sources ou de la matrice de mélange,
- la normalisation de la distribution des facteurs d'influence,
- la positivité des composantes.

Aussi, nous présenterons succinctement les méthodes de factorisation matricielle utilisant les hypothèses ci-dessus, c.-à-d. :

- l'Analyse en Composantes Principales (ACP) revisitée selon une approche géométrique de factorisation,
- l'Analyse en Composantes Indépendantes (ACI) basée sur l'hypothèse d'indépendance,
- l'Analyse en Composantes Parcimonieuses (SCA pour *Sparse Component Analysis* en anglais) basée sur la parcimonie des signaux sources,
- la classe des méthodes à normalisation,
- les factorisations matricielles positives ou non-négatives (PMF et NMF, pour *Positive Matrix Factorization* et *Non-negative Matrix Factorization* en anglais, respectivement).

1.4.1 Analyse en Composantes Principales

Dans cette section, nous proposons de revisiter l'ACP sous l'angle de la factorisation matricielle. A l'origine, l'analyse en composantes principales est une méthode statistique multivariée qui fut introduite par K. Pearson en 1901 [130] puis développée par H. Hotelling en 1933 [69]. L'idée générale du fonctionnement de l'ACP se résume à une réduction de dimension d'un ensemble de données avec un grand nombre de variables interdépendantes pour former un sous-espace constitué de ce que l'on appelle des composantes principales. Cependant, nous adoptons le point de vue de l'optimisation matricielle issu d'une interprétation géométrique. Une interprétation statistique classique est formulée dans un deuxième temps, à partir des résultats précédents.

Une approche géométrique : L'annexe A explique que la vision géométrique de l'ACP consiste à chercher un sous espace de dimension p qui représente au mieux la répartition des n points dans \mathbf{R}^m au sens des moindres carrés. Ce sous-espace est défini par les p vecteurs de base contenus dans la matrice U_p . Cette recherche s'écrit comme l'optimisation de la matrice U_p sous contrainte d'orthogonalité. Elle s'écrit sous la forme du critère (A.8) qui fait apparaître que la matrice des points centrés X' est vue comme une factorisation approchée sous contrainte

d'orthogonalité, c.-à-d.,

$$X' \approx X' \cdot U_p \cdot U_p^T \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p \quad (1.18)$$

Il apparaît aussi clairement dans l'annexe A que la décomposition en valeurs singulières tronquées aux p premières valeurs propres est la solution du problème d'ACP.

Une approche statistique : L'interprétation statistique de l'ACP est bien entendu courante ; elle s'exprime comme la recherche du sous espace de dimension p qui maximise la dispersion des données. L'équation (A.10) de l'annexe A montre en particulier que cela revient aussi à maximiser la norme de Frobenius de la matrice $(X' \cdot U_p)$ qui exprime une dispersion maximale des points originaux dans ce sous-espace. Les auteurs de [179] expriment aussi le même critère de dispersion maximale. Il est montré dans [166] que les p composantes principales de ces points \underline{x}_i sont données par les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres les plus élevées de la matrice de covariance $\Sigma_x \triangleq E(\underline{x}' \cdot \underline{x}'^T)$. Ils correspondent exactement aux p vecteurs colonnes de la matrice U_p .

Compléments de l'ACP : L'ACP peut aussi être englobée dans un cadre plus large correspondant aux techniques d'approximation de rang faible. Parmi ces méthodes, on peut noter des versions qui recherchent une décomposition au sens des moindres carrés pondérés, développées par exemple dans [121]. Des équivalences fortes ont été établies entre les méthodes classiques d'ACP et les méthodes pondérées d'approximation de rang faible [154]. Nous pouvons aussi noter l'existence d'un travail qui propose une vision unifiée des modèles de factorisation [156], dont, en particulier, l'ACP.

Par ailleurs, l'ACP n'est pas robuste aux points aberrants de par sa formulation de type moindres carrés qui procure un effet levier dès lors que des points aberrants sont présents. Dans cette optique, des versions robustes de factorisation ont été développées qui recherchent une décomposition en une matrice de rang faible et une matrice creuse, obtenue en particulier par des méthodes de poursuite des composantes principales [24, 172].

En conclusion, le champ des méthodes qui gravitent autour de l'ACP est très vaste. L'ACP correspond à une factorisation particulière de la matrice des données centrées. Toutefois, plusieurs éléments rendent l'ACP peu adaptée à notre problématique :

- la contrainte d'orthogonalité de l'un des facteurs ne sera pas retenue dans la problématique que nous abordons,
- les éléments de la matrice des composantes principales peuvent être à valeurs négatives,
- et en présence d'aberrations, l'ACP standard se trouve attirée par les points aberrants.

Nous proposons d'étudier d'autres types de contraintes sur les éléments de la factorisation.

1.4.2 Analyse en Composantes Indépendantes

L'ACI est la première et la plus étudiée des voies permettant de séparer des signaux sources à partir de multiples mélanges de ces signaux. L'ACI d'une matrice de données aléatoires X consiste à trouver un opérateur \mathcal{W} tel que les signaux $y_i(t)$ de la matrice Y définie comme

$$Y = \mathcal{W}(X) \quad (1.19)$$

soient "aussi indépendants que possible", dans le sens de la minimisation d'une fonction qui mesure la dépendance des signaux $y_i(t)$, c.-à-d., $\mathcal{F}(y_1(t), \dots, y_p(t))$. Dans le cadre de mélanges linéaires, cet opérateur \mathcal{W} est une simple matrice de séparation W , c.-à-d.,

$$Y = WX. \quad (1.20)$$

Idéalement, W est la (pseudo-)inverse³ de G . Cependant, en pratique, des indéterminations propres à la Séparation Aveugle de Sources (SAS) sont rencontrées, à savoir que l'estimation de la pseudo-inverse de G n'est possible qu'à une permutation et des gains près. Nous obtenons alors la relation approchée suivante,

$$W \cdot G \simeq D \cdot P, \quad (1.21)$$

où D et P sont respectivement une matrice diagonale et une matrice de permutation [40]. Nous en déduisons alors le lien entre Y et F :

$$Y = W \cdot X, \quad (1.22)$$

$$= W \cdot G \cdot F, \quad (1.23)$$

$$\simeq D \cdot P \cdot F. \quad (1.24)$$

Les premières méthodes ont été proposées par C. Jutten et J. Héroult [71, 77] qui réalisaient une ACP non-linéaire. Il faudra attendre les travaux de P. Comon [40] pour généraliser le concept d'ACI. Ce dernier démontre, dans le cas de mélanges linéaires instantanés, que si les signaux sources sont supposés mutuellement indépendants et non-gaussiens (sauf pour au

3. La plupart des méthodes d'ACI permettent de traiter le cas déterminé ou sur-déterminé. Dans le premier cas, la matrice G est carrée et inversible. Dans le second cas, il est classique d'appliquer une ACP sur les données pour revenir à un cadre déterminé en réduisant la dimension du problème tout en limitant les effets de bruit. Bien qu'il existe un certain nombre de méthodes pouvant traiter des mélanges sous-déterminés [25, 44, 42], nous considérons les mélanges (sur-)déterminés ci-dessous.

plus une source), il est possible de séparer ces signaux à un facteur d'échelle et une permutation près en cherchant à minimiser en sortie du système de séparation les mesures de dépendances entre les signaux estimés. Dès lors, de nombreuses mesures \mathcal{F} ont été proposées pour réaliser la séparation et la plupart des approches d'ACI sont basées sur [74] :

- la maximisation de la non-gaussianité des signaux sources en utilisant les statistiques d'ordre supérieur comme par exemple les auto-cumulants d'ordre 4 ou kurtosis [75], ou encore le calcul de la néguentropie mesurant l'éloignement à une distribution Gaussienne [73].
- la minimisation de mesures d'indépendance entre deux composantes comme la divergence de Kullback-Leibler ou l'information mutuelle [40, 51],
- la maximisation de la vraisemblance des signaux sources à partir d'hypothèses a priori sur la forme des densités des signaux recherchés [11],
- les statistiques d'ordre deux, en ajoutant d'autres hypothèses sur les signaux sources :
 - leur auto-corrélation (de manière différente) [162, 12],
 - leur non-stationnarité [158, 133].

Notons, en parallèle de ces approches classiques d'ACI, l'existence d'approches utilisant des hypothèses complémentaires comme la parcimonie [8, 118] ou la non-négativité [176, 124].

Compte tenu de l'application considérée, où les signaux sont non-négatifs et possiblement corrélés, l'ACI n'apparaît pas comme un outil adapté et nous n'en parlerons pas plus dans le cadre de cette thèse.

1.4.3 Méthodes faisant appel à la parcimonie des signaux sources

La parcimonie est une hypothèse qui connaît une grande attention de la part de la communauté scientifique depuis une quinzaine d'années. Un signal est dit parcimonieux s'il est souvent nul ou négligeable alors que sa variance n'est pas nulle. Généralement, un signal n'est pas parcimonieux dans son domaine original mais dans un domaine transformé. Historiquement, les premières approches considérées en séparation de sources faisaient appel à des transformées temps-fréquence, qui peuvent être des décompositions énergétiques ou atomiques.

- Les approches de séparation utilisant une décomposition énergétique sont généralement issues des méthodes statistiques d'ordre 2 [13, 54].
- Les approches fondées sur des décompositions atomiques [29], aussi connues sous le nom de méthodes d'Analyse en Composantes Parcimonieuses (SCA pour *Sparse Component Analysis* en anglais) [41, Ch. 10], ont été beaucoup plus étudiées, de par le fait que la décomposition atomique est linéaire.

La plupart des approches de SCA sont fondées sur les étapes suivantes :

1. une transformation parcimonieuse conjointe (transformée de Fourier à court terme, ondelettes, transformée en cosinus discrète, etc),
2. une estimation des paramètres de mélange, c.-à-d. la matrice G dans le cas de mélanges linéaires instantanés (1.5),
3. l'estimation des signaux sources F , sous forme d'un problème inverse à partir de l'équation (1.5).

L'estimation des paramètres de mélange est possible grâce à la parcimonie des sources. La plupart des approches supposent que pour chaque échantillon k , seule une source, disons $f_{j_0}(k)$, est active, c.-à-d. que toutes les autres sources sont négligeables. Le problème est donc localement sur-déterminé (et la séparation des sources peut être vue comme un problème particulier de classification non-supervisée) [174]. Cette hypothèse a ensuite été progressivement relâchée par de nombreux auteurs [1, 46, 140, 5, 145, 64, 119, 147]. Un état de l'art fourni sur de telles approches peut par exemple être trouvé dans [140].

Plus récemment, des approches utilisant la parcimonie comme un critère d'optimisation ont été proposées. Elles se fondent soit sur l'utilisation (d'unions) de dictionnaires où les sources sont connues pour être parcimonieuses [22] soit sur la recherche d'opérateurs promouvant la parcimonie des signaux extraits [120, 56].

Cependant, en dehors de la mesure intermittente de l'activité de certaines sources (cet aspect est discuté dans le chapitre 5), l'hypothèse de parcimonie ne semble pas naturellement adaptée dans le cas de l'application considérée dans cette thèse. Plus précisément, le choix d'une transformée rendant les sources $f(k)$ parcimonieuses n'est pas trivial. De manière alternative, il serait possible d'apprendre un dictionnaire à partir des données observées [2, 149, 150]. Cependant, apprendre un dictionnaire non-négatif à partir de données positives, bruitées et contenant des valeurs aberrantes (comme le sont les signaux considérés dans la partie applicative de cette thèse) est un problème difficile, qui présente des similitudes avec une factorisation robuste en matrices non-négatives, que nous présentons (en partie) dans la section 1.4.5 et dans le chapitre suivant. En conséquence, cette hypothèse ne sera pas explorée dans les prochains chapitres.

1.4.4 Méthodes utilisant la normalisation d'un facteur

L'hypothèse de la normalisation d'un des facteurs est une information importante qu'il faut savoir exploiter. Elle vient donc en complément du modèle de mélange linéaire instantané (1.5). Plusieurs points de vue peuvent être rencontrés selon que l'on applique la normalisation à l'un ou l'autre des facteurs.

Normalisation des lignes de G ou des colonnes de F : Dans un premier cas, nous pouvons supposer que la normalisation concerne les lignes du premier facteur dans l'expression (1.5). Celle-ci s'écrit

$$G_{n \times p} \cdot 1_{p \times p} = 1_{n \times p}, \quad (1.25)$$

où $1_{n \times p}$ désigne la matrice de 1 de taille $n \times p$. Cette normalisation concerne, de manière équivalente, les colonnes du second facteur, à savoir G^T , si on considère la factorisation (1.6). En permutant le rôle de X et X^T , la normalisation s'adresse, de manière similaire, aux lignes de F^T ou aux colonnes de F .

Cette hypothèse de normalisation des lignes de G est classiquement rencontrée en télédétection [109], où les données sont représentées par des proportions des différentes signatures spectrales.

La relation (1.25) rend le problème d'optimisation lié à l'estimation de G et de F séparable en n sous-problèmes indépendants avec p inconnues dans chacun. Le problème d'optimisation consiste alors à trouver les matrices G et F telles que

$$X \approx G \cdot F \quad \text{s.c.} \quad G_{n \times p} \cdot 1_{p \times p} = 1_{n \times p}. \quad (1.26)$$

Les méthodes pour résoudre le problème (1.26) ont d'abord été abordées d'un point de vue vectoriel, dans le cadre d'un problème de type moindres carrés avec les contributions de [155]. Le formalisme du Lagrangien permet d'intégrer la contrainte de somme à 1 du vecteur des proportions recherchées. Elle donne lieu à une solution analytique calculable directement. La méthode, aussi évoquée dans [65], est appelée Moindres carrés à Somme 1 (SCLS pour *Sum-to-one Constrained Least Squares* en anglais). Ces méthodes sont aussi en général enrichies de la notion de positivité qui sera détaillée dans la section 1.4.5.

Toutefois, cette propriété de séparabilité n'est pas valide avec la seconde contrainte de somme à 1 que nous décrivons ci-dessous.

Normalisation des colonnes de G ou des lignes de F : Dans un second cas, nous pouvons supposer que la normalisation s'applique aux colonnes de G ou, de manière équivalente et pour les mêmes raisons que précédemment, aux lignes de F , c.-à-d. :

$$F_{p \times m} \cdot 1_{m \times m} = 1_{p \times m}. \quad (1.27)$$

La matrice ainsi normalisée – aussi nommée "matrice stochastique ligne" dans [68] et notée \tilde{F} ci-dessous – s'obtient à partir d'une version non-normalisée quelconque F ainsi :

$$\tilde{F} = \frac{F}{F \cdot \mathbf{1}_{m \times m}}, \quad (1.28)$$

où la fraction représente la division terme à terme des éléments des matrices opérandes. De même, on peut faire apparaître une nouvelle matrice \tilde{G} telle que

$$\tilde{G} \cdot \tilde{F} = G \cdot F. \quad (1.29)$$

A partir des expressions (1.29) et (1.28), nous déduisons l'expression de \tilde{G} qui dépend de F^T :

$$\tilde{G} = G \circ (\mathbf{1}_{n \times m} \cdot F^T), \quad (1.30)$$

où l'opérateur \circ représente la multiplication terme à terme des matrices opérandes. Ces nouvelles contraintes induisent une factorisation dédiée aux mélanges linéaires instantanés de somme égale à 1, c.-à-d., combinant les équations (1.5) et (1.27). En particulier, le problème d'optimisation consiste à estimer les matrices G et F telles que

$$X \approx G \cdot F \quad \text{s.c.} \quad F_{p \times m} \cdot \mathbf{1}_{m \times m} = \mathbf{1}_{p \times m}. \quad (1.31)$$

Cette formulation correspond en fait au point de vue adopté dans notre application pratique, comme nous le verrons dans les prochains chapitres. Notons qu'ici (et contrairement à la situation rencontrée dans le précédent paragraphe), le problème n'est pas séparable en n sous-problèmes.

A partir de ces contraintes strictes, nous pouvons déduire des contraintes induites, comme nous allons maintenant le voir. Dans un premier temps, supposons que nous ayons une relation *exacte* entre X , G et F , c.-à-d.,

$$X = G \cdot F. \quad (1.32)$$

En multipliant à droite l'équation (1.32) par la matrice $\mathbf{1}_{m \times m}$ et en combinant cette expression avec les contraintes (1.27), nous obtenons :

$$X_{n \times m} \cdot \mathbf{1}_{m \times m} = G_{n \times p} \cdot F_{p \times m} \cdot \mathbf{1}_{m \times m}, \quad (1.33)$$

$$= G_{n \times p} \cdot \mathbf{1}_{p \times m}, \quad (1.34)$$

c.-à-d. que la somme de chaque ligne de G est égale à la somme de la lignes de X correspondante. Cette propriété est très proche de celle décrite dans l'équation (1.25). Cependant, en

pratique et comme explicité dans l'expression (1.5), nous n'avons pas une relation exacte mais *approchée* entre X , G et F , à cause de la présence possible de bruit, de valeurs aberrantes ou d'approximation du modèle. Dans ce cas, la relation (1.34) n'est qu'approchée, c.-à-d.

$$G_{n \times p} \cdot 1_{p \times m} \simeq X_{n \times m} \cdot 1_{m \times m}. \quad (1.35)$$

A notre connaissance, les contraintes induites (1.35) ne sont pas considérées dans la littérature, mis à part par les auteurs de [87] qui cherchent à estimer des matrices non-négatives G et F en rajoutant des contraintes à la fois sur les lignes de F et de G .

1.4.5 Méthodes à base de non-négativité

Les approches utilisant des hypothèses de non-négativité connaissant un vif intérêt de la part de la communauté scientifique de par le nombre important de problèmes physiques où les variables présentent uniquement un support positif ou nul. Or, les méthodes précédemment étudiées – comme l'ACP, l'ACI ou la SCA – ne peuvent garantir, dans leur version classique, l'obtention de résultats non-négatifs. Ces méthodes ne sont en particulier pas opérationnelles pour l'application considérée dans cette thèse.

Alors que certains travaux ont consisté à étendre l'ACP ou l'ACI à un cadre non-négatif [137, 138, 139], un grand nombre d'auteurs ont travaillé sur le développement d'approches *ad hoc* pour ce type de données.

La PMF : les premiers travaux, nommés factorisation matricielle positive (PMF pour *Positive Matrix Factorization* en anglais), ont consisté à estimer simultanément G et F en résolvant le problème d'optimisation sous la forme d'un problème de type moindres carrés [126, 125]. Le premier inconvénient de cette technique est lié à la taille des matrices manipulées qui limitent en pratique les dimensions des problèmes à traiter [59]. Le second handicap réside dans l'existence de multiples minima locaux, qui requièrent de la part d'un utilisateur d'effectuer des initialisations multiples. Cependant, celle-ci s'est révélée tout à fait adaptée à de nombreuses études de répartition de sources de pollution, dont, par exemple, [143].

La NMF : Les méthodes les plus célèbres, proposées par Lee et Seung [90, 91] et connues sous le nom de NMF (pour *Non-negative Matrix Factorization* en anglais) proposent des mises à jour multiplicatives. Lee et Seung mentionnent que cette mise à jour est un bon compromis entre vitesse de convergence et facilité de mise en œuvre. La mise à jour de F (respectivement G) est effectuée par la multiplication de chacun de ces termes par un coefficient qui dépend de la matrice de données X et la matrice de contributions G (respectivement la matrice de profils

F) :

$$F = F \circ \frac{G^T X}{G^T G F}, \quad (1.36)$$

$$G = G \circ \frac{X F^T}{G F F^T}, \quad (1.37)$$

où $\frac{U}{V}$ indique la division terme à terme entre deux matrices quelconques U et V . Les méthodes de NMF peuvent être vues comme des approches d'apprentissage de dictionnaire non-négatif où les atomes du dictionnaire et les coefficients de poids sont respectivement contenus dans F et G [90]. Cependant, les méthodes de NMF souffrent du fait que la convergence vers un optimum global n'est pas garantie [152]. Certaines approches, comme par exemple [152], proposent donc de rajouter des contraintes à la NMF pour garantir cette convergence.

Les ANLS : Comme les approches de PMF, la méthode des moindres carrés alternés non-négatifs (ANLS pour *Alternating Non-negative Least Squares* en anglais) s'intéresse à la factorisation (1.31) couplée à une contrainte de positivité. Cependant, et contrairement à la PMF mais comme pour les approches de NMF, on considère alternativement que l'une des deux matrices est connue et que la mise à jour s'effectue sur l'autre. Cette recherche s'effectue vectoriellement, pour chaque colonne de la matrice à estimer. La résolution de ce problème est généralement plus coûteuse en temps à chaque itération que la mise à jour multiplicative mais le nombre d'itérations utile est plus réduit. Cette méthode peut être considérée comme un cas particulier du cadre de descente par bloc coordonnées dans le cas de deux blocs [83].

Les gradients projetés : Lin [96] a proposé une approche utilisant des techniques de gradients projetés pour une optimisation à contrainte de bords. La mise à jour de la matrice est obtenue par projection des données sur la région de valeurs admissibles

$$F^{k+1} \leftarrow \mathcal{P} \left\{ F^k - \alpha^k \nabla_{F^k} \left(\|X - G^k F\|_f^2 \right) \right\}, \quad (1.38)$$

où la projection $\mathcal{P}\{\cdot\}$ permet de ramener les valeurs de F qui seraient en dehors d'une région bornée à ses bords :

$$\forall (i,j) \in \{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, m\}, \quad (\mathcal{P}\{X\})_{i,j} = \begin{cases} X_{i,j} & \text{si } m_{i,j} \preceq X_{i,j} \preceq M_{i,j}, \\ M_{i,j} & \text{si } X_{i,j} \succeq M_{i,j}, \\ m_{i,j} & \text{si } X_{i,j} \preceq m_{i,j}. \end{cases} \quad (1.39)$$

Beaucoup de travaux, dont [19], ont porté sur la recherche du pas α^k qui satisfasse une décroissance suffisamment rapide à chaque étape. Cette étape est aussi celle qui est la plus coûteuse en temps de calcul.

Récemment, Zandifar *et al.* ont proposé une approche utilisant les gradients projetés et une propriété d'indépendance statistique des signaux sources [178].

Non-négativité et somme à 1 : La contrainte de non-négativité peut parfois être associée de manière explicite à une contrainte de somme à 1. Les remarques reportées dans la section 1.4.4 restent vraies, mis à part qu'une hypothèse de non-négativité des données doit être en plus vérifiée. Outre les travaux proposés dans cette thèse, citons par exemple le travail proposé dans [87].

Positivité et orthogonalité : La contrainte d'orthogonalité peut être vue comme un complément de la non-négativité. On parlera alors dans la littérature de *NMF orthogonale* où le problème à résoudre se décrit sous la forme d'une fonction d'attache aux données associée à une mesure de la contrainte d'orthogonalité :

$$\min_{G, F \succeq 0} \mathcal{D}(X || GF) = \min_{G, F \succeq 0} \sum_{ij} (X_{ij} - (GF)_{ij})^2 + \alpha \text{po}(G), \quad (1.40)$$

où $\text{po}(G)$ est une mesure positive de l'orthogonalité de G . Différentes variantes de la mesure d'orthogonalité peuvent se rencontrer avec la version de Choi [175] ou bien celle développée dans les méthodes de type projective NMF [177]. Ces méthodes sont parfois combinées avec la notion de parcimonie évoquée ci-dessus.

Au contraire, on pourra considérer la non-négativité comme une contrainte additionnelle à l'orthogonalité. On utilisera alors le terme d'*ACP non-négative*. Dans ce cas, il s'agit dans [179], de maximiser la dispersion d'une part et d'autre part de minimiser l'écart à la propriété d'orthogonalité d'une matrice. Comme indiqué en début de section, les approches basées [137, 138, 139] sur l'ACI ou l'ACP rentrent aussi dans cette catégorie.

Factorisation exacte : Les approches ci-dessus (et celles développées dans cette thèse) se focalisent sur des solutions approchées de la factorisation de X . Il existe cependant des travaux qui se concentrent sur la factorisation exacte. Par exemple, Vavasis [164] montre que réaliser une telle factorisation est NP-difficile. Donoho et Stodden [50] montrent qu'avec une propriété de "quasi-séparabilité" des sources (qui équivaut *in fine* aux hypothèses de parcimonie que l'on rencontre dans les approches de SCA), la NMF converge de manière presque sûre. Récemment, plusieurs auteurs ont utilisé cette propriété pour développer de nouvelles approches [6, 20, 58].

1.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les modèles classiques de mélanges, et nous nous sommes attachés à présenter une vue générale des contraintes additionnelles à ces modèles. Les contraintes les plus courantes consistent en l'orthogonalité d'un facteur, l'indépendance ou la non-négativité. Des informations additionnelles telles que la régularité ou la parcimonie de ce facteur peuvent être incorporées, débouchant sur différentes méthodes associées.

Notre problème pratique se classe dans les problèmes de répartition de sources de pollution, régi par le modèle linéaire instantané. Par ailleurs, la factorisation obtenue vérifie la contrainte de positivité de tous ses facteurs. La résolution de ce problème est en général abordé sous l'angle de la PMF en sciences de l'environnement.

Nous avons abordé dans ce chapitre les principales méthodes de factorisation de matrices qui pourraient permettre de traiter les données considérées dans cette thèse. Il apparaît alors que :

- les approches d'ACP ne nous semblent pas adaptées au problème considéré (alors qu'elles sont aujourd'hui très utilisées par la communauté de chimistes). En effet, elles sont peu robustes aux valeurs aberrantes (ou bruits impulsifs), elles imposent l'orthogonalité des composantes (qui n'est pas vérifiée en pratique dans l'application que nous considérons) et elles font disparaître la non-négativité des signaux durant l'étape de centrage.
- les approches d'ACI peuvent être vues comme des extensions non-orthogonales de l'ACP. Elles ne sont cependant pas complètement adaptées au problème considéré car certaines sources peuvent être corrélées en pratique dans l'application considérée, ce qui rend les approches de la littérature inefficaces dans ce cas.
- les approches fondées sur la parcimonie ne semblent pas non-plus adaptées, compte tenu du fait qu'il n'est pas garanti de trouver un dictionnaire où les sources seraient parcimonieuses.

Nous pensons donc judicieux de nous concentrer sur les méthodes de type NMF, même si certaines d'entre elles présentent le défaut des solutions multiples. Nous passerons donc en revue ces méthodes dans le prochain chapitre ainsi que les notions importantes de l'optimisation mathématique.

Chapitre 2

Factorisation matricielle non-négative

2.1 Introduction

Ce chapitre vise à présenter les notions essentielles de la factorisation matricielle non-négative, ainsi que les classes d’algorithmes permettant d’y apporter des solutions. Il se veut donc être un chapitre bibliographique, tout en gardant à l’esprit les éléments importants de notre problématique pratique dont nous rappelons ici les caractéristiques.

Nous disposons donc d’une matrice de données qui rassemble différentes concentrations en espèces chimiques, à la cadence d’un échantillon toutes les douze heures. Ces données sont issues d’un mélange instantané de différentes sources de pollutions, ce qui se traduit sous forme mathématique : étant donnée une matrice de données X de taille $(n \times m)$ et de terme général $x_{ij} \geq 0$, la NMF consiste à retrouver deux matrices non négatives G de taille $(n \times p)$ et F de taille $(p \times m)$ (avec $p < \min(n, m)$) dont le produit est une approximation de X , c.-à-d.,

$$X \approx G \cdot F. \tag{2.1}$$

Dans l’application considérée dans le cadre de cette thèse, les matrices X , G et F représentent les grandeurs physiques suivantes :

- X est la matrice de données⁴ où l’élément x_{ij} est la concentration chimique de l’espèce j dans l’échantillon i et exprimée en ng/m^3 . Une ligne de X regroupe donc les concentrations des différentes espèces chimiques pour un même échantillon.
- G est la matrice dont chaque élément g_{ik} représente la contribution massique en ng/m^3 de la source k dans l’échantillon i .
- F est la matrice de profil dont chaque élément f_{kj} constitue la proportion relative en

4. Contrairement aux applications classiques en Séparation de Sources, n représente le nombre d’échantillons mesurés au cours du temps et m le nombre d’espèces chimiques analysées.

ng/ng de l'espèce chimique j pour la source k . Elle représente la quantité de masse émise de l'espèce chimique j par unité de masse émise par la source k .

Nous allons donc développer dans ce chapitre des critères permettant de formuler le problème sous différentes formes, puis nous proposerons différentes classes d'algorithmes permettant de donner des solutions au problème précédent. Il est par ailleurs souhaitable que les solutions trouvées ne soient pas trop sensibles aux aberrations que peuvent contenir les données de concentration. C'est dans cet esprit que nous évoquerons la divergence paramétrique, apparaissant comme une mesure dissimilarité robuste vis à vis des points aberrants.

2.2 Notions préliminaires

Avant d'étudier la factorisation matricielle non négative, il est utile de rappeler quelques notions utilisées en théorie de l'optimisation [68].

2.2.1 Optimisation d'une fonction

Nous examinons le problème de la minimisation d'une fonction $f(x)$ définie sur un espace Ω inclus dans \mathbf{R}^n vers \mathbf{R} ,

$$\min_{x \in \Omega} f(x) \quad (2.2)$$

Nous distinguons deux types de minima définis ci-dessous :

Définition 2.2.1. Un point \underline{x}^* est dit minimum local d'une fonction $f(\underline{x})$ dans un voisinage $V(\underline{x}^*)$ de \underline{x}^* si et seulement si

$$\forall \underline{x} \in V(\underline{x}^*) \cap \Omega, \quad f(\underline{x}) \geq f(\underline{x}^*). \quad (2.3)$$

Définition 2.2.2. Un point \underline{x}^* est dit minimum global d'une fonction $f(\underline{x})$ sur Ω si et seulement si

$$\forall \underline{x} \in \Omega, \quad f(\underline{x}) \geq f(\underline{x}^*). \quad (2.4)$$

En dehors des cas où la fonction f est convexe, trouver le minimum global est une tâche difficile. En conséquence, la recherche se concentre sur l'ensemble des minima locaux vérifiant des conditions nécessaires. Celles-ci sont décrites dans [100] et résumées dans la proposition 2.2.1 :

Proposition 2.2.1. Soit f une fonction de classe C^1 sur Ω . Si \underline{x}^* est un minimum local de $f(\underline{x})$, alors, pour toute direction faisable \underline{d} autour de ce point \underline{x}^* , nous avons $\nabla f(\underline{x}^*)\underline{d} \geq 0$.

En clair, cette proposition traduit simplement le fait que toutes les directions admissibles conduisent à une augmentation de la fonction f . Deux cas se distinguent particulièrement :

1. Si ce point \underline{x}^* se trouve à l'intérieur du domaine impliquant que toutes les directions sont admissibles, alors la condition dans la proposition (2.2.1) se simplifie en

$$\nabla f(\underline{x}^*) = \underline{0}. \quad (2.5)$$

2. Par contre, si nous sommes sur la frontière définie par Ω , alors le gradient $\nabla f(\underline{x}^*)$ est en général différent du vecteur nul et seule la proposition 2.2.1 est applicable.

Dans le cas particulier d'une fonction f strictement convexe, un minimum local est un minimum global, rendant sa recherche plus aisée.

2.2.2 Conditions de Karush-Kuhn Tucker

Considérons maintenant le problème à contraintes suivant :

$$\min_{\underline{x} \in \Omega} f(\underline{x}) \quad \text{s.c.} \quad h_i(\underline{x}) = 0, \quad g_j(\underline{x}) \leq 0, \quad (2.6)$$

où $h_i(\underline{x}) = 0$ désigne les contraintes égalité pour $i \in \{1, \dots, c_E\}$, et $g_j(\underline{x}) \leq 0$ représente les contraintes inégalité pour $j \in \{1, \dots, c_I\}$, avec c_E et c_I le nombre de contraintes de type égalité et inégalité, respectivement. Supposons qu'il existe un point \underline{x}^* qui soit un minimum local du problème (2.6). Supposons aussi que les trois fonctions ci-dessus soient de classe C^1 sur Ω et que les gradients $\nabla g_j(\underline{x}^*)$ et $\nabla h_i(\underline{x}^*)$ soient linéairement indépendants. Alors, il existe des constantes uniques λ_i pour $i \in \{1, \dots, c_E\}$ et μ_j pour $j \in \{1, \dots, c_I\}$ tels que :

$$\nabla f(\underline{x}^*) + \sum_{i=1}^{c_E} \lambda_i \nabla h_i(\underline{x}^*) + \sum_{j=1}^{c_I} \mu_j \nabla g_j(\underline{x}^*) = \underline{0}, \quad (2.7)$$

$$\mu_j \geq 0, \quad \forall j = 1, \dots, c_I, \quad (2.8)$$

$$\mu_j g_j(\underline{x}^*) = 0, \quad \forall j = 1, \dots, c_I. \quad (2.9)$$

La condition exprimée dans l'expression (2.9) est aussi appelée condition des écarts complémentaires (en anglais : *Complementary Slackness*). Ces conditions sont en général obtenues par l'écriture d'une fonction Lagrangienne qui rassemble l'objectif et les contraintes. Ces conditions de KKT sont juste des conditions nécessaires d'un minimum local. Ces conditions sont suffisantes dans le cas d'une fonction $f(\underline{x})$ convexe.

2.3 Présentation du problème classique de NMF

Dans cette section, nous allons présenter la formulation standard de la NMF basée sur une mesure d'écart de type norme de Frobenius. Cette mesure est l'extension à des matrices de la norme Euclidienne, dédiée à des vecteurs. Le problème de la NMF de Frobenius consiste donc à résoudre le problème suivant : Etant donné une matrice de données X de taille $n \times m$ et un entier p prédéfini,

$$\min_{G, F \succeq 0} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m ((x_{ij} - (GF)_{ij}))^2 = \min_{G, F \succeq 0} \|X - G \cdot F\|_f^2, \quad (2.10)$$

où $G \in \mathbf{R}_+^{n \times p}$, $F \in \mathbf{R}_+^{p \times m}$ (compte tenu que $G, F \succeq 0$ signifie que toutes les composantes de G et de F sont non-négatives) et où $\|\cdot\|_f$ désigne la norme de Frobenius. La factorisation obtenue selon le problème (2.10) est donc de rang maximal p . Ce critère est non convexe par rapport à l'ensemble des inconnues G et F . Les conditions au premier ordre, appelées conditions de KKT sont donc, pour ce problème, uniquement des conditions nécessaires d'un minimum local.

2.3.1 Conditions de KKT pour le problème de NMF

Nous pouvons définir la fonction Lagrangienne associée au problème (2.10) :

$$\mathcal{L}(G, F, \Lambda, \Gamma) = \frac{1}{2} \|X - G \cdot F\|_f^2 - \Lambda \circ G - \Gamma \circ F, \quad (2.11)$$

où Λ et Γ sont les matrices de multiplicateurs de Lagrange de dimensions respectives celles de G et F , qui sont associées respectivement à chacune des contraintes de positivité. Les conditions nécessaires d'un minimum local stipulent que si le couple (G, F) est un minimum local, alors il existe un couple (Λ, Γ) de matrices non-négatives telles que :

$$F \succeq 0, \quad G \succeq 0, \quad (2.12)$$

$$\nabla \mathcal{L}_F = 0, \quad \nabla \mathcal{L}_G = 0, \quad (2.13)$$

$$\Gamma \circ F = 0, \quad \Lambda \circ G = 0. \quad (2.14)$$

En calculant le gradient de la fonction Lagrangienne, nous pouvons réécrire la ligne de l'équation (2.13) sous la forme suivante :

$$G^T \cdot (G \cdot F - X) - \Gamma = 0, \quad (G \cdot F - X) \cdot F^T - \Lambda = 0. \quad (2.15)$$

En utilisant la non-négativité des matrices Γ et Λ , et en remplaçant ces expressions de Γ et Λ issu de (2.15) dans (2.12), nous obtenons les conditions de KKT pour le problème standard de NMF, c.-à-d.,

$$F \succeq 0, \quad G \succeq 0, \quad (2.16)$$

$$G^T \cdot (G \cdot F - X) \succeq 0, \quad (G \cdot F - X) \cdot F^T \succeq 0, \quad (2.17)$$

$$F \circ (G^T \cdot (G \cdot F - X)) = 0, \quad G \circ ((G \cdot F - X) \cdot F^T) = 0. \quad (2.18)$$

Ces conditions traduisent, en outre, que si G et F ne sont pas sur la frontière du domaine des contraintes, alors la solution doit vérifier l'annulation du gradient de la fonction (2.10).

2.3.2 Unicité de la solution NMF

Supposons que nous disposions d'une solution stationnaire (G, F) , et considérons une matrice S inversible de dimensions $p \times p$. Ainsi, toute solution obtenue de type $(\check{G} = G \cdot S, \check{F} = S^{-1} \cdot F)$ est aussi équivalente puisqu'elle produit le même produit $G \cdot F$. Cependant, la question de la stationnarité de ce nouveau point doit être posée. La condition de stationnarité du point (\check{G}, \check{F}) s'exprime ainsi par,

$$S^{-1} \cdot F \succeq 0, \quad G \cdot S \succeq 0, \quad (2.19)$$

$$S^T \cdot G^T \cdot (G \cdot F - X) \succeq 0, \quad (G \cdot F - X) \cdot F^T \cdot (S^{-1})^T \succeq 0, \quad (2.20)$$

$$(S^{-1} \cdot F) \circ (S^T \cdot G^T \cdot (G \cdot F - X)) = 0, \quad (G \cdot S) \circ ((G \cdot F - X) \cdot F^T \cdot (S^{-1})^T) = 0. \quad (2.21)$$

Ces conditions peuvent être facilement vérifiées si S est une matrice de permutation, rendant le nouveau point aussi stationnaire. Mais le point obtenu n'est rien d'autre que la permutation du point original. Dans le cas général, il est difficile d'établir des conditions nécessaires et suffisantes d'unicité de la solution. Nous allons donc examiner des conditions suffisantes d'unicité de la solution dans deux cadres différents, d'abord dans le cas de la factorisation approchée puis dans le cas de la factorisation exacte.

2.3.2.1 Condition suffisante d'unicité pour la NMF approchée

De ce fait, nous nous restreignons au cas particulier où les matrices G et F contiennent une matrice monomiale. La définition de la matrice monomiale est rappelée ici :

Définition 2.3.1. *Une matrice positive S de dimension $(p \times p)$ est dite monomiale si chacune des lignes et colonnes de cette matrice contient un seul élément non nul [115]. On les nomme aussi matrices de permutation généralisées.*

Moussaoui [115] rappelle aussi que toute matrice monomiale se décompose sous la forme d'une permutation et d'une mise à l'échelle, i.e.,

$$S = D \cdot P, \quad (2.22)$$

où D et P désignent respectivement la matrice de mise à l'échelle et la matrice de permutation.

Proposition 2.3.1. *Si on peut extraire de G et F une matrice monomiale de dimension $p \times p$, alors la matrice S est une matrice monomiale.*

La condition de stationnarité peut être réécrite pour chaque bloc de \check{G} et \check{F} en faisant apparaître les matrices monomiales réduites G_p F_p , ce qui donne,

$$G_p \cdot S > 0 \quad S^{-1} \cdot F_p > 0 \quad (2.23)$$

Ho [68] montre alors que seule une matrice S monomiale peut convenir. Si par suite, nous considérons que les solutions de F doivent être de somme à 1, il apparaît alors que la matrice S est une matrice de permutation.

2.3.2.2 Condition d'unicité dans le cadre de la factorisation exacte

Une interprétation géométrique de conditions suffisantes d'unicité peuvent être proposées dans le cadre de la factorisation NMF exacte. Dans ce cas précis, les conditions de stationnarité sont automatiquement vérifiées puisque $X = G \cdot F$.

Pour cela, nous définissons la notion de cône simplicial.

Définition 2.3.2. *Le cône simplicial généré par un nombre fini de vecteurs indépendants*

$$(f_1, f_2, \dots, f_p) \in \mathbb{R}_+^m \text{ est l'ensemble } \mathcal{C}_F = \{ \underline{x} \mid \underline{x} = \sum_{j=1}^p g_j \underline{f}_j, \quad g_j > 0 \}.$$

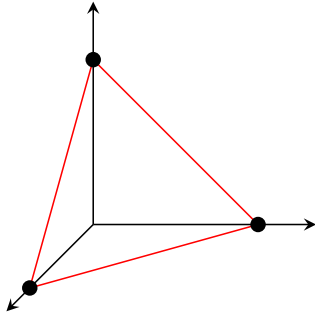
A partir de la factorisation NMF exacte $X = G \cdot F$, il apparaît que, soit une ligne x_j quelconque de X appartient au cône généré par F , c.-à-d. $x_j \in \mathcal{C}_F$.

Soit \mathcal{X} , l'enveloppe convexe de X . Chen [28] formule un théorème d'unicité :

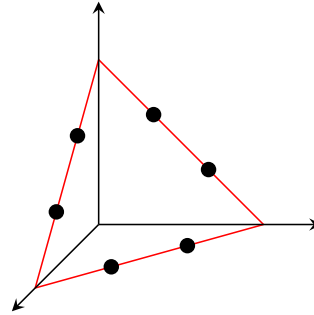
Proposition 2.3.2. *La décomposition de X en un produit $G \cdot F$ est unique si et seulement si $\mathcal{X} \subset \mathcal{C}_F$.*

Ce théorème, ne fournit malheureusement aucun moyen de vérifier cette condition à partir de la matrice de données. Nous examinons en détail les conditions de la proposition (2.3.1) et celles de Donoho et Stodden [50]. Nous nous appuyons sur la figure 2.1, issue de [115], qui en donne une illustration pour $p = 3$.

On définit $I(F) \triangleq \text{Im}(F) \cap \mathbf{R}_+^m$. Les conditions de la proposition (2.3.1) traduisent, pour la condition sur F , que le cône $I(F) = C_F$. Pour la condition sur G , elle exprime que p vecteurs ligne de X constituent les arêtes du cône $I(F)$. Leur représentation est donnée sur la partie gauche de la figure 2.1. De leur côté, Donoho et Stodden [50] expriment des conditions un peu



Proposition 2.3.1



Conditions de Donoho-Stodden [50]

FIGURE 2.1 – Différents cas d'unicité de la factorisation non-négative.

moins restrictives qui permettent de garantir l'unicité de la solution, à savoir que $(p - 1)$ lignes de X doivent se situer sur chacune des p facettes du cône $I(F)$. Au total, $p \cdot (p - 1)$ lignes de X appartenant aux facettes sont suffisantes pour garantir l'unicité de la solution. La partie droite de la figure 2.1 illustre ces conditions. Moussaoui [115] montre que, en définitive, les conditions de Donoho et Stodden sont moins exigeantes.

Toutefois, ces conditions pratiques sont uniquement des conditions suffisantes et restent difficile à utiliser. Le contexte supposé correspond au cadre de la factorisation NMF exacte. Si nous nous plaçons dans le cadre de la factorisation approchée, il faut aussi veiller en supplément à ce que les différentes solutions restent des points stationnaires. En conclusion, la question de l'unicité de la solution reste un problème ouvert. Une manière différente de limiter les solutions multiples est d'apporter des contraintes supplémentaires au problème initial de NMF.

2.4 Algorithmes de résolution du problème classique de NMF

2.4.1 Méthode Multiplicative

Les méthodes multiplicatives peuvent être obtenues de deux manières différentes, soit par une approche heuristique, soit par une approche de type Majoration-Minimisation (MM). Nous les présentons successivement ci-après.

2.4.1.1 L'approche heuristique

Ces méthodes sont abordées dans la littérature [55, 87] comme une manière élégante d'aboutir aux règles de décision. Les méthodes multiplicatives basée sur la norme de Frobenius résolvent le problème (2.10) en le ré-écrivant sous la forme d'une trace de matrice, c.-à-d.

$$\mathcal{J}(G, F) = \text{Tr}\left((X - G \cdot F)^T (X - G \cdot F)\right) \quad (2.24)$$

En développant cette expression, nous pouvons faire apparaître 3 fonctions dans l'expression de $\mathcal{J}(G, F)$, c.-à-d.,

$$\mathcal{J}(G, F) = \text{Tr}(X^T \cdot X) - \text{Tr}(F^T \cdot G^T \cdot X) - \text{Tr}(X^T \cdot G \cdot F) + \text{Tr}(F^T \cdot G^T \cdot G \cdot F), \quad (2.25)$$

$$= \text{Tr}(X^T \cdot X) - 2\text{Tr}(X^T \cdot G \cdot F) + \text{Tr}(F^T \cdot G^T \cdot G \cdot F), \quad (2.26)$$

$$= \mathcal{J}_1 - \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3. \quad (2.27)$$

Le calcul du gradient de chacune de ces trois fonctions est réalisé ici par rapport à une matrice F , tout en remarquant que le calcul de celui par rapport à G est similaire. Ces calculs de différentielles par rapport à une matrice quoique non courants, sont l'extension de résultats de différentielles par rapport à des vecteurs. La plupart des résultats ci-après s'appuient sur des résultats disponibles dans [132]. Puisque la fonction \mathcal{J}_1 est indépendante de F , seules \mathcal{J}_2 et \mathcal{J}_3 sont à dériver. La différentielle de \mathcal{J}_2 nous mène à écrire :

$$\partial \mathcal{J}_2 = 2 \left(\text{Tr}(X^T \partial(GF)) \right) = 2 \left(\text{Tr}(X^T \cdot G \partial F) \right). \quad (2.28)$$

En utilisant la propriété $\partial \mathcal{J}_2 = \text{Tr}\left(\left(\frac{\partial \mathcal{J}_2}{\partial F}\right)^T \partial F\right)$, il est immédiat d'écrire

$$\frac{\partial \mathcal{J}_2}{\partial F} = 2G^T \cdot X. \quad (2.29)$$

La différentielle de \mathcal{J}_3 peut être écrite de la même manière,

$$\partial \mathcal{J}_3 = \partial(\text{Tr}((GF)^T(GF))) = \text{Tr}\left(\partial((GF))^T(GF)\right) + \text{Tr}\left((GF)^T \partial(GF)\right). \quad (2.30)$$

En utilisant la propriété $\text{Tr}(U) = \text{Tr}(U^T)$, les deux termes précédents apparaissent comme identiques,

$$\partial \mathcal{J}_3 = 2\text{Tr}\left((GF)^T \cdot \partial(GF)\right) = 2\text{Tr}\left((GF)^T \cdot G \partial F\right). \quad (2.31)$$

Le gradient de la fonction \mathcal{J}_3 s'écrit donc sous forme condensée

$$\frac{\partial \mathcal{J}_3}{\partial F} = 2G^T \cdot (G \cdot F). \quad (2.32)$$

Grâce aux équations (2.29) et (2.32), la différentiation du critère $\mathcal{J}(G, F)$ se résume à

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial F} = 2G^T \cdot (G \cdot F - X). \quad (2.33)$$

En écrivant le gradient sous la forme

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial F} = \nabla_{F^+} \mathcal{J}(G, F) - \nabla_{F^-} \mathcal{J}(G, F), \quad (2.34)$$

nous pouvons identifier les deux fonctions non-négatives apparaissant dans l'écriture du gradient, $\nabla_{F^+} \mathcal{J}(G, F)$ et $\nabla_{F^-} \mathcal{J}(G, F)$. Parmi les fonctions possibles, il est possible de choisir

$$\nabla_{F^+} \mathcal{J}(G, F) = 2G^T \cdot G \cdot F, \quad \nabla_{F^-} \mathcal{J}(G, F) = 2G^T \cdot X. \quad (2.35)$$

L'approche heuristique consiste à utiliser ces deux fonctions non négatives dans les règles de mise à jour de F , et transposer les résultats pour la mise à jour de G :

$$G \leftarrow G \circ \frac{\nabla_{G^-} \mathcal{J}(G, F)}{\nabla_{G^+} \mathcal{J}(G, F)}, \quad F \leftarrow F \circ \frac{\nabla_{F^-} \mathcal{J}(G, F)}{\nabla_{F^+} \mathcal{J}(G, F)}. \quad (2.36)$$

D'après le choix (2.35), les règles multiplicatives de mise à jour pour la NMF de Frobenius se déclinent en

$$F \leftarrow F \circ \frac{(G^T X)}{(G^T G F)}, \quad G \leftarrow G \circ \frac{(X F^T)}{(G F F^T)}. \quad (2.37)$$

Ces règles assurent automatiquement la non-négativité des éléments des matrices recherchées. Lee et Seung [91] montrent que ces règles conduisent à une décroissance monotone de la fonction objectif de la NMF classique. En dehors des cas particuliers où les facteurs sont nuls, le principe général est de trouver un point fixe limite résultant des fractions dans (2.37) qui tendent vers 1. Ceci permet donc en pratique d'assurer que le gradient (2.33) tend vers 0.

2.4.1.2 L'approche Majoration-Minimisation

Une des méthodes les plus utilisées est la technique de Majoration-Minimisation (MM) [72]. La MM repose sur une approche en deux étapes permettant d'obtenir les règles de mise à jour. Le principe de cette méthode consiste à :

1. rechercher dans un premier temps à majorer la fonction de coût $\mathcal{J}(G, F)$ par une fonction appelée fonction auxiliaire,
2. puis dans un second temps, à effectuer la minimisation de la fonction auxiliaire.

La première simplification vient de la fonction dans (2.10), qui, par essence même, est séparable par rapport aux inconnues. Cela permet ainsi de découper la recherche en sous-problèmes vectoriels indépendants. Du fait de la séparabilité, nous pouvons nous focaliser sur la partie du critère qui concerne une colonne quelconque de la matrice de données. Soit \underline{x} cette colonne.

Définition 2.4.1. Soient $\underline{\theta}$ et $\underline{\theta}^k$, les vecteurs respectivement des inconnus et des inconnus à l'itération k ,⁵. Une fonction $\mathcal{H}(\underline{\theta}, \underline{\theta}^k)$ est une fonction auxiliaire pour $\mathcal{J}(\underline{\theta})$ au point $\underline{\theta}^k$ si et seulement si :

$$\mathcal{H}(\underline{\theta}^k, \underline{\theta}^k) = \mathcal{J}(\underline{\theta}^k) \quad (2.38)$$

$$\mathcal{H}(\underline{\theta}, \underline{\theta}^k) \geq \mathcal{J}(\underline{\theta}) \quad (2.39)$$

En résumé, la fonction auxiliaire est une fonction qui majore la fonction de coût et qui est tangente en $\underline{\theta} = \underline{\theta}^k$. Il est donc possible de minimiser la fonction auxiliaire au lieu de minimiser la fonction de coût selon l'inégalité

$$\begin{array}{ccccc} \mathcal{J}(\underline{\theta}^{k+1}) & \leq & \mathcal{H}(\underline{\theta}^{k+1}, \underline{\theta}^k) & \leq & \mathcal{H}(\underline{\theta}^k, \underline{\theta}^k) = \mathcal{J}(\underline{\theta}^k), \\ (1) & & (2) & & (3) \end{array} \quad (2.40)$$

où l'inégalité (1) provient de la majoration dans (2.38), l'inégalité (2) découle de la minimisation et l'égalité (3) dérive de la propriété de tangence. Tout point $\underline{\theta}^{k+1}$ à l'itération $k + 1$ calculé par $\underline{\theta}^{k+1} = \arg \min_{\underline{\theta} \geq 0} \mathcal{H}(\underline{\theta}, \underline{\theta}^k)$, vérifie la décroissance de la fonction $\mathcal{J}(\underline{\theta})$. Ce principe de décroissance est illustré dans la figure 2.2.

En pratique, la difficulté des algorithmes de Majoration-Minimisation réside donc dans la construction de fonctions auxiliaires plus simples à minimiser. Celles-ci sont donc construites soit, grâce à l'inégalité de Jensen pour le cas de fonctions \mathcal{J} convexes, soit par la recherche d'approximations quadratiques majorantes [72].

Dans la problématique de la NMF classique, nous pouvons reprendre la fonction $\mathcal{J}(G, F)$ réduite à sa formulation vectorielle et la réécrire sous la forme d'un développement de Taylor au second ordre, en considérant que $\underline{\theta}$, la colonne courante de la matrice F , est la seule variable du problème,

$$\mathcal{J}(\underline{\theta}) = \mathcal{J}(\underline{\theta}^k) + \nabla \mathcal{J}(\underline{\theta}^k)(\underline{\theta} - \underline{\theta}^k) + \frac{1}{2}(\underline{\theta} - \underline{\theta}^k)^T G^T \cdot G(\underline{\theta} - \underline{\theta}^k), \quad (2.41)$$

5. Ces vecteurs représentent ici une ligne de G ou une colonne de F .

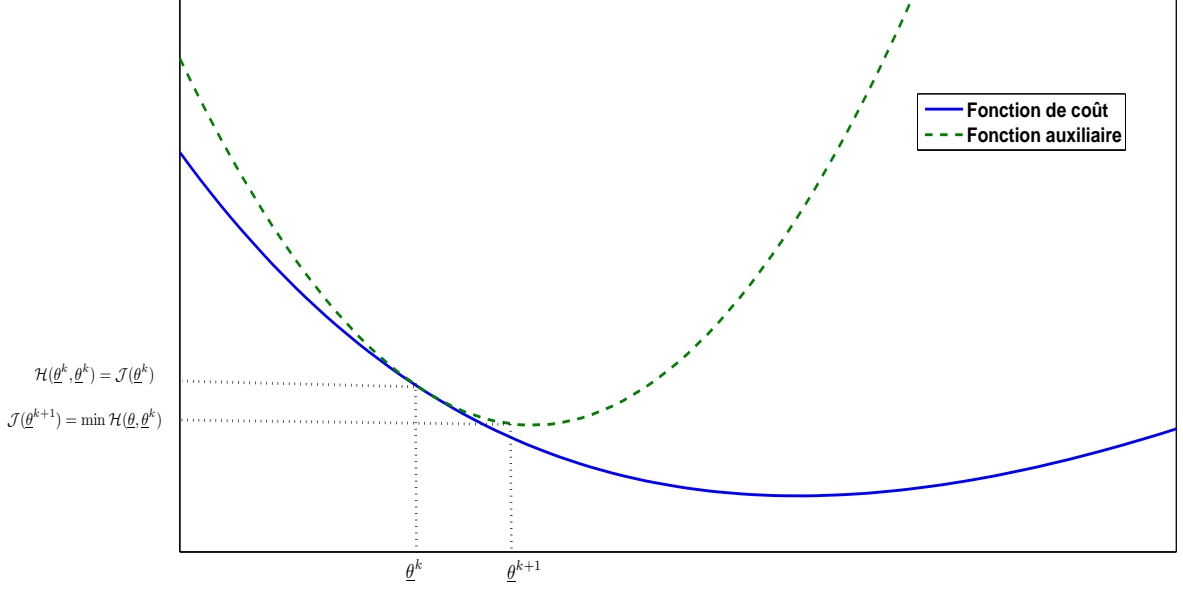


FIGURE 2.2 – Mise à jour dans un algorithme de Majoration-Minimisation.

où $\nabla \mathcal{J}(\underline{\theta}^k) = -G^T(\underline{x} - G\underline{\theta}^k)$. Dans [68], la forme générale quadratique de la fonction auxiliaire $\mathcal{H}(\underline{\theta}, \underline{\theta}^k)$ est donnée en fonction d'une matrice $A(\underline{\theta}^k)$ définie positive,

$$\mathcal{H}(\underline{\theta}, \underline{\theta}^k) = \mathcal{J}(\underline{\theta}^k) + \nabla \mathcal{J}(\underline{\theta}^k)(\underline{\theta} - \underline{\theta}^k) + \frac{1}{2}(\underline{\theta} - \underline{\theta}^k)^T \cdot A(\underline{\theta}^k) \cdot (\underline{\theta} - \underline{\theta}^k), \quad (2.42)$$

où $A(\underline{\theta}^k)$ est choisi tel que la matrice $A(\underline{\theta}^k) - G^T \cdot G$ soit semi-définie positive. De cette manière, la fonction $\mathcal{H}(\underline{\theta}, \underline{\theta}^k)$ est une approximation majorante de $\mathcal{J}(\underline{\theta})$. Lee et Seung [91] proposent de choisir la matrice $A(\underline{\theta}^k)$ sous la forme :

$$A(\underline{\theta}^k) \triangleq \text{diag}\left(\frac{G^T \cdot G \cdot \underline{\theta}^k}{\underline{\theta}^k}\right). \quad (2.43)$$

L'annulation du gradient de $\mathcal{H}(\underline{\theta}, \underline{\theta}^k)$ conduit à une relation exacte du minimiseur $\underline{\theta}^{k+1}$

$$\underline{\theta}^{k+1} = \underline{\theta}^k - A(\underline{\theta}^k)^{-1} \cdot \nabla \mathcal{J}(\underline{\theta}^k) = \underline{\theta}^k + \text{diag}\left(\frac{\underline{\theta}^k}{G^T \cdot G \cdot \underline{\theta}^k}\right) \cdot G^T(\underline{x} - G \cdot \underline{\theta}^k). \quad (2.44)$$

La réécriture de l'équation précédente permet de faire apparaître le produit de Hadamard, c.-à-d.,

$$\underline{\theta}^{k+1} = \underline{\theta}^k + \underline{\theta}^k \circ \frac{G^T(\underline{x} - G \cdot \underline{\theta}^k)}{G^T \cdot G \cdot \underline{\theta}^k}. \quad (2.45)$$

Cette dernière peut être simplifiée en développant le dernier terme, ce qui conduit à :

$$\underline{\theta}^{k+1} = \underline{\theta}^k \circ \frac{G^T x}{G^T \cdot G \cdot \underline{\theta}^k}. \quad (2.46)$$

La formulation matricielle peut être obtenue en rassemblant les colonnes de la matrice F , ce qui donne lieu aux règles multiplicatives de mise à jour pour le problème de NMF de Frobenius :

$$F \leftarrow F \circ \frac{(G^T X)}{(G^T G F)}, \quad G \leftarrow G \circ \frac{(X F^T)}{(G F F^T)}. \quad (2.47)$$

Maintenant que nous disposons des formules de mise à jour, nous pouvons nous intéresser aux caractéristiques de la solution.

2.4.1.3 Convergence des algorithmes multiplicatifs

Lee et Seung [91] ont étudié les propriétés de ces suites matricielles. Ils se sont en particulier intéressés à la question de la stationnarité des points limites.

Ils ont établi que le critère $\mathcal{J}(G, F)$ est non croissant après chaque itéré de G ou de F . Ils montrent aussi que, si la matrice de données ne comprend pas de ligne ni de colonne de zéros, et si tous les coefficients initiaux des matrices G et F sont non nuls, alors, quel que soit l'itération k , les éléments de ces matrices restent tous strictement positifs. Ils montrent enfin que, tant que chaque composante du gradient reste différente de zéro, et que les composantes des facteurs demeurent positives, la décroissance de $\mathcal{J}(G, F)$ est stricte.

Cependant, même si les itérées de F et de G restent positives, il n'est pas du tout sûr que les points limites associés le soient. Par ailleurs, si le point limite est sur la frontière du domaine ($F_{ij} = 0$), alors il n'est pas du tout assuré que la seconde condition de KKT (2.20) soit vérifiée. Ainsi, sur la frontière du domaine, le gradient ne présente pas forcément le signe adéquat. En conséquence, le point limite associé peut ne pas être stationnaire. Rappelons de même que la stationnarité représente seulement une condition nécessaire d'un minimum local. Si le point limite ne contient aucun élément nul, alors on peut affirmer que la solution limite est un point stationnaire sans pour autant pouvoir assurer que cela correspond à un minimum local.

Gonzales et Zhang [60] montrent des exemples où la convergence de la méthode vers un point stationnaire ne semble pas être réalisée au bout d'un certain nombre d'itérations. Même si la convergence ne peut être établie, ils montrent au moins que la méthode multiplicative est très lente à converger vers un point limite.

Par ailleurs, Lin [96] propose de modifier de modifier légèrement le dénominateur afin de préserver la convergence vers un point stationnaire.

2.4.2 Méthodes des gradients projetés

Le principe de la méthode du gradient projeté s'appuie sur les méthodes classiques de gradient. En conséquence, nous proposons d'abord une brève introduction à ces techniques.

2.4.2.1 Introduction aux méthodes de gradient

Les méthodes de gradient constituent la base de résolution de problèmes en traitement du signal et des images dès lors que la fonction à optimiser est différentiable. Elles consistent à partir d'un point courant, à migrer dans la direction de la pente de la diminution du critère. Cette direction de descente peut résulter de choix multiples, le plus courant étant l'opposé du gradient du critère.

Définition 2.4.2. On dit que \underline{d}^k est une direction de descente si, partant d'un point courant $\underline{\theta}^k$, on a la propriété

$$\nabla \mathcal{J}(\underline{\theta}^k)^T \cdot \underline{d}^k < 0. \quad (2.48)$$

Dans ce cas, tout point de la forme

$$\underline{\theta}^{k+1} = \underline{\theta}^k + \alpha^k \underline{d}^k, \quad (2.49)$$

avec $\alpha^k > 0$, fait décroître la fonction $\mathcal{J}(\cdot)$ et constitue l'itérée d'une méthode de type descente de gradient. Les différences entre ces méthodes résident essentiellement dans le choix des directions de descente \underline{d}^k , ainsi que dans le choix du pas α^k . Parmi les directions de descente, la direction $\underline{d}^k = -\nabla \mathcal{J}(\underline{\theta}^k)$ constitue un choix très courant. Ce dernier est développé ci-dessous et correspond à la descente de plus forte pente. Cet algorithme est par contre réputé pour sa lenteur de convergence, on lui préfère souvent des versions de type gradient conjugués.

2.4.2.2 Les méthodes à base de gradients projetés

Dans notre problématique, il s'agit de découper le problème originel en deux sous-problèmes couplés mais résolus indépendamment, c.-à-d.

$$G^{k+1} = \arg \min_{G \succeq 0} \|X - G \cdot F^k\|_f^2, \quad (2.50)$$

$$F^{k+1} = \arg \min_{F \succeq 0} \|X - G^k \cdot F\|_f^2. \quad (2.51)$$

Ces sous-problèmes peuvent être abordés par un algorithme de type gradient non négatif, c.-à-d., un algorithme du gradient dont la solution courante est projetée dans le demi-espace positif.

Par extension de l'expression (2.49) aux matrices, les expressions de mise à jour peuvent être déduites

$$G^{k+1} = [G^k - \eta_G D_G^k]^+, \quad F^{k+1} = [F^k - \eta_F D_F^k]^+, \quad (2.52)$$

où l'opérateur $+$ est défini par $[X]^+ = \max(\epsilon, X)$ tandis que D_G^k et D_F^k désignent respectivement les directions de descente adoptées pour chacune des matrices. Les pas η_G et η_F constituent des matrices en général de forme diagonale contenant les pas dans chacune des directions. Alternativement, il peut être judicieux de préserver la non-négativité de manière explicite en recherchant les pas associés dans les matrices diagonales qui respectent cette condition. Nous proposons, dans cette section, quatre méthodes distinctes respectant l'esprit des méthodes à gradient projetés.

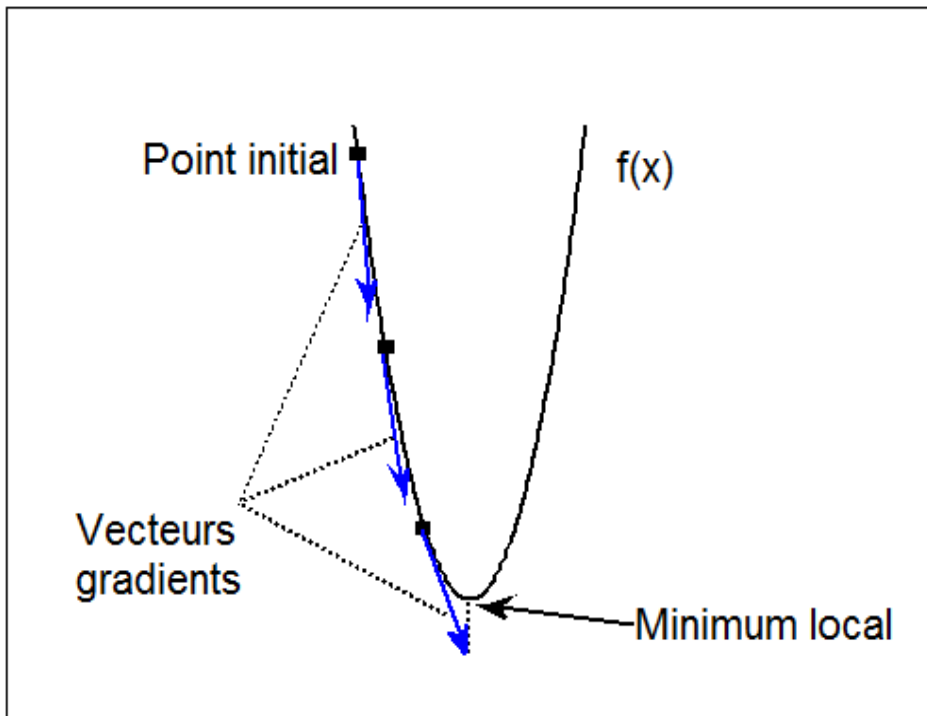


FIGURE 2.3 – Algorithme de descente de gradient.

La projection oblique : Parmi les méthodes usuelles, la méthode de projection oblique de Landweber [112] est une méthode de gradient projetée dans laquelle la direction de descente est l'opposé du gradient. Les mises à jour de F ou G sont similaires, nous ne présenterons que celle concernant la matrice de profil F .

La matrice de pas est choisie diagonale selon $\eta_F \triangleq \text{diag}(\eta_1, \dots, \eta_p)$ et chacun de ces éléments diagonaux η_i respecte la condition de contractance de la matrice qui se traduit par $\eta_i <$

$\frac{2}{\lambda_{\max}(G^T \cdot G)} \quad \forall i \in \{1, \dots, p\}$. Une expression différente de ce seuil peut aussi être proposée [76] en utilisant la propriété de non-négativité de la matrice G ou F . La mise à jour se traduit donc par

$$F^{k+1} = [F^k - \eta_F \nabla_F j(F^k)]^+. \quad (2.53)$$

Gradients projetés de Lin : Une autre méthode populaire est celle des gradients projetés de Lin (PG-Lin) [96] qui suit le schéma itératif général (2.52). Comme dans les méthodes de Landweber, la direction de descente correspond aussi à l'opposé du gradient. Par contre, les matrices de pas sont définies par $\eta_G = \alpha^k I_{n \times n}$ et $\eta_F = \alpha^k I_{p \times p}$, où α^k désigne un pas scalaire commun aux deux mises à jour. Lin développe deux variantes, dont l'une met à jour simultanément les deux facteurs G et F . Lin y introduit une mise à jour de ce pas scalaire qui suit la règle modifiée de Armijo [39, Ch. 5]. Etant donné $\beta \geq 1$, celle-ci propose, à partir du pas de l'itération précédente, d'accroître la valeur du pas $\alpha^k \leftarrow \frac{\alpha^k}{\beta}$ (resp. de la faire décroître selon $\alpha^k \leftarrow \alpha^k \cdot \beta$) tant que la règle de décroissance suffisante de la fonction objectif d'une itération à l'autre est respectée (resp. n'est pas respectée), c.-à-d.,

$$\alpha^k \cdot \text{Tr} \left(\nabla_F \mathcal{J}(G^{k-1}, F^{k-1})^T (F^k - F^{k-1}) + \nabla_G \mathcal{J}(G^{k-1}, F^{k-1})^T (G^k - G^{k-1}) \right) < \mathcal{J}(G^k, F^k) - \mathcal{J}(G^{k-1}, F^{k-1}) \quad (2.54)$$

Par contre, Lin [96] explique que cette procédure directe de mise à jour ne permet pas un gain en coût calculatoire car la fonction \mathcal{J} perd son caractère quadratique dès lors que l'on optimise les deux matrices de manière simultanée.

Méthode des directions potentielles : Une autre méthode consiste à s'appuyer sur les techniques du sous-espace en définissant des directions potentielles dans un sous-espace. Dans le cadre de la NMF, elles s'appliquent directement sur les colonnes de la matrice F ou les lignes de la matrice G séparément. Beaucoup de variantes de méthodes de sous-espace existent, pour un comparatif détaillé dans le cadre des problèmes inverses, on peut se référer aux travaux de Chouzenoux [33]. Nous décrivons uniquement ici le sous-espace orthogonal introduit par Nemirovski [122] et repris dans [39]. Elles intègrent le gradient courant comme une direction potentielle ainsi que les gradients aux itérations précédentes, en même temps que les directions définies par Nemirovsky. En conséquence, elles s'appuient sur :

1. le gradient courant par rapport au vecteur \underline{f}_i en le point \underline{f}_i^k , $\underline{d}_0^k = \nabla_{\underline{f}} \mathcal{J}(\underline{f}_i^k)$,
2. la direction $\underline{d}_1^k = \underline{f}_i^k - \underline{f}_i^0$,

3. et la troisième direction, définie comme une combinaison particulière des gradients :

$$\underline{d}_2^k = \sum_{l=k-L+1}^k w_l \nabla_{\underline{f}} \mathcal{J}(f_i^{l-1}), \quad (2.55)$$

où les coefficients de pondération w_l sont définis par

$$w_l = \begin{cases} 1 & \text{si } l = 1, \\ \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{2} + w_{l-1}^2} & \text{si } l > 1. \end{cases} \quad (2.56)$$

Des variantes de ces méthodes, décrites dans [33], intègrent ces directions potentielles et des directions supplémentaires. Nous nous restreignons ici au cas de 3 directions potentielles. Dans cette méthode, la matrice de direction $D^k \triangleq [d_0^k, d_1^k, d_2^k]$ est de dimension $p \times 3$ et se compose des trois directions ainsi constituées. La recherche du pas vectoriel peut être donnée selon une expression analytique [39, Ch.5] :

$$\underline{\eta}_F^k = ((D^k)^T \cdot G^T \cdot G \cdot D^k + \lambda I_3)^{-1} \cdot (D^k)^T \cdot \nabla_{\underline{f}} \mathcal{J}(f_i^k). \quad (2.57)$$

Le paramètre de régularisation λ est choisi très faible afin de simplement éviter les situations où la matrice D^k ne serait pas de rang plein. La même procédure est appliquée à chaque ligne de la matrice G . En définitive, l'algorithme suit le schéma général (2.52) avec le pas défini dans (2.57).

Méthode des points intérieurs : Une autre classe de méthode est celle des points intérieurs. Celle-ci se rencontre usuellement en optimisation quadratique mais elle est peu utilisée dans le cadre de la NMF. Le principe de ces méthodes est de rechercher un pas qui respecte la positivité des solutions. La méthode que nous présentons ici s'appuie sur celle initialement développée par Merritt et Zhang dans [108] dans le cas vectoriel. Elle est adaptée dans [39] à la problématique de la NMF. L'algorithme est basé sur un gradient pondéré selon la direction :

$$D_F^k = E^k \circ \nabla \mathcal{J}_F(G^k, F^k), \quad (2.58)$$

où la matrice E^k résulte du choix proposé par Lee et Seung [91] :

$$E^k = \frac{F^k}{(G^k)^T \cdot G^k \cdot F^k}. \quad (2.59)$$

Dans sa forme condensée, l'algorithme se présente donc sous la forme suivante, en utilisant les expressions théoriques des gradients,

$$G \leftarrow G^k - \eta_G \frac{G^k}{(G^k F^k \cdot (F^k)^T)} \circ [(X - G^k \cdot F^k) \cdot (F^k)^T], \quad (2.60)$$

$$F \leftarrow F^k - \eta_F \frac{F^k}{(G^k)^T \cdot G^k \cdot F^k} \circ [(G^k)^T \cdot (X - G^k \cdot F^k)]. \quad (2.61)$$

Nous pouvons remarquer que le choix de η_F et η_G égaux à 1 conduisent aux règles multiplicatives données en (2.47). Par ailleurs le choix de ces paramètres est guidé par deux options potentielles. Il s'agit de chercher le pas scalaire η_F qui procure le minimum de la fonction $\mathcal{J}(G^k, F^k + \eta D_F^k)$ ainsi que le pas qui préserve une marge de positivité. Le minimum de ces deux pas permet de trouver la mise à jour adaptée. L'expression exacte du pas peut être trouvée aisément dans [108].

En résumé, nous avons décrit quelques méthodes à base de gradient projetées utilisées en NMF. Même si, bien sûr, notre description ne se veut pas exhaustive, elle donne les éléments importants pour aborder les méthodes à base gradient projetés.

2.4.3 Les méthodes de recherche en Blocs de Coordonnées

Dans les méthodes précédentes, nous ne demandions pas un calcul exact des facteurs à chaque itération. Cela a été réalisé par exemple en majorant la fonction de coût dans le cadre des méthodes multiplicatives ou bien en utilisant des techniques de gradient projetées. Dans cette section, nous proposons de discuter de méthodes qui à chaque étape résolvent exactement le sous-problème. Tout l'enjeu consiste donc en un découpage judicieux du problème de NMF de base en sous-problèmes distincts. Kim *et al.* ont proposé une vision unifiante de ces nouvelles méthodes sous le vocable méthodes de descente exacte en blocs de coordonnées [82]. Cette description a l'avantage de fédérer beaucoup de méthodes de type moindres carrés alternés non-négatifs (ANLS).

Les méthodes de descente exacte en bloc de coordonnées sont des méthodes générales d'optimisation non-linéaires qui s'attaquent au problème de minimisation d'une fonction continûment différentiable sur un espace fermé convexe Ω inclus dans \mathbf{R}^{N_l} ,

$$\min_{\theta \in \Omega} \mathcal{J}(\theta). \quad (2.62)$$

Une hypothèse importante est que l'espace de définition Ω est séparable en $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 \times \dots \times \Omega_L$, où Ω_l est un sous-ensemble fermé convexe de \mathbf{R}^{N_l} pour $l = 1, \dots, L$, satisfaisant

$N_\theta = \sum_{l=1}^L N_l$. Le vecteur $\underline{\theta}$ est partitionné en $\underline{\theta} = (\underline{\theta}_1, \dots, \underline{\theta}_L)$ tel que $\forall l \in \{1, \dots, L\}, \quad \underline{\theta}_l \in \Omega_l$.

La méthode de descente en blocs de coordonnées résout la minimisation pour $\underline{\theta}_l$ en laissant les autres vecteurs fixes de manière cyclique. L'itération $k + 1$ est donc obtenue par

$$\underline{\theta}_l^{k+1} = \arg \min_{\xi \in \Omega_l} \mathcal{J}(\underline{\theta}_1^k, \dots, \underline{\theta}_{l-1}^k, \xi, \underline{\theta}_{l+1}^k, \dots, \underline{\theta}_L^k). \quad (2.63)$$

Soit $\underline{\theta}^{k+1}$ la séquence de vecteurs obtenue en résolvant le problème bloc par bloc. Si chaque sous-problème défini par (2.63) admet une solution unique, alors un point limite de la séquence $\underline{\theta}^k$ est un point stationnaire. Cependant, comme nous l'avons déjà mentionné, la stationnarité n'est pas une garantie d'un minimum global. La plupart des algorithmes ne garantissent que la stationnarité des points limites.

Le point crucial des méthodes réside dans la manière de choisir les partitions, et leur nombre. Trois cas de partition se dégagent dans la littérature : la partition en 2 blocs représentées par les méthodes ANLS, puis la partition en $2 \cdot p$ blocs, et enfin la partition en $p \cdot (m + n)$ blocs. Cette dernière solution ne sera pas développée car elle conduit à la même expression que la solution avec $2 \cdot p$ blocs.

2.4.3.1 Les méthodes ANLS

Ces méthodes correspondent à un partitionnement de l'espace de recherche en deux blocs, conformément à l'équation (2.64). Contrairement à une méthode de gradient, nous recherchons une solution exacte aux deux problèmes de moindres carrés non-négatifs décrits par

$$\begin{aligned} G^{k+1} &= \arg \min_{G \succeq 0} \|X - G \cdot F^k\|_f^2, \\ F^{k+1} &= \arg \min_{F \succeq 0} \|X - G^k \cdot F\|_f^2. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Même si chacun de ces sous-problèmes est convexe, ils ne possèdent pour autant pas de solution analytique et des algorithmes itératifs sont nécessaires. Lin [96] rappelle que si chacun des sous-problèmes de (2.64) possède un minimum, alors tout point limite généré par une méthode ANLS est un point stationnaire du problème classique de NMF.

Ce sous-problème de recherche de F est découpé en m sous-problèmes vectoriels de type moindres carrés non-négatifs (NNLS) dédiés à la recherche d'une colonne de la matrice F (respectivement G) ayant en commun une même matrice d'influence G (respectivement F), dont l'expression est résumée par

$$\min_{f \succeq 0} \|\underline{x} - G \cdot \underline{f}\|_f^2, \quad (2.65)$$

où \underline{x} et \underline{f} désignent respectivement une colonne de la matrice de données et de profil.

Une première classe de méthodes consiste à résoudre ce problème par des techniques approchées de type gradient projetées appliquées à la recherche d'un vecteur colonne. Nous renvoyons le lecteur au paragraphe concernant les méthodes de ce type déjà évoquées dans ce mémoire. Une seconde classe consiste à rechercher les indices des variables non saturées et saturées par la contrainte de positivité. Kim et Park proposent de résoudre le problème de moindres carrés non-négatifs par une approche de type ensemble actifs [81], qui consiste itérativement à séparer les indices du vecteur en 2 ensembles, l'un contenant les indices des composantes nulles, l'autre les indices correspondant aux composantes positives strictement. Cet algorithme a été initialement développé par Lawson et Hanson [89] et implémenté ensuite dans Matlab sous la fonction *lsqnonneg*. L'algorithme est itératif s'appuie sur le principe que, dès lors que l'ensemble des indices des variables saturés est connu, la solution du problème NNLS devient un problème de type moindres carrés non contraint dont la solution analytique est connue. De manière itérative, les différents partitionnements d'indices sont explorés pour aboutir à une solution exacte. Une version rapide appelée FastNNLS a ensuite été développée par Bro et De Jong [23] en calculant une seule fois les matrices produit apparaissant dans les équations normales du problème non contraint et en extrayant les colonnes ou les lignes correspondant aux indices des contraintes non saturées.

2.4.3.2 Les méthodes de partitionnement en $2p$ blocs

Ces méthodes sont aussi appelées méthodes hiérarchiques ALS (HALS) ou RRI pour Rang unité Résidu Itération [68]. Nous proposons de partitionner le problème en $2p$ blocs dans lequel chaque bloc représente une colonne de G ou une ligne de F . Il est pratique de reformuler la fonction objectif sous la forme

$$\mathcal{J}(G_{.,1}, \dots, G_{.,p}, F_{1,.}, \dots, F_{p,.}) = \left\| X - \sum_{l=1}^p G_{.,l} \cdot F_{l,.} \right\|_f^2, \quad (2.66)$$

où les différents paramètres sont des vecteurs lignes ou colonnes définis par $G \triangleq [G_{.,1}^T; \dots; G_{.,p}^T]^T$ et $F \triangleq [F_{1,.}; \dots; F_{p,.}]$. Le problème de la minimisation de la fonction objectif peut être découpé en des sous-problèmes vectoriels de recherche de vecteurs colonne de la matrice G et de la matrice F . Par exemple, la recherche de la L -ième colonne de F est effectuée en considérant le résidu $R(-L) = X - \sum_{l=1 \neq L}^p G_{.,l} \cdot F_{l,.}$. Ce résidu est censé être factorisé de manière approximative sous la forme,

$$R(-L) \approx G_{.,L} \cdot F_{L,.} \quad (2.67)$$

Cette factorisation est recherchée en minimisant le sous-problème générique suivant :

$$\min_{F_{L,\cdot} \geq 0} \|R(-L) - G_{\cdot,L} \cdot F_{L,\cdot}\|_f^2. \quad (2.68)$$

Ce problème peut encore être découpé en m problèmes indépendants quadratiques dépendant d'une seule variable, ici f_{Lk} ,

$$\min_{f_{Lk} \geq 0} \|R_{\cdot,k}(-L) - G_{\cdot,L} \cdot f_{Lk}\|_f^2, \quad \forall k \in \{1, \dots, m\}. \quad (2.69)$$

La solution de ce problème de recherche d'un seul paramètre est donné aisément par l'expression

$$f_{Lk}^* = \max \left(0, \frac{G_{\cdot,L}^T \cdot R_{\cdot,k}(-L)}{G_{\cdot,L}^T \cdot G_{\cdot,L}} \right), \quad \forall k \in \{1, \dots, m\}. \quad (2.70)$$

Cette expression peut être étendue à toute la ligne L de la matrice F , sous la forme

$$F_{L,\cdot}^* = \left[\frac{G_{\cdot,L}^T \cdot R(-L)}{G_{\cdot,L}^T \cdot G_{\cdot,L}} \right]_+, \quad \forall L \in \{1, \dots, p\}. \quad (2.71)$$

Ainsi, la mise à jour d'une ligne de F et d'une colonne de G s'effectue selon l'expression suivante

$$F_{L,\cdot} = \left[\frac{G_{\cdot,L}^T \cdot R(-L)}{G_{\cdot,L}^T \cdot G_{\cdot,L}} \right]_+, \quad G_{\cdot,L} = \left[\frac{R(-L) \cdot F_{L,\cdot}^T}{F_{L,\cdot} \cdot F_{L,\cdot}^T} \right]_+, \quad \forall L \in \{1, \dots, p\}. \quad (2.72)$$

Des implémentations rapides de la méthode ont été proposées afin de diminuer le nombre d'opérations nécessaires par itération. Un des enjeux consiste à choisir l'ordre de mise à jour de ces $2p$ blocs. Deux versions sont actuellement en concurrence

$$G_{\cdot,1} \rightarrow F_{1,\cdot} \rightarrow G_{\cdot,2} \rightarrow F_{2,\cdot} \dots \rightarrow G_{\cdot,p} \rightarrow F_{p,\cdot}, \quad (2.73)$$

$$G_{\cdot,1} \rightarrow G_{\cdot,2} \dots \rightarrow G_{\cdot,p} \rightarrow F_{1,\cdot} \rightarrow F_{2,\cdot} \dots \rightarrow F_{p,\cdot} \quad (2.74)$$

Gillis et Glineur [57] ont proposé une modification de cet ordre de mise à jour en répétant la mise à jour de G plusieurs fois avant de mettre à jour celle de F en fonction du nombre d'opérations nécessaires. Des améliorations notables dans la vitesse de convergence ont ainsi été remarquées.

En conclusion, nous avons donc effectué un descriptif des grandes classes de méthodes pour la résolution du problème de NMF original. Nous avons pu recenser 3 grandes familles que sont les méthodes multiplicatives, les méthodes de gradient projetées et les méthodes de décou-

page en bloc de coordonnées. Ces dernières sont actuellement les plus utilisées mais l'ajout de contraintes dans ces méthodes semble difficile. Nous allons maintenant aborder des critères différents, d'abord sous l'angle de poids dans la fonction objectif de la NMF.

2.5 Introduction de poids dans la NMF

2.5.1 Introduction

Le problème classique de NMF considère les erreurs provenant de toutes les données comme identiques. Or, il arrive fréquemment, que des données de nature hétérogène, issues d'un processus d'acquisition présentent des degrés de confiance différents. Cela provient en particulier soit des conditions dans lesquelles ont été obtenues les mesures, soit de la nature différente des différents capteurs. Par ailleurs, il arrive même que les données soient partiellement manquantes à certains moments. Ainsi, les informations les plus fiables doivent être considérées avec plus d'attention et inversement. Cette fiabilité est souvent codée sous la forme de poids, dans lequel un poids élevé représente un élément fiable. Ainsi, nous pouvons définir l'extension du critère (2.24) en introduisant une matrice de poids W de même taille que la matrice de données :

$$\mathcal{J}(G, F) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m W_{ij} (x_{ij} - (GF)_{ij})^2 = \text{Tr} \left((X - G \cdot F)^T \cdot ((X - G \cdot F) \circ W) \right), \quad (2.75)$$

Bien que l'extension du critère originel est immédiate, la résolution du problème de NMF pondérée est bien plus complexe. Même en relaxant les contraintes de non-négativité, la solution analytique n'existe pas. Il est donc nécessaire de faire appel à des algorithmes itératifs, mais qui ne fournissent que des minimum locaux.

Les travaux dans ce domaine ont été initiés par Guillaumet *et al.* [63]. Parallèlement, des approximations de rang faible ont été proposées par Srebo [159] en omettant les contraintes de non-négativité. Les travaux qui ont vraiment unifié ces méthodes résultent de la thèse de Ho [68] que nous résumons ci-dessous.

2.5.2 Obtention des KKT pour la NMF pondérée

Dans un souci de concision, nous ré-écrivons les produits $G \cdot F$ et $F^T \cdot G^T$ sous la forme GF et $F^T G^T$. Une référence en terme de calcul matriciel [132] est utilisée pour exprimer les différentiations suivantes. La trace d'une matrice peut être utilisée pour exprimer le critère

(2.75),

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(G, F) &= \text{Tr}((X - GF)^T((X - GF) \circ W)), \\ &= \text{Tr}(X^T(X \circ W)) - \text{Tr}(F^T G^T(X \circ W)) - \text{Tr}(X^T(GF \circ W)) + \text{Tr}(F^T G^T((GF) \circ W)).\end{aligned}\tag{2.76}$$

Il est à noter que, premièrement, $\text{Tr}(U) = \text{Tr}(U^T)$ puis, en modifiant la place de W , que la propriété suivante est vérifiée :

$$\text{Tr}(U^T(V \circ W)) = \text{Tr}((U \circ W)^T V).\tag{2.77}$$

Ces propriétés permettent de définir 3 fonctions $(\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3)$ à partir de l'expression de $\mathcal{J}(G, F)$:

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(G, F) &= \text{Tr}(X^T(X \circ W)) - 2 \text{Tr}(F^T \cdot G^T \cdot (X \circ W)) + \text{Tr}(F^T \cdot G^T \cdot ((G \cdot F) \circ W)), \\ &= \mathcal{J}_1 - \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_3.\end{aligned}\tag{2.78}$$

A l'évidence, \mathcal{J}_1 ne dépend pas de la matrice F , si bien que sa différentiation conduit à 0. La différentielle de \mathcal{J}_2 conduit à

$$\partial \mathcal{J}_2 = 2\partial(\text{Tr}((X \circ W)^T \partial(GF))) = 2\partial(\text{Tr}((X \circ W)^T G \partial F)).\tag{2.79}$$

En utilisant la propriété

$$\partial \mathcal{J}_2 = \text{Tr}((\frac{\partial \mathcal{J}_2}{\partial F})^T \partial F),\tag{2.80}$$

il est immédiat de trouver que

$$\frac{\partial \mathcal{J}_2}{\partial F} = 2G^T(X \circ W).\tag{2.81}$$

Avec le même cheminement, on trouve aisément que la dérivée de \mathcal{J}_3 s'écrit :

$$\frac{\partial \mathcal{J}_3}{\partial F} = 2G^T(W \circ GF).\tag{2.82}$$

Grâce aux équations (2.81) et (2.82), la différentielle de \mathcal{J} se résume à

$$\frac{\partial \mathcal{J}}{\partial F} = -2G^T(X \circ W) + 2G^T((GF) \circ W).\tag{2.83}$$

La fonction Lagrangienne associée à l'équation (2.75) s'écrit :

$$\mathcal{L}(G, F) = \frac{1}{2} \text{Tr}((X - GF)^T((X - GF) \circ W)) - \text{Tr}(\Gamma_G \circ G) - \text{Tr}(\Gamma_F \circ F).\tag{2.84}$$

L'annulation de la fonction Lagrangienne donne

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial F} = G^T(((GF) - X) \circ W) - \Gamma_F = 0. \quad (2.85)$$

Les conditions de KKT pour la minimisation de (2.75) se résument à

$$\begin{aligned} F &\succeq 0, & G &\succeq 0, \\ \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial F} &\succeq 0, & \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial G} &\succeq 0, \\ F \circ \Gamma_F &= 0, & G \circ \Gamma_G &= 0. \end{aligned} \quad (2.86)$$

En remplaçant la relation (2.85) dans l'équation (2.86) et en utilisant la même analogie pour G , les conditions de KKT pour le problème pondéré s'expriment

$$\begin{aligned} F &\succeq 0, & G &\succeq 0, \\ G^T \cdot (W \circ (G \cdot F - X)) &\succeq 0, & (W \circ (G \cdot F - X)) \cdot F^T &\succeq 0, \\ F \circ (G^T \cdot (W \circ (G \cdot F - X))) &= 0, & G \circ ((W \circ (G \cdot F - X)) \cdot F^T) &= 0. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Ces conditions représentent l'extension de l'expression (2.19) à une matrice de poids quelconque.

2.5.3 Les algorithmes de NMF pondérés

Dans le cadre des méthodes multiplicatives, Ho [68] propose de découper le problème pondéré initial en sous-problèmes vectoriels indépendants qui concernent une seule colonne de la matrice de données. La démonstration des expressions de mise à jour s'appuie sur la stratégie MM évoquée précédemment. En l'occurrence, il propose une majoration quadratique de la fonction de coût, dont la minimisation conduit à une expression exacte. Cette expression est ensuite concaténée pour l'ensemble des colonnes de la matrice de profil puis, par analogie, étendue à la matrice de contribution. Cette expression peut aussi être obtenue par la méthode heuristique décrite ci-dessus en examinant l'expression du gradient de la fonction de coût (2.83) comme une différence. La formulation itérative de la méthode NMF pondérée (WNMF pour *Weighted NMF* en anglais) s'écrit donc :

$$F \leftarrow F \circ \frac{G^T(W \circ X)}{G^T(W \circ (GF))}, \quad G \leftarrow G \circ \frac{(W \circ X)F^T}{(W \circ (GF))F^T}. \quad (2.88)$$

Pour éviter une division éventuelle par zéro, on ajoute au dénominateur une petite quantité ε dans l'expression (2.88). On obtient ainsi les règles de mise à jour de G et F :

$$F \leftarrow F \circ \frac{G^T(W \circ X)}{G^T(W \circ (GF)) + \varepsilon 1_{p \times m}}, \quad G \leftarrow G \circ \frac{(W \circ X)F^T}{(W \circ (GF))F^T + \varepsilon 1_{n \times p}}. \quad (2.89)$$

Nous pouvons observer que la non-négativité est automatiquement observée dans ces expressions multiplicatives. Par ailleurs, Ho [68] montre que la fonction de coût Euclidienne pondérée est non-croissante pour la mise à jour proposée. Par ailleurs, il établit aussi qu'un point limite est atteint ssi la troisième KKT est vérifiée. Il faut aussi remarquer que le cas $W = 1_{n \times m}$ conduit aux formules de mise à jour (2.37) correspondant au problème de NMF originel. Par ailleurs, les mêmes problèmes de non-stationnarité que dans le cas non pondéré peuvent se rencontrer dans la formulation pondérée. Il convient en particulier d'être prudent lorsque l'on atteint le bord du domaine non-négatif.

De plus, Ho [68] propose une extension des méthodes HALS ou RRI au cas pondéré qu'il nomme WRRI. Au contraire des méthodes à gradient ou multiplicatives, ces méthodes donnent en une itération, le minimum exact du sous-problème pondéré.

En conclusion, nous venons d'introduire un critère pondéré basé sur la norme Euclidienne ou de Frobenius pour la résolution du problème de NMF. Nous avons mis l'accent surtout sur les méthodes multiplicatives bien qu'elles présentent quelques inconvénients. Nous allons maintenant nous concentrer sur l'introduction d'autres mesures d'écart telles que les divergences paramétriques dans les algorithmes NMF.

2.6 Les méthodes NMF à base de la divergence de Kullback-Leibler

Nous évoquons dans cette section des choix différents de mesures d'écart, autres que la norme Euclidienne dans les algorithmes NMF. Nous commençons par évoquer la divergence de Kullback-Leibler (KL).

2.6.1 Propriétés de la divergence de KL

La divergence de KL [86] est généralement utilisée en théorie de l'information et en probabilité. Elle est encore appelée entropie relative et mesure la dissimilarité entre deux distributions de probabilités. Cette mesure de divergence a été généralisée pour évaluer la différence entre deux vecteurs non négatifs p et q . Il faut noter en premier lieu que la divergence n'est pas une

norme contrairement à la norme Euclidienne ou de Frobenius utilisée dans les paragraphes précédents. Elle se définit en général par rapport à deux vecteurs, mais peut l'être par rapport à des distributions :

$$\mathcal{D}^{KL}(p||q) = \sum_i \left(p \circ \log \left(\frac{p}{q} \right) - p + q \right)_i. \quad (2.90)$$

Elle présente certaines des propriétés communes aux normes comme la positivité. Cependant, les propriétés de symétrie et d'inégalité triangulaire ne sont généralement pas vérifiées. Cela se traduit par

$$\begin{cases} \mathcal{D}^{KL}(p || q) \geq 0 & \forall (p, q) \in (\mathbf{R}_+^n \times \mathbf{R}_+^n), \\ \mathcal{D}^{KL}(p || q) = 0 & \Rightarrow p = q, \\ \mathcal{D}^{KL}(p || q) \neq \mathcal{D}^{KL}(q || p). \end{cases} \quad (2.91)$$

La non-symétrie des divergences conduit dans certains cas à considérer sa version symétrique comme la moyenne de la divergence usuelle et de la divergence inversée $\mathcal{D}^{KL}(q || p)$. Comme la définition (2.90) est séparable par rapport aux composantes des vecteurs, la divergence de KL peut être aisément étendue aux matrices, elle apparaît donc aussi comme une mesure de dissimilarité de matrices.

2.6.2 Les méthodes NMF à base de divergence de KL

Les méthodes de NMF se basant sur la divergence de KL ont été initiées par Lee and Seung [90, 91]. Elles reposent sur une démonstration similaire à celle de la NMF originale. On peut noter les éléments communs à la démonstration initiale. La recherche est découpée en vecteurs indépendants, la stratégie est de type MM et la fonction auxiliaire obtenue s'appuie sur la concavité de la fonction logarithme. Nous développons ici uniquement les règles de mise à jour pour la NMF pondérée de type KL. La fonction de coût à minimiser s'exprime comme

$$\mathcal{D}_W^{KL}(X || GF) = \sum_{i,j} [W \circ (X \circ \log \frac{[X]}{[GF]} - X + GF)]_{i,j}. \quad (2.92)$$

La démarche de recherche des règles de mise à jour de NMF pondérée de type KL est identique à celle décrite ci-dessus. On peut rechercher les conditions de KKT pour le problème (2.92).

Nous adoptons la notation \underline{f} , \underline{w} et \underline{x} comme étant les vecteurs colonnes courants respectifs de F, W and X . Le critère peut être scindé en recherche d'une colonne de la matrice F , \underline{f} ,

$$\mathcal{J}(\underline{f}) = \mathcal{D}_w^{KL}(\underline{x} || G\underline{f}) = \sum_i w_i (x_i \log x_i - x_i + \sum_j G_{i,j} f_j - x_i \log \sum_j G_{i,j} f_j). \quad (2.93)$$

En utilisant la concavité de la fonction logarithme et l'inégalité de Jensen, le coût précédent

peut être majoré par la fonction auxiliaire suivante :

$$\mathcal{H}(\underline{f}, \underline{f}^k) = \sum_i w_i [x_i \log x_i - x_i + \sum_j G_{i,j} f_j - x_i \sum_j \frac{G_{i,j} f_j^k}{\sum_l G_{i,l} f_l^k} (\log G_{i,j} f_j - \log \frac{G_{i,j} f_j^k}{\sum_l G_{i,l} f_l^k})]. \quad (2.94)$$

Le théorème de Majoration-Minimization implique que \underline{f}^{k+1} vérifie :

$$\mathcal{J}(\underline{f}^k) \geq \min(\mathcal{H}(\underline{f}, \underline{f}^k)) = \mathcal{H}(\underline{f}^{k+1}, \underline{f}^k) \geq \mathcal{J}(\underline{f}^{k+1}). \quad (2.95)$$

Minimiser $\mathcal{H}(\cdot, \underline{f}^k)$ par rapport à \underline{f} revient à résoudre

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial f_j} = \sum_i w_i G_{i,j} - \frac{f_j^k}{f_j} \sum_i w_i x_i \frac{G_{i,j}}{\sum_l G_{i,l} f_l^k} = 0. \quad (2.96)$$

Le minimum est alors donné par

$$\underline{f}^{k+1} = \frac{\underline{f}^k}{G^T \underline{w}} \circ \left(G^T \frac{(x \circ w)}{(G \underline{f}^k)} \right). \quad (2.97)$$

L'expression (2.97) est vérifiée par chaque vecteur de la matrice F . En regroupant ces vecteurs, on obtient l'expression de mise à jour de F

$$F = \frac{F}{G^T W} \circ \left(G^T \frac{(X \circ W)}{(GF)} \right). \quad (2.98)$$

Par transposition, la règle de mise à jour de la matrice G s'écrit

$$G = \frac{G}{W F^T} \circ \left(\frac{(W \circ X)}{(GF)} F^T \right). \quad (2.99)$$

Au delà de ces règles multiplicatives, Ho [68] propose de comparer les techniques de NMF pondérées de type Frobenius et KL. Il montre que si l'on remplace W par $\frac{W}{GF}$ dans les mises à jour dans l'expression (2.88) (correspondant à une NMF avec une norme de Frobenius), alors on obtient les expressions (2.99) et (2.98) (faisant appel à une divergence de KL). Nous allons maintenant généraliser l'emploi de ces divergences en NMF aux divergences paramétriques.

2.7 La NMF utilisant des divergences paramétriques $\alpha\beta$

La norme Euclidienne et la divergence de KL ne sont en fait que des cas particuliers d'une vaste famille de divergences appelée divergence $\alpha\beta$ [35], dépendant de deux paramètres ré-

glables par l'utilisateur. Dans de nombreuses applications, il est vital d'utiliser les divergences issues de la théorie de l'information [85] plutôt que la norme Euclidienne. De nouvelles divergences alternatives sont apparues dans les algorithmes d'apprentissage automatique avancés, tels que les divergences de Csiszar-Morimoto [37] ou les divergences de Bregman [66]. Ainsi, nous proposons d'introduire la famille de divergences de type $\alpha\beta$ qui unifie de par sa variété des paramètres l'ensemble des divergences citées ci-dessus. Ces travaux d'unification sont issus de l'article de Cichocki [35].

2.7.1 Définition et propriétés des divergences paramétriques $\alpha\beta$

La divergence paramétrique $\alpha\beta$ s'obtient à partir de deux scalaires p et q selon l'expression suivante :

$$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}(p||q) = \frac{-1}{\alpha\beta}(p^\alpha q^\beta - \frac{\alpha}{\alpha+\beta}p^{\alpha+\beta} - \frac{\beta}{\alpha+\beta}q^{\alpha+\beta}), \quad (\alpha, \beta, \alpha + \beta) \neq 0. \quad (2.100)$$

Dans [35], Cichocki *et al.* prouvent la positivité de l'expression (2.100) en démontrant l'inégalité suivante :

$$\frac{1}{\alpha\beta}p^\alpha q^\beta \leq \frac{1}{\beta(\alpha+\beta)}p^{\alpha+\beta} + \frac{1}{\alpha(\alpha+\beta)}q^{\alpha+\beta} \quad (\alpha, \beta, \alpha + \beta) \neq 0. \quad (2.101)$$

Par ailleurs, l'égalité est obtenue uniquement lorsque les deux quantités sont identiques. Ceci permet de vérifier les propriétés générales de la divergence $\alpha\beta$ définies dans (2.91) pour la divergence de KL.

La divergence $\alpha\beta$ a été par la suite généralisée par continuité pour couvrir toutes les valeurs de $(\alpha, \beta) \in \mathbf{R}^2$. Son expression intègre l'expression (2.100) ainsi que quelques cas particuliers du couple (α, β) pour le couple de scalaires (p_{ij}, q_{ij}) :

$$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}(p_{ij}, q_{ij}) = \begin{cases} \frac{-1}{\alpha\beta}(p_{ij}^\alpha q_{ij}^\beta - \frac{\alpha}{\alpha+\beta}p_{ij}^{\alpha+\beta} - \frac{\beta}{\alpha+\beta}q_{ij}^{\alpha+\beta}), & (\alpha, \beta, \alpha + \beta) \neq 0, \\ \frac{1}{\alpha^2}(p_{ij}^\alpha \ln \frac{p_{ij}^\alpha}{q_{ij}^\alpha} - p_{ij}^\alpha + q_{ij}^\alpha), & \alpha \neq 0, \beta = 0, \\ \frac{1}{\alpha^2}(\ln \frac{q_{ij}^\alpha}{p_{ij}^\alpha} + (\frac{q_{ij}^\alpha}{p_{ij}^\alpha})^{-1} - 1), & \alpha = -\beta \neq 0, \\ \frac{1}{\beta^2}(q_{ij}^\beta \ln \frac{q_{ij}^\beta}{p_{ij}^\beta} - q_{ij}^\beta + p_{ij}^\beta), & \alpha = 0, \beta \neq 0, \\ \frac{1}{2}(\ln p_{ij} - \ln q_{ij})^2, & \alpha, \beta = 0. \end{cases} \quad (2.102)$$

La divergence ainsi définie peut aussi s'appliquer aux matrices en utilisant une somme de di-

vergences scalaires, c.-à-d.,

$$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}(P||Q) = \sum_{ij} \mathcal{D}^{\alpha,\beta}(p_{ij}, q_{ij}). \quad (2.103)$$

La divergence $\alpha\beta$ peut donner lieu à deux divergences courantes appelées divergence α et divergence β selon les valeurs du couple (α,β) :

- divergence α : on la rencontre dans le cas particulier où $\alpha + \beta = 1$.
- divergence β : elle correspond au cas particulier où $\alpha = 1$.

2.7.1.1 Cas de la divergence α

La divergence α a été initialement proposée par Chernoff [31] puis reprise en particulier par Amari [3]. L'une des motivations qui a incité la communauté à s'intéresser à cette divergence est la perspective d'obtenir un algorithme de factorisation paramétrable qui tienne compte de la distribution des données et des éventuelles aberrations qui peuvent intervenir.

L'expression générale de la divergence α entre deux matrices P et Q d'éléments respectifs p_{ij} et q_{ij} est la suivante :

$$\mathcal{D}^{\alpha}(P || Q) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha(\alpha-1)} \sum_{ij} (p_{ij}^{\alpha} q_{ij}^{1-\alpha} - \alpha p_{ij} + (\alpha-1)q_{ij}), & \alpha \neq 0, \alpha \neq 1, \\ \sum_{ij} (p_{ij} \ln \frac{p_{ij}}{q_{ij}} - p_{ij} + q_{ij}), & \alpha = 1, \\ \sum_{ij} (q_{ij} \ln \frac{q_{ij}}{p_{ij}} - q_{ij} + p_{ij}), & \alpha = 0. \end{cases} \quad (2.104)$$

Plusieurs divergences connues appartiennent à la famille des divergences α . Nous citerons la divergence de KL pour $\alpha = 1$ ou sa version inversée pour $\alpha = 0$, la divergence de Hellinger pour $\alpha = 0.5$ et la divergence du χ^2 pour $\alpha = 2$ [36].

Les travaux qui ont traité du choix du paramètre α se sont basés sur une comparaison entre deux distributions de probabilité p et q considérés comme des vecteurs [111, 35]. Ces travaux ont mis en évidence qu'un choix du paramètre $\alpha \ll 0$ (respectivement $\alpha \gg 0$) force l'estimation q à être inférieure ou égale à p (respectivement supérieure ou égale à p).

La figure 2.4, issue de [111], illustre une approximation de loi statistique d'un mélange p de deux distributions gaussiennes par une distribution q en utilisant une divergence α . Dans cet exemple, la gaussienne étroite peut être considérée comme une aberration qui vient corrompre l'ensemble des données. Pour les valeurs fortement négatives de α , l'estimation q néglige complètement les aberrations et colle parfaitement à la gaussienne qui constitue la plus grande partie des données. Un tel choix de paramètre renforce ainsi la robustesse de l'algorithme aux points aberrants au risque d'écarter certaines données. Pour les valeurs fortes de α , q tend à coller à

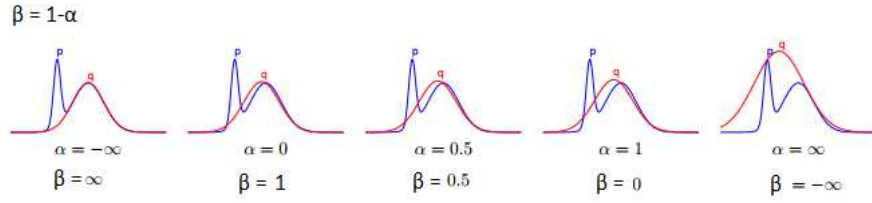


FIGURE 2.4 – Approximation d’un mélange p de deux gaussiennes par une gaussienne q [111].

l’ensemble des deux gaussiennes tout en englobant la distribution p . Ce réglage des paramètres conduit à une estimation très sensible aux points aberrants. Ces propriétés sont traduites par les propriétés d’exclusivité et d’inclusivité ainsi que de forçage de zéro et d’évitement de zéros [111].

2.7.1.2 Propriétés des divergences $\alpha\beta$

Dans ce paragraphe, nous généralisons les propriétés à la divergence $\alpha\beta$ et nous nous intéressons aux aspects de robustesse de la divergence évoqués dans [35].

Une propriété importante est la propriété d’échelle des divergences. Soit λ , un paramètre positif jouant le rôle de facteur d’échelle. Alors :

$$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}(\lambda X \parallel \lambda \hat{X}) = \lambda^{\alpha+\beta} \mathcal{D}^{\alpha,\beta}(X \parallel \hat{X}). \quad (2.105)$$

Le tableau 2.1 résume les différentes valeurs de divergences en fonction de $\alpha + \beta$ et λ . Un algorithme chargé de minimiser la divergence corrigera davantage les fortes valeurs de divergence. Par conséquent, les estimations approximeront mieux les fortes valeurs des données lorsque $\alpha + \beta > 0$ (pour λ plus grand que 1) et inversement lorsque $\alpha + \beta < 0$, les estimations approximeront davantage les faibles valeurs des données correspondant à $\lambda \ll 1$.

Tableau 2.1 – Propriété d’échelle de la divergence $\alpha\beta$.

λ	$\alpha + \beta > 0$	$\alpha + \beta < 0$
$\lambda \gg 1$	$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}$ fort	$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}$ faible
$\lambda \ll 1$	$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}$ faible	$\mathcal{D}^{\alpha,\beta}$ fort

Cichocki [35] propose d’examiner la robustesse de la divergence $\alpha\beta$ en s’intéressant à la dérivée de la divergence par rapport à un paramètre θ . A la convergence, la dérivée de la diver-

gence suivante est minimale [35] :

$$\frac{\partial \mathcal{D}^{\alpha, \beta}(X \| \hat{X})}{\partial \theta} = - \sum_{i,j} \frac{\partial \hat{X}_{i,j}}{\partial \theta} (\hat{X}_{i,j})^{\alpha+\beta-1} \ln_{1-\alpha}\left(\frac{X_{i,j}}{\hat{X}_{i,j}}\right), \quad (2.106)$$

où \hat{X} désigne l'estimation de la matrice X , θ représente un paramètre quelconque et

$$\ln_{1-\alpha}(z) = \begin{cases} \frac{z^\alpha - 1}{\alpha}, & \text{si } \alpha \neq 0, \\ \ln(z), & \text{si } \alpha = 0. \end{cases} \quad (2.107)$$

L'expression de la sensibilité (2.106) dépend de deux entités appelées pondération et Alpha-zoom, définies par les termes suivants :

- pondération : $\hat{X}_{i,j}^{\alpha+\beta-1}$,
- Alpha-zoom : $\ln_{1-\alpha}\left(\frac{X_{i,j}}{\hat{X}_{i,j}}\right)$.

Tableau 2.2 – Propriétés de l'Alpha-zoom.

α	$0 < \frac{X_{ij}}{\hat{X}_{ij}} < 1$	$\frac{X_{ij}}{\hat{X}_{ij}} > 1$
$\alpha > 1$	Zoom faible	Zoom fort
$\alpha < 1$	Zoom fort	Zoom faible

Le tableau 2.2 explique l'intensité du zoom fort ou faible, selon les valeurs de α et selon le type d'estimation recherchée. Là où le zoom est fort, l'algorithme modifie les estimées afin de les rendre proche de la donnée. Au contraire, quand le zoom est faible, l'algorithme tolère une dissimilarité entre l'estimée et la donnée. Ainsi dans le cas $\alpha < 1$ (réciproquement $\alpha > 1$), l'algorithme accepte de rencontrer des données telles que $\frac{X_{ij}}{\hat{X}_{ij}} > 1$ (réciproquement $\frac{X_{ij}}{\hat{X}_{ij}} < 1$) sans modifier la valeur de $\hat{X}_{i,j}$.

Le second facteur qui intervient dans l'expression de la divergence est la pondération $\hat{X}_{i,j}^{\alpha+\beta-1}$. Son action est résumée dans le tableau 2.3 en fonction des valeurs de $\alpha + \beta$. L'algorithme laisse inchangées les estimées de poids faible et a tendance à modifier les estimées de poids les plus forts. L'algorithme se préoccupe donc des données correspondant aux poids les plus forts.

En bref, ces deux effets se conjuguent et la figure 2.5 représente les différentes zones d'intérêt en fonction de α et β .

- Zone 1 ($\alpha + \beta < 1$ et $\alpha < 1$) : l'algorithme tolère les aberrations de type $X_{i,j} > \hat{X}_{i,j}$ pour les grandes amplitudes de $X_{i,j}$. L'estimation colle assez bien aux faibles amplitudes qui sont assez influentes.
- Zone 2 ($\alpha + \beta > 1$ et $\alpha < 1$) : l'algorithme tolère les aberrations de type $X_{i,j} > \hat{X}_{i,j}$ pour

Tableau 2.3 – Effet de la pondération sur la divergence $\alpha\beta$.

$\alpha + \beta$	$0 < \hat{X}_{ij} < 1$	$\hat{X}_{ij} > 1$
$\alpha + \beta < 1$	Poids fort	Poids faible
$\alpha + \beta > 1$	Poids faible	Poids fort

les petites amplitudes de \hat{X}_{ij} . L'estimation colle davantage aux grandes amplitudes qui sont plus influentes.

- Zone 3 ($\alpha + \beta < 1$ et $\alpha > 1$) : L'algorithme tolère les aberrations de type $X_{ij} < \hat{X}_{ij}$ pour les grandes amplitudes \hat{X}_{ij} . L'estimation colle davantage aux faibles amplitudes qui sont assez influentes.
- Zone 4 ($\alpha + \beta > 1$ et $\alpha > 1$) : L'algorithme tolère les aberrations de type $X_{ij} < \hat{X}_{ij}$ en ce qui concerne les petites amplitudes de X_{ij} . L'estimation colle davantage aux fortes amplitudes qui sont assez influentes.

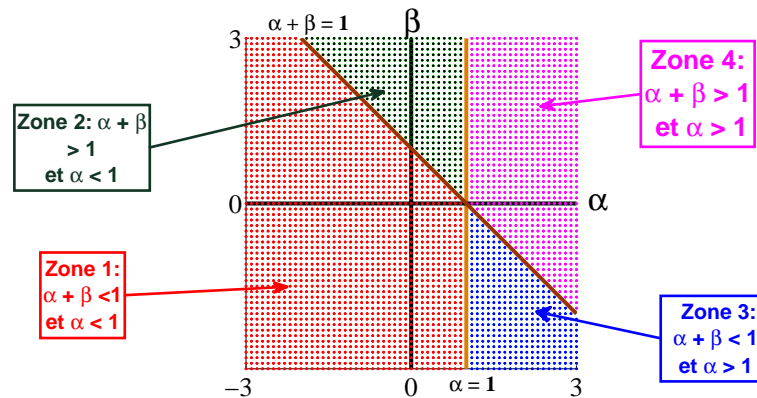


FIGURE 2.5 – Les différentes zones d'étude en fonction de α et β .

2.7.1.3 Récapitulatif des recommandations

Nous avons pensé en tant que synthèse du paragraphe précédent que :

- La priorité de l'utilisateur en quête de séparation est de privilégier une adéquation aux données fortes (privilégier des poids forts sur des données de grandes valeurs) plutôt qu'une adéquation aux données faibles, ce qui sous-entend que nous nous plaçons, au vue du tableau 2.3, dans le cas de pondération pour lequel $\alpha + \beta > 1$.
- Nous avons choisi de nous placer dans les conditions $\alpha < 1$ car nous préférons privilégier des situations où $X_{ij} > \hat{X}_{ij}$. En effet, une estimation qui dépasse les données serait pour les experts physiquement peu réaliste, alors que, dans le cas contraire, un reste positif

serait bien compréhensible.

Ainsi, la zone graphique qui définit ce jeu de paramètres est la zone 2. Ceci nous guide dans les tests pour choisir des jeux de paramètres conformes à l'analyse des experts.

2.7.2 Les NMF à base de divergence $\alpha\beta$

Nous distinguons les cas séparés de NMF à base de divergence α , de divergence β , puis de divergence $\alpha\beta$.

2.7.2.1 La NMF à base de divergence α

L'obtention d'une estimation des matrices G et F passe par la minimisation de la mesure de divergence α entre X et $G \cdot F$

$$\mathcal{D}^\alpha(X \parallel GF) = \frac{1}{\alpha(\alpha-1)} \sum_{ij} (X_{ij}^\alpha [GF]_{ij}^{1-\alpha} - \alpha X_{ij} + (\alpha-1)[GF]_{ij}) \quad \alpha \neq 0, \alpha \neq 1. \quad (2.108)$$

La démonstration de la recherche des formules de mise à jour de F et de G a été présentée par Cichoki [36]. Elle est basée sur l'utilisation de la notion de fonction auxiliaire. La divergence α s'exprime en fonction de la fonction $h(\cdot)$

$$\mathcal{D}^\alpha(X \parallel GF) = \sum_{ij} X_{ij} h\left(\frac{\sum_k G_{ik} F_{kj}}{X_{ij}}\right), \quad (2.109)$$

où $h(\cdot)$ est une fonction convexe pour $z \in \mathbf{R}^+$ et $\alpha > 0$ définie par :

$$h(z) = \frac{1}{\alpha(1-\alpha)} (\alpha + (1-\alpha)z - z^{1-\alpha}). \quad (2.110)$$

Une fonction auxiliaire à $\mathcal{D}^\alpha(X \parallel GF)$ est la fonction $\mathcal{H}(F, \check{F})$ définie par :

$$\mathcal{H}(F \parallel \check{F}) = \frac{1}{\alpha(\alpha-1)} \sum_{ijk} X_{ij} \zeta_{ijk} \left\{ \alpha + (1-\alpha) \frac{G_{ik} F_{kj}}{X_{ij} \zeta_{ijk}} - \left(\frac{G_{ik} F_{kj}}{X_{ij} \zeta_{ijk}} \right)^{1-\alpha} \right\}, \quad (2.111)$$

où \check{F} est la matrice de profils à l'itération courante et $\zeta_{ijk} = \frac{G_{ik} \check{F}_{kj}}{\sum_l G_{il} \check{F}_{lj}}$.

Pour être une fonction auxiliaire la fonction \mathcal{H} doit vérifier deux conditions :

$$\begin{cases} \mathcal{H}(F \parallel F) &= \mathcal{D}^\alpha(X \parallel GF), \\ \mathcal{H}(F \parallel \check{F}) &\geq \mathcal{D}^\alpha(X \parallel GF). \end{cases} \quad (2.112)$$

La première condition est facile à vérifier et la deuxième s'obtient grâce à la convexité de la fonction $h(\cdot)$ qui permet d'appliquer l'inégalité de Jensen :

$$h\left(\frac{\sum_k G_{ik}F_{kj}}{X_{ij}}\right) \leq \sum_k \zeta_{ijk} h\left(\frac{G_{ik}F_{kj}}{X_{ij}\zeta_{ijk}}\right), \quad (2.113)$$

et la divergence est majorée par

$$\mathcal{D}^\alpha(X \parallel GF) = \sum_{ij} X_{ij} h\left(\frac{\sum_k G_{ik}F_{kj}}{X_{ij}}\right) \leq \sum_{ijk} X_{ij}\zeta_{ijk} h\left(\frac{G_{ik}F_{kj}}{X_{ij}\zeta_{ijk}}\right) = \mathcal{H}(F \parallel \check{F}). \quad (2.114)$$

L'étape suivante consiste à retrouver le minimum de cette fonction auxiliaire en annulant son gradient :

$$\frac{\partial \mathcal{H}(F, \check{F})}{\partial F_{ij}} = \frac{1}{\alpha} \sum_k G_{ki} \left\{ 1 - \left(\frac{G_{ki}F_{ij}}{X_{kj}\zeta_{kji}} \right)^{-\alpha} \right\}. \quad (2.115)$$

On en conclut que

$$\left(\frac{F_{ij}}{\check{F}_{ij}} \right)^\alpha = \left[\frac{\sum_k G_{ki} \left(\frac{X_{kj}}{\sum_l G_{kl}\check{F}_{lj}} \right)^\alpha}{\sum_k G_{ki}} \right]. \quad (2.116)$$

L'expression de la règle de mise à jour du profil F est la suivante :

$$F_{ij} \leftarrow F_{ij} \left[\frac{\sum_k G_{ki} \left(\frac{X_{kj}}{[GF]_{kj}} \right)^\alpha}{\sum_l G_{li}} \right]^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (2.117)$$

La même démarche peut être effectuée en inversant G et F pour obtenir l'expression de la matrice de contribution G . D'une façon plus compacte, l'écriture matricielle des expressions de mise à jour de G et F est la suivante :

$$F = F \circ \left[\frac{G^T (\frac{X}{GF})^\alpha}{G^T} \right]^{\frac{1}{\alpha}}, \quad G = G \circ \left[\frac{(\frac{X}{GF})^\alpha F^T}{F^T} \right]^{\frac{1}{\alpha}} \quad \forall \alpha \neq 0. \quad (2.118)$$

Cichoki [36] montre que les mêmes expressions de mise à jour (2.118) peuvent être obtenues à partir de la méthode des gradients projetés sur les dérivées partielles de (2.108) ou à partir de

la vérification des conditions de KKT dont le détail est donné ci-dessous :

$$\begin{aligned}
 F &\succeq 0, & G &\succeq 0, \\
 \frac{1}{\alpha}G^T(1 - \frac{X^\alpha}{(GF)^\alpha}) &\succeq 0, & \frac{1}{\alpha}(1 - \frac{X^\alpha}{(GF)^\alpha})F^T &\succeq 0, \\
 F \circ (\frac{1}{\alpha}G^T(1 - \frac{X^\alpha}{(GF)^\alpha})) &= 0, & G \circ (\frac{1}{\alpha}(1 - \frac{X^\alpha}{(GF)^\alpha})F^T) &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.119}$$

L'extension à la NMF pondérée à base de divergence α (α -WNMF pour α -*Weighted NMF* en anglais) est immédiate en minimisant la divergence α pondérée, pour $\alpha \neq 0$ et $\alpha \neq 1$ par rapport au produit matriciel GF :

$$\mathcal{D}_W^\alpha(X \parallel GF) = \frac{1}{\alpha(\alpha-1)} \sum_{ij} W_{ij} [X^\alpha \circ [GF]^{1-\alpha} - \alpha X + (\alpha-1)GF]_{ij}, \tag{2.120}$$

où W la matrice de pondération ici définie par $W_{ij} = \frac{1}{\sigma_{ij}}$ (pour des raisons d'homogénéité dans la divergence), et σ_{ij} l'incertitude associée à l'élément x_{ij} de la matrice de donnée X .

Les expressions de mise à jour dans ce cas sont les suivantes :

$$F = F \circ \left[\frac{G^T(W \circ (\frac{X}{GF})^\alpha)}{G^T W} \right]^{\frac{1}{\alpha}}, \quad G = G \circ \left[\frac{(W \circ (\frac{X}{GF})^\alpha) F^T}{W F^T} \right]^{\frac{1}{\alpha}} \quad \forall \alpha \neq 0. \tag{2.121}$$

Cette mise à jour représente une généralisation des expressions (2.118) au cas d'une pondération quelconque. Nous allons maintenant étendre ces expressions au cas de divergences β et $\alpha\beta$.

2.7.2.2 NMF à base de divergence β

La divergence β a été introduite par Basu [9] et a été par la suite étudiée par un grand nombre de chercheurs [35, 34, 52, 113]. L'étude de cette divergence a été motivée par la recherche d'algorithmes robustes d'apprentissage, de classification et de séparation de sources. On la retrouve dans des algorithmes tel que l'ACP robuste [114], l'ACI robuste [110] et en NMF [38].

L'expression générale de la divergence β entre deux matrices P et Q d'éléments respectifs p_{ij} et q_{ij} est la suivante :

$$\mathcal{D}^\beta(P \parallel Q) = \begin{cases} -\frac{1}{\beta} \sum_{ij} (p_{ij} q_{ij}^\beta - \frac{1}{1+\beta} p_{ij}^{1+\beta} - \frac{\beta}{1+\beta} q_{ij}^{1+\beta}), & \beta \neq 0, \beta \neq -1, \\ \sum_{ij} (p_{ij} \ln \frac{p_{ij}}{q_{ij}} - p_{ij} + q_{ij}), & \beta = 0, \\ \sum_{ij} (q_{ij} \ln \frac{q_{ij}}{p_{ij}} + (\frac{q_{ij}}{p_{ij}})^{-1} - 1), & \beta = -1. \end{cases} \tag{2.122}$$

Nous adoptons la définition de Cichoki dans ce travail [35]. Cette écriture peut être ramenée à la définition adoptée par Févotte [55] en remplaçant β dans (2.122) par $\beta' - 1$.

Des cas particuliers de la divergence β sont la divergence de KL pour $\beta = 0$ et la norme de

Frobenius pour $\beta = 1$. Remarquons que cette fonction est convexe pour $\beta \in [0; 1]$ si $p_{ij} \in \mathbf{R}^+$ et $q_{ij} \in \mathbf{R}^+$.

Dans le contexte de la NMF, Cichocki [35] montre que le paramètre β contrôle la robustesse aux points aberrants. La valeur de β reflète un compromis entre robustesse aux aberrations et qualité d'estimation des données.

De la même façon que pour la NMF avec divergence α , Févotte dans [55] se base sur la convexité de la divergence β sur l'intervalle $[0, 1]$ et utilise la MM pour retrouver les formules de mise à jour de G et F selon des règles multiplicatives :

$$F = F \circ \frac{G^T (X \circ (GF)^{\beta-1})}{G^T (GF)^\beta}, \quad G = G \circ \frac{(X \circ (GF)^{\beta-1}) F^T}{(GF)^\beta F^T}. \quad (2.123)$$

L'extension à la factorisation matricielle non-négative pondérée est assurée en introduisant la matrice de pondération W . La fonction de coût à minimiser dans ce cas est la suivante :

$$\mathcal{D}_W^\beta(X \| GF) \triangleq -\frac{1}{\beta} \sum_{ij} W_{ij} \left[X \circ [GF]^\beta - \frac{1}{1+\beta} X^{1+\beta} - \frac{\beta}{1+\beta} [GF]^{1+\beta} \right]_{ij}. \quad (2.124)$$

Les solutions obtenues s'inspirent des travaux de [68] et suivent la stratégie MM. La démonstration est assez immédiate et aboutit à

$$F = F \circ \frac{G^T (W \circ X \circ (GF)^{\beta-1})}{G^T (W \circ (GF)^\beta)}, \quad (2.125)$$

$$G = G \circ \frac{(W \circ X \circ (GF)^{\beta-1}) F^T}{(W \circ (GF)^\beta) F^T}.$$

De plus, un point limite (G, F) est stationnaire s'il vérifie les condition de KKT [55] :

$$\begin{aligned} F &\succeq 0, & G &\succeq 0, \\ G^T [W \circ (GF)^{\beta-1} \circ (GF - X)] &\succeq 0, & [W \circ (GF)^{\beta-1} \circ (GF - X)] F^T &\succeq 0, \\ F \circ (G^T [W \circ (GF)^{\beta-1} \circ (GF - X)]) &= 0, & G \circ ([W \circ (GF)^{\beta-1} \circ (GF - X)] F^T) &= 0. \end{aligned} \quad (2.126)$$

On note que pour $W = 1_{n \times m}$ on retrouve les expressions de la β -NMF non-pondérée ainsi que les conditions de KKT.

2.7.2.3 NMF basée sur la divergence $\alpha\beta$

A notre connaissance, seul Cichocki [35] a proposé une étude générale de NMF basée sur la divergence $\alpha\beta$. Le gradient de la divergence $\alpha\beta$ (2.100) peut être exprimé d'une façon compacte à partir de l'expression (2.106) et à l'aide de la fonction $\ln_{1-\alpha}(z)$ défini par [35] et rappelée dans

(2.107). Le gradient de la fonction de coût s'exprime alors respectivement par rapport à F et G :

$$\frac{\partial \mathcal{D}^{\alpha, \beta}}{\partial F_{kj}} = - \sum_i G_{ik} [GF]_{ij}^{\alpha + \beta - 1} \ln_{1-\alpha} \left(\frac{X_{ij}}{[GF]_{ij}} \right) \quad (2.127)$$

et

$$\frac{\partial \mathcal{D}^{\alpha, \beta}}{\partial G_{kj}} = - \sum_i F_{kj} [GF]_{ij}^{\alpha + \beta - 1} \ln_{1-\alpha} \left(\frac{X_{ij}}{[GF]_{ij}} \right). \quad (2.128)$$

Une descente de gradient permet d'écrire les expressions des formules de mises à jour des éléments de F et G :

$$\begin{aligned} F_{kj} &\leftarrow \phi^{-1} \left(\phi(F_{kj}) - \eta_{kj} \frac{\partial \mathcal{D}^{\alpha, \beta}}{\partial \phi(F_{kj})} \right), \\ G_{ik} &\leftarrow \phi^{-1} \left(\phi(G_{ik}) - \eta_{ik} \frac{\partial \mathcal{D}^{\alpha, \beta}}{\partial \phi(G_{ik})} \right). \end{aligned} \quad (2.129)$$

Avec $\phi(z) = \ln_{1-\alpha}(z)$ défini par (2.107) et sa transformée inverse définie par :

$$\phi^{-1}(z) \triangleq \exp_{1-\alpha}(z) = \begin{cases} \exp(z), & \alpha = 0, \\ (1 + \alpha z)^{\frac{1}{\alpha}}, & \alpha \neq 0, \quad 1 + \alpha z \geq 0, \\ 0, & \alpha \neq 0, \quad 1 + \alpha z < 0. \end{cases} \quad (2.130)$$

Pour des valeurs de $z > 0$ la fonction $\phi(z)$ est bijective et vérifie $\phi^{-1}(\phi(z)) = z$.

Cichoki [35] donne l'expression appropriée du pas de descente de gradient pour obtenir une expression générale des règles de mise à jour multiplicative de G et F :

$$\eta_{kj} = \frac{F_{kj}^{2\alpha-1}}{\sum_i G_{ik} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}} \quad , \quad \eta_{ik} = \frac{G_{ik}^{2\alpha-1}}{\sum_j F_{kj} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}}. \quad (2.131)$$

Les expressions de mise à jour obtenues sont les suivantes :

$$\begin{aligned} F_{kj} &\leftarrow F_{kj} \exp_{1-\alpha} \left(\sum_i \frac{G_{ik} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}}{\sum_i G_{ik} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}} \ln_{1-\alpha} \left(\frac{X_{ij}}{[GF]_{ij}} \right) \right), \\ G_{ik} &\leftarrow G_{ik} \exp_{1-\alpha} \left(\sum_j \frac{F_{kj} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}}{\sum_j F_{kj} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}} \ln_{1-\alpha} \left(\frac{X_{ij}}{[GF]_{ij}} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.132)$$

Dans le cas où $\alpha \neq 0$, il est possible d'écrire ces formules d'une façon plus compacte :

$$F_{kj} \leftarrow F_{kj} \left(\frac{\sum_i G_{ik} X_{ij}^\alpha [GF]_{ij}^{\beta-1}}{\sum_i G_{ik} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}} \right)^{\frac{1}{\alpha}} \quad (2.133)$$

et

$$G_{ik} \leftarrow G_{ik} \left(\frac{\sum_j F_{kj} X_{ij}^\alpha [GF]_{ij}^{\beta-1}}{\sum_j F_{kj} [GF]_{ij}^{\alpha+\beta-1}} \right)^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (2.134)$$

Nous parvenons ainsi à l'écriture matricielle des expressions de mise à jour de G et $F \forall \alpha \neq 0$:

$$F \leftarrow F \circ \left(\frac{G^T (X^\alpha \circ [GF]^{\beta-1})}{G^T [GF]^{\alpha+\beta-1}} \right)^{\frac{1}{\alpha}}, \quad (2.135)$$

$$G \leftarrow G \circ \left(\frac{(X^\alpha \circ [GF]^{\beta-1}) F^T}{[GF]^{\alpha+\beta-1} F^T} \right)^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (2.136)$$

Nous pouvons étendre ces expressions au contexte pondéré de la même façon que dans la α -NMF ou la β -NMF. La fonction de coût à minimiser dans le cas d'une divergence $\alpha\beta$ pour une factorisation pondérée est la suivante pour $(\alpha, \beta, \alpha + \beta) \neq 0$:

$$\mathcal{D}_W^{\alpha\beta}(X \parallel GF) \triangleq -\frac{1}{\alpha\beta} \sum_{ij} W_{ij} \left[X^\alpha \circ [GF]^\beta - \frac{\alpha}{\alpha+\beta} X^{\alpha+\beta} - \frac{\beta}{\alpha+\beta} [GF]^{\alpha+\beta} \right]_{ij}. \quad (2.137)$$

Les conditions de KKT s'expriment sous la forme suivante, en étendant les dérivations au cadre pondéré pour $\alpha \neq 0$:

$$\begin{aligned} F \succeq 0, & & G \succeq 0, \\ \frac{1}{\alpha} G^T [W \circ (GF)^{\beta-1} \circ ((GF)^\alpha - X^\alpha)] \succeq 0, & & \frac{1}{\alpha} [W \circ (GF)^{\beta-1} \circ ((GF)^\alpha - X^\alpha)] F^T \succeq 0, \\ F \circ (G^T [W \circ (GF)^{\beta-1} \circ ((GF)^\alpha - X^\alpha)]) = 0, & & G \circ ([W \circ (GF)^{\beta-1} \circ ((GF)^\alpha - X^\alpha)] F^T) = 0. \end{aligned} \quad (2.138)$$

La méthode heuristique permet aussi de trouver les mises à jour dans le cadre d'une NMF à base de divergence $\alpha\beta$ pondérée :

$$F \leftarrow F \circ \left[\frac{G^T (W \circ X^\alpha \circ (GF)^{\beta-1})}{G^T (W \circ (GF)^{\alpha+\beta-1})} \right]^{\left(\frac{1}{\alpha}\right)}, \quad (2.139)$$

$$G \leftarrow G \circ \left[\frac{(W \circ (X^\alpha \circ (GF)^{\beta-1})) F^T}{(W \circ (GF)^{\alpha+\beta-1}) F^T} \right]^{\left(\frac{1}{\alpha}\right)}. \quad (2.140)$$

On note que pour $W = 1_{n \times m}$, on retrouve les expressions des mises à jour pour la $\alpha\beta$ -NMF non pondérée.

De manière pratique, afin de respecter l'homogénéité de la divergence, nous proposons un

choix de terme général de la matrice W sous la forme :

$$W_{ij} = \frac{1}{\sigma_{ij}^{\alpha+\beta}}, \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad \forall j \in \{1, \dots, m\}. \quad (2.141)$$

. Cette expression sera utilisée dans les chapitres suivants.

Nous avons donc proposé un cadre formel permettant d'intégrer une robustesse dans les algorithmes ainsi que l'intégration de poids. Ces techniques ont été proposées dans un cadre multiplicatif, qui présente quelques inconvénients, comme la possible non stationnarité des points limites ou la lenteur de convergence. Néanmoins, leur implémentation est aisée et les mises à jour obtenues par des formulations analytiques.

2.8 Conclusion

Ce chapitre a permis de poser les bases de la factorisation matricielle non négative en rappelant en l'occurrence les conditions nécessaires d'un minimum local et discutant des conditions suffisantes d'unicité. Nous avons d'abord formulé le critère de NMF basé sur la norme Euclidienne. A ce stade, nous avons détaillé les grandes classes d'algorithmes permettant de proposer des solutions tout en évoquant les avantages et inconvénients. Nous avons aussi évoqué dans le cadre de données aux incertitudes différentes la possibilité d'intégrer une pondération dans le critère original afin de prendre en compte la nature hétérogène des données. Puis, nous avons abordé des divergences flexibles et paramétriques permettant de généraliser en particulier le problème de NMF original, mais aussi de s'ouvrir à des critères différents permettant une stabilité de réponse aux points aberrants. Dans cette optique, nous avons délimité le domaine de paramètres pouvant répondre au cahier des charges de séparation de sources de particules en suspension dans l'air.

Notre application se veut être de taille raisonnable (typiquement $n < 200$, $m < 30$, $p < 12$) et le coût de calcul ne constitue donc pas un élément majeur au choix de l'algorithme. Les méthodes multiplicatives apparaissent comme un choix intéressant pour leur facilité d'implémentation, bien qu'elles ne permettent pas d'assurer en permanence la stationnarité des solutions. Néanmoins, l'ajout d'informations complémentaires peut permettre de limiter le nombre potentiel important de points stationnaires en restreignant le domaine admissible des solutions. Ce complément fait l'objet du prochain chapitre sous la forme de NMF sous contraintes égalité.

Deuxième partie

Apport des connaissances expertes pour informer la NMF

Chapitre 3

Factorisation matricielle non-négative sous contraintes égalité

3.1 Introduction

La résolution du problème de répartition des sources de pollution est souvent abordée de différentes manières : nous pouvons différencier sur la figure 3.1 ces méthodes du point de vue de la quantité d'échantillons nécessaires et par rapport à la quantité d'informations complémentaires. D'un côté, on peut recenser les méthodes d'identification de contribution (aussi appelées en chimométrie les méthodes de conservation de masse ou CMB en anglais pour *Chemical Mass Balance*) dans lesquelles les profils sont connus. De l'autre côté, les méthodes aveugles dont la NMF et l'ACP apportent une information minimale provenant du nombre de sources et éventuellement de la positivité. Une solution intermédiaire est d'apporter une information complémentaire partielle sur les profils. En effet, les techniques aveugles de factorisation matricielles non-négatives évoquées dans le chapitre précédent ont permis de mettre en lumière quelques limitations de ces techniques. En particulier, nous avons évoqué la multimodalité de la fonction de coût qui conduit en général à de multiples points stationnaires. Certes, l'évaluation de cette fonction de coût peut permettre de trouver le minimum global, mais il y a un risque réel de conserver des solutions qui ne présenteraient pas de sens physique pour les experts du domaine.

Pour éviter cet écueil, nous proposons d'exprimer les attentes des experts sous formes de contraintes que doit respecter la solution recherchée. Ainsi, nous proposons d'enrichir la factorisation par des contraintes égalité provenant des informations complémentaires apportées par l'expert chimiste.

Différents types de propriétés de la solution peuvent être recherchées selon l'application

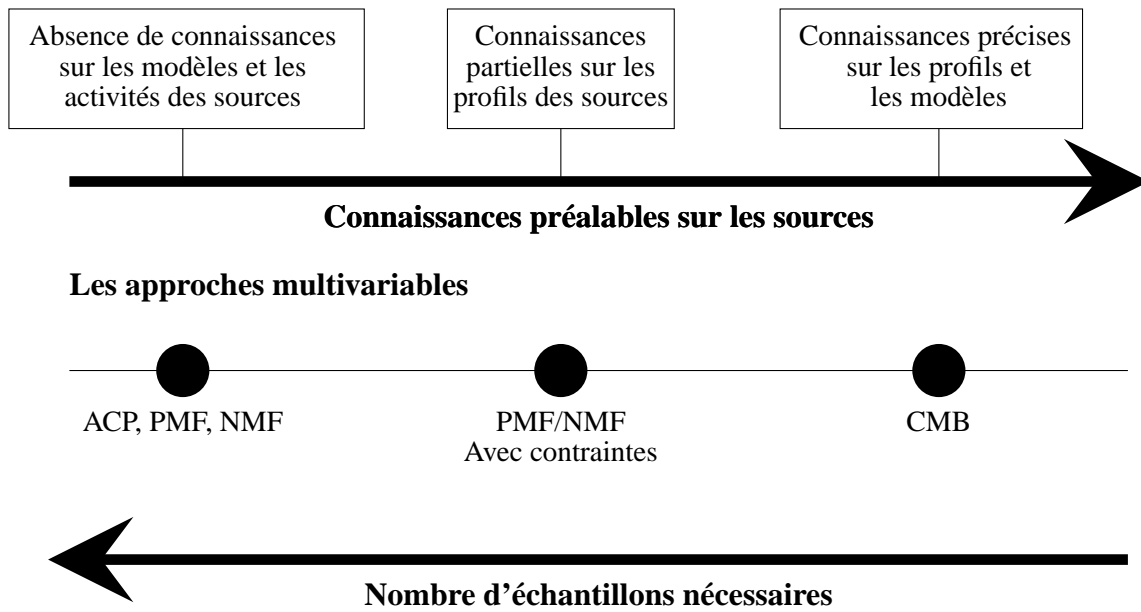


FIGURE 3.1 – Approches pour l’estimation des contributions des sources de pollution [153].

visée. Il arrive que l’on recherche la propriété d’orthogonalité [32, 99, 48, 175] dans la solution, ou des solutions parcimonieuses sur l’un ou l’autre des facteurs, par exemple en séparation de sources audio où l’on recherche des intervalles où une seule source est active [70, 169]. Il est parfois aussi souhaitable d’obtenir un facteur disposant d’une régularité temporelle [169, 30, 18], par exemple dans le cas où un facteur évolue lentement dans le temps.

Les techniques d’intégration de propriétés désirées peuvent se définir de plusieurs manières : Une première manière est d’intégrer les contraintes dans un cadre statistique [18] afin de définir les propriétés attendues de la solution. La façon la plus courante est appelée déterministe et correspond à l’ajout d’un terme de pénalité à une divergence donnée, c.-à-d.,

$$\min_{G, F \geq 0} \mathcal{D}_W^{\alpha, \beta}(X \parallel GF) + \lambda \quad d_C(W, H), \quad (3.1)$$

où la fonction $d_C(W, H)$ désigne une fonction d’écart aux propriétés attendues de la solution. La solution obtenue correspond donc à un compromis entre l’attache aux données et les propriétés attendues via le réglage du paramètre λ .

L’approche que nous proposons d’aborder dans ce chapitre est de conserver le critère initial développé dans les chapitres précédents mais d’exprimer ces contraintes sous forme d’une paramétrisation précise qui permet de rechercher les solutions à l’intérieur du sous-espace ainsi défini. Nous proposons d’intégrer des informations partielles sur la connaissance de certains

profils.

Le chapitre est organisé de la manière suivante. Une première partie décrit la paramétrisation que nous avons développé. Puis, dans le cadre des méthodes présentées au chapitre précédent, nous évoquerons les différentes variantes des méthodes NMF informées abordées, en particulier les règles de mise à jour puis leur initialisation et le critère d'arrêt. Enfin, nous évaluerons de manière comparative ces méthodes en utilisant des indicateurs de performances appropriés.

3.2 Paramétrisation de la recherche des profils de source

Dans beaucoup d'applications, la valeur de certaines composantes de la matrice de profil peut être fournie par l'expert. Nous détaillons maintenant cette paramétrisation – proposée dans [92] et résumée ci-après – qui prend en compte cette connaissance.

Soit Ω une matrice binaire de taille $p \times m$ qui informe de la présence ou l'absence de contraintes sur chaque élément f_{ij} de la matrice F , c.-à-d.,

$$\Omega_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } F_{ij} \text{ est un élément forcé,} \\ 0 & \text{si } F_{ij} \text{ est un élément libre.} \end{cases} \quad (3.2)$$

Soit la matrice binaire de taille $p \times m$ notée $\bar{\Omega}$ complémentaire à Ω .

$$\bar{\Omega} \triangleq 1_{p \times m} - \Omega. \quad (3.3)$$

Nous définissons Φ comme la matrice parcimonieuse de taille $p \times m$ de valeurs de forçage, c.-à-d.,

$$\Phi \triangleq F \circ \Omega. \quad (3.4)$$

Les éléments de la matrice de profil peuvent être forcés à des valeurs positives ou nulles. Par construction, φ_{ij} – le (i, j) ^{ème} élément de Φ – est égal à zéro quand $\Omega_{ij} = 0$. Nous pouvons aisément prouver que

$$\Phi \circ \Omega = \Phi \quad \text{et} \quad \Phi \circ \bar{\Omega} = 0. \quad (3.5)$$

Nous pouvons aussi immédiatement vérifier que :

$$F \circ \bar{\Omega} = F - \Phi. \quad (3.6)$$

Soient \underline{f}_i et $\underline{\varphi}_i$ les i ^{ème} colonnes de F et Φ respectivement. Nous pouvons écrire que le vecteur

$\Delta \underline{f}_i$ est une combinaison linéaire des paramètres libres, c.-à-d.,

$$\Delta \underline{f}_i \triangleq \underline{f}_i - \underline{\varphi}_i = \Gamma_i \underline{\theta}_i, \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}, \quad (3.7)$$

où θ_i et Γ_i sont respectivement le vecteur de paramètres libres de taille $(p - l_i) \times 1$ et la matrice orthonormale de taille $p \times (p - l_i)$ contenant les paramètres libres [92, 93]. l_i représente le nombre de paramètres forcés pour le vecteur \underline{f}_i . Cette matrice Γ_i n'est autre qu'une sélection des vecteurs libres de la base \mathbb{R}^p . L'écriture sous forme matricielle de l'équation (3.7) donne :

$$\Delta F = F - \Phi, \quad (3.8)$$

où ΔF est la matrice composée par les différentes colonnes $\Delta \underline{f}_i$, $i = 1, \dots, m$. Nous pouvons déduire la propriété vérifiée par cette matrice, c.-à-d.,

$$\Delta F \circ \Omega = 0. \quad (3.9)$$

Grâce à l'équation (3.7), une colonne de la matrice de profil F peut donc s'exprimer comme une combinaison linéaire des paramètres forcés et des contributions libres, c.-à-d.,

$$\underline{f}_i = \underline{\varphi}_i + \Gamma_i \underline{\theta}_i, \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}. \quad (3.10)$$

En utilisant la relation (3.8), on peut écrire la matrice de profil sous forme :

$$F = (\Omega + \overline{\Omega}) \circ (\Delta F + \Phi), \quad (3.11)$$

ou sous forme développée,

$$F = \Omega \circ \Phi + \Omega \circ \Delta F + \overline{\Omega} \circ \Delta F + \overline{\Omega} \circ \Phi. \quad (3.12)$$

Grâce aux propriétés (3.5) et (3.9), l'écriture de la matrice se réduit sous une forme simplifiée, c.-à-d.,

$$F = \Omega \circ \Phi + \overline{\Omega} \circ \Delta F. \quad (3.13)$$

Il faut remarquer que cette paramétrisation matricielle fait intervenir uniquement des matrices positives. Par conséquent, nous pouvons aussi déduire que la matrice F vérifie l'inégalité suivante :

$$F \succeq \Phi. \quad (3.14)$$

La matrice Φ est quant à elle figée alors que la matrice ΔF constitue la matrice des paramètres

libres dont la structure est imposée. Cette formulation matricielle est la généralisation de l'expression vectorielle (3.10). Tout au long de ce chapitre, nous allons utiliser l'expression (3.13) dans la recherche des règles de mise à jour des méthodes informées.

3.3 NMF informée à base de norme de Frobenius

Le problème de NMF pondérée a été formulé dans le chapitre précédent en utilisant la trace de matrices au travers de l'expression (2.75). Cette expression peut être ré-utilisée avec les contraintes formulées dans (3.13). Le problème sous contraintes se décline donc en la minimisation de

$$\begin{aligned} \{G, F\} = \arg \min_{G, F} \text{Tr} \left((X - G \cdot F)^T ((X - G \cdot F) \circ W) \right), \\ \text{s. c.} \quad G \succeq 0, \quad F \succeq \Phi, \quad F = \Omega \circ \Phi + \bar{\Omega} \circ \Delta F. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Le problème (3.15) est séparable en 2 sous-problèmes couplés qui fixent alternativement une matrice inconnue, c.-à-d.,

$$\begin{aligned} G^{k+1} &= \arg \min_{G \succeq 0} \text{Tr} \left((X - G \cdot F^k)^T ((X - G \cdot F^k) \circ W) \right), \\ F^{k+1} &= \arg \min_{F \succeq \Phi} \text{Tr} \left((X - G^k \cdot F)^T ((X - G^k \cdot F) \circ W) \right) \quad \text{s. c. } F = \Omega \circ \Phi + \bar{\Omega} \circ \Delta F. \end{aligned} \quad (3.16)$$

La recherche s'effectue donc dans l'espace respectant les contraintes. Nous proposons donc de rechercher des solutions dans l'espace intérieur des contraintes, d'abord en recherchant les conditions vérifiées par un point stationnaire.

3.3.1 Les conditions de KKT

Les conditions de KKT sont expliquées en détail en annexe B pour la minimisation du critère (3.15). Elles se basent sur le calcul de la différentielle du critère par rapport aux matrices inconnues $(G, \Delta F)$. Elles se résument à :

$$\begin{aligned} \Delta F \succeq 0, \quad G \succeq 0, \\ \frac{\partial H}{\partial \Delta F} \succeq 0, \quad \frac{\partial H}{\partial G} \succeq 0, \\ \Delta F \circ \frac{\partial H}{\partial \Delta F} = 0, \quad G \circ \frac{\partial H}{\partial G} = 0. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Pour plus de clarté, soit F^* la matrice courante de profil définie dans la paramétrisation (3.13) par $F^* \triangleq \bar{\Omega} \circ \Delta F + \Phi$. En remplaçant la relation (B.12) dans l'équation (B.13) et par analogie avec la matrice G , il est possible de déduire les conditions de KKT pour le problème pondéré et

contraint sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \Delta F &\succeq 0, & G &\succeq 0, \\
 \bar{\Omega} \circ \left(G^T ((GF^* - X) \circ W) \right) &\succeq 0, & (W \circ (GF^* - X)) F^{*T} &\succeq 0, \\
 \Delta F \circ \bar{\Omega} \circ \left(G^T ((GF^* - X) \circ W) \right) &= 0, & G \circ \left((W \circ (GF^* - X)) F^{*T} \right) &= 0.
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Dans la suite nous proposons des règles de mise à jour et nous vérifions qu'elles sont conformes aux KKT (3.18).

3.3.2 Règles de mise à jour

Nous proposons de nous focaliser sur le second sous-problème de l'équation (3.16) puisque le premier est identique à celui évoqué dans le chapitre précédent concernant la NMF pondérée. Nous considérons donc que la matrice de contribution est figée et notée G même si celle-ci correspond à la matrice de contribution d'une itération précise.

Le second critère de l'équation (3.16) est séparable en critères indépendants relatifs uniquement à une colonne de la matrice de profil si bien que la recherche s'effectue uniquement sur une colonne de la matrice de profil. Cette recherche s'effectue comme la recherche simultanée de l'ensemble des colonnes de la matrice de profil qui minimise

$$\begin{aligned}
 \mathcal{J}(\underline{f}_i) &= \frac{1}{2} \left(\underline{x}_i - G\underline{f}_i \right)^T D_{w_i} \left(\underline{x}_i - G\underline{f}_i \right) \\
 \text{s. c.} \quad \underline{f}_i &= \underline{\varphi}_i + \Gamma_i \underline{\theta}_i \quad \text{et} \quad \underline{f}_i \succeq \underline{\varphi}_i, \quad \forall i \in \{1 \dots m\},
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

où \underline{x}_i représente la $i^{\text{ème}}$ colonne de la matrice X , D_{w_i} est définie par $D_{w_i} \triangleq \text{diag}(w_i)$, où w_i est la $i^{\text{ème}}$ colonne de la matrice W , et $\underline{\theta}_i$ représente le vecteur des paramètres libres de la colonne courante du profil. L'expression de la colonne du profil dans (3.10) permet d'établir que $\Delta \underline{f}_i$ est une combinaison linéaire des paramètres libres, c.-à-d.,

$$\Delta \underline{f}_i = \Gamma_i \underline{\theta}_i, \quad \forall i \in \{1 \dots m\}, \tag{3.20}$$

où $\underline{\theta}_i$ de dimension $(p - l_i) \times 1$ désigne le vecteur de paramètres minimaux à rechercher dans le calcul de \underline{f}_i . L'indice l_i représente le nombre de valeurs figées dans la colonne i du profil. La combinaison des équations (3.19) et (3.20), ramène le problème à la résolution d'un critère de moindres carrés non-négatifs et pondéré dépendant du vecteur des paramètres libres $\underline{\theta}_i$:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{K}(\underline{\theta}_i) &= \frac{1}{2} \left((\underline{x}_i - G\underline{\varphi}_i) - (G\Gamma_i)\underline{\theta}_i \right)^T D_{w_i} \left((\underline{x}_i - G\underline{\varphi}_i) - (G\Gamma_i)\underline{\theta}_i \right) \\
 \text{s. c.} \quad \underline{\theta}_i &\succeq \underline{0} \quad \forall i \in \{1 \dots m\}.
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Nous formulons un majorant quadratique de cette fonction \mathcal{K} , inspiré des travaux de Ho [68] en considérant la matrice D_i^k définie par

$$D_i^k \triangleq \text{diag} \left(\frac{(G\Gamma_i)^T D_{w_i} G\Gamma_i \underline{\theta}_i^k}{\underline{\theta}_i^k} \right). \quad (3.22)$$

La fonction $\mathcal{H}_w(\underline{\theta}_i, \underline{\theta}_i^k)$ définie dans l'équation (3.23) est une fonction majorante de la fonction \mathcal{K} , qui respecte les conditions de la stratégie de majoration minimisation :

$$\mathcal{H}_w(\underline{\theta}_i, \underline{\theta}_i^k) = \mathcal{K}(\underline{\theta}_i^k) + \left(\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \underline{\theta}_i}(\underline{\theta}_i^k) \right)^T (\underline{\theta}_i - \underline{\theta}_i^k) + \frac{1}{2} (\underline{\theta}_i - \underline{\theta}_i^k)^T D_i^k (\underline{\theta}_i - \underline{\theta}_i^k). \quad (3.23)$$

La différentielle de \mathcal{K} s'exprime comme :

$$\frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \underline{\theta}_i}(\underline{\theta}_i) = -\Gamma_i^T \cdot G^T \cdot D_{w_i} \left((\underline{x}_i - G\underline{\varphi}_i) - (G\Gamma_i)\underline{\theta}_i \right). \quad (3.24)$$

Il est donc avantageux de minimiser la fonction majorante plutôt que la fonction initiale. L'annulation de la différentielle de la fonction \mathcal{H} conduit à la minimisation relative aux paramètres libres $\underline{\theta}_i$:

$$\underline{\theta}_i^{k+1} = \underline{\theta}_i^k - (D_i^k)^{-1} \cdot \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \underline{\theta}_i} \cdot \underline{\theta}_i^k. \quad (3.25)$$

Les expressions (3.22) et (3.24) permettent de simplifier la règle de mise à jour des paramètres libres, c.-à-d.,

$$\underline{\theta}_i^{k+1} = \underline{\theta}_i^k + \text{diag} \left(\frac{\underline{\theta}_i^k}{(G\Gamma_i)^T D_{w_i} G\Gamma_i \underline{\theta}_i^k} \right) \cdot \Gamma_i^T \cdot G^T \cdot D_{w_i} \left((\underline{x}_i - G\underline{\varphi}_i) - (G\Gamma_i)\underline{\theta}_i \right). \quad (3.26)$$

Cette dernière équation est aussi la formulation de la NMF pondérée détaillée dans [68] appliquée au vecteur $\underline{\theta}_i$ en remplaçant la matrice G par la matrice $G\Gamma_i$ et les données \underline{x}_i par $(\underline{x}_i - G\underline{\varphi}_i)$. Cette dernière équation se simplifie :

$$\underline{\theta}_i^{k+1} = \underline{\theta}_i^k + \underline{\theta}_i^k \circ \frac{\Gamma_i^T \cdot G^T \cdot D_{w_i} \left((\underline{x}_i - G\underline{\varphi}_i) - (G\Gamma_i)\underline{\theta}_i \right)}{(G\Gamma_i)^T D_{w_i} G\Gamma_i \underline{\theta}_i^k}, \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}. \quad (3.27)$$

En développant le numérateur de l'expression précédente, nous aboutissons à une expression simplifiée qui s'écrit :

$$\underline{\theta}_i^{k+1} = \underline{\theta}_i^k \circ \frac{\Gamma_i^T \cdot G^T \cdot D_{w_i} (\underline{x}_i - G\underline{\varphi}_i)}{(G\Gamma_i)^T D_{w_i} G\Gamma_i \underline{\theta}_i^k}, \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}. \quad (3.28)$$

En se référant à l'équation (3.20), on peut déduire l'expression de la $i^{\text{ème}}$ colonne de la matrice de profil :

$$\Delta \underline{f}_i^{k+1} \leftarrow \Delta \underline{f}_i^k \circ \frac{\Gamma_i \Gamma_i^T G^T \cdot D_{w_i} \cdot (\underline{x}_i - G \underline{\varphi}_i)}{\Gamma_i \Gamma_i^T G^T (D_{w_i} G \Delta \underline{f}_i^k)}, \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}. \quad (3.29)$$

L'expression (3.10) permet de mettre à jour la $i^{\text{ème}}$ colonne de la matrice de profil F

$$\underline{f}_i^{k+1} - \underline{\varphi}_i \leftarrow (\underline{f}_i^k - \underline{\varphi}_i) \circ \frac{\Gamma_i \Gamma_i^T G^T D_{w_i} (\underline{x}_i - G \underline{\varphi}_i)}{\Gamma_i \Gamma_i^T G^T (D_{w_i} G (\underline{f}_i^k - \underline{\varphi}_i))}, \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}. \quad (3.30)$$

En remarquant que $\Gamma_i \Gamma_i^T = \text{diag}(\mathbf{1}_{p \times 1} - \underline{\omega}_i)$ avec $\underline{\omega}_i$ la $i^{\text{ème}}$ colonne de Ω , on peut constater qu'on sélectionne les composantes actives des coefficients multiplicatifs de (3.29). L'expression précédente peut être donc synthétisée au niveau matriciel sous la forme suivante :

$$F - \Phi \leftarrow (F - \Phi) \circ (\mathbf{1}_{p \times m} - \Omega) \circ \left[\frac{G^T (W \circ (X - G\Phi))}{G^T (W \circ (G(F - \Phi)))} \right]. \quad (3.31)$$

Dans cette dernière équation, $(\mathbf{1}_{p \times m} - \Omega)$ doit être vu comme le masque de contraintes appliqué aux coefficients multiplicatifs de $F - \Phi$. Cette méthode s'apparente donc à une méthode multiplicative relative à la matrice ΔF . Cette équation (3.31) est l'expression globale unificatrice qui permet de mettre à jour les itérées des matrices de profil. Elle est à comparer à la version sans contrainte (2.88), obtenue aussi avec (3.31) en imposant $\Omega = 0$ et $\Phi = 0$. La différence essentielle avec la méthode pondérée non informée décrite dans la section 2.5.3 réside dans le fait que les données équivalentes, à savoir $X - G\Phi$, ne constituent plus des données statiques mais dynamiques compte tenu que la matrice de contribution évolue au cours des itérations.

De plus, il est facile de vérifier que tout point limite ΔF^* vérifie la 3^{ème} condition de KKT, décrite dans l'équation 3.18, appelée aussi condition de relâchement complémentaire . Par contre, la seconde condition de KKT n'est pas du tout garantie. Ainsi, cette méthode souffre des mêmes problèmes de convergence que la méthode NMF proposée par Lee and Seung [90], compte tenu que $\Omega = 0$ et $\Phi = 0$ dans (3.31) conduit à une méthode pondérée. Des points non-stationnaires peuvent être rencontrés quand des éléments de la matrice de profil F sont initialisés à zéro. L'avantage éventuel de notre méthode est que les profils initialisés à zéro par la connaissance d'informations expertes sont exclues de la KKT, ce qui permet de vérifier la seconde condition de KKT. Pour les profils dont certaines composantes sont initialisées avec des valeurs différentes de zéro mais dont la limite tend vers 0, la stationnarité demeure problématique et la seconde KKT n'est pas systématiquement vérifiée.

Notons enfin que la NMF informée décrite en (3.31) et (2.88) pour la mise à jour de G , sans contrainte explicite sur la matrice de contribution G ne garantit pas la positivité de $(X - G \cdot \Phi)$. Une étape de projection est donc nécessaire avant la mise à jour de la matrice de contribution.

Néanmoins, la méthode introduite dans cette section ne présente pas forcément les garanties de solutions satisfaisantes surtout si la distribution de bruit des données n'est pas gaussienne. En ce sens, il apparaît utile de considérer d'autres mesures d'écart.

3.4 NMF sous contrainte à base de divergence de KL

La divergence de KL est une mesure classique utilisée pour la NMF par Lee et Seung [90]. Nous l'utilisons ici dans sa version pondérée. De même que précédemment, nous continuons d'intégrer les contraintes définies dans les équations (3.13) et (3.10). Contrairement à la norme de Frobenius, la mesure de KL est une mesure asymétrique. Ainsi, nous pouvons nous interroger sur les différentes variantes de la minimisation à effectuer. Voici deux possibilités de minimisation qui font référence à la divergence de KL qui conduisent à des approximations potentielles :

$$\min_{\Delta F \succeq 0} \mathcal{D}_W^{KL}(X || G \cdot (\Phi + \bar{\Omega} \circ \Delta F)) \Rightarrow X \approx G \cdot (\Phi + \bar{\Omega} \circ \Delta F), \quad (3.32)$$

$$\min_{\Delta F \succeq 0} \mathcal{D}_W^{KL}(X - G\Phi || G(\bar{\Omega} \circ \Delta F)) \Rightarrow X - G\Phi \approx G(\bar{\Omega} \circ \Delta F). \quad (3.33)$$

Les deux minimisations mènent ici à des règles de mise à jour identiques. Nous présentons ci-dessous celles obtenues avec la première expression. Nous avons aussi développé celle à partir de la seconde minimisation dans [94].

Nous recherchons l'approximation d'une colonne de données. Soit \underline{x} une colonne quelconque de la matrice de donnée X , $\underline{\varphi}$ une colonne de la matrice Φ , $\underline{\Delta f}$ une colonne de la matrice ΔF où $\Delta F = F - \Phi$. Nous notons pour raison de concision

$$U \triangleq G\underline{\Gamma}, \quad (3.34)$$

où $\underline{\Gamma}$ représente la matrice Γ_i introduite dans la section 3.2.

La divergence pondérée peut être séparée en plusieurs divergences partielles indépendantes dédiées à une colonne de la matrice de données, sous la forme :

$$\mathcal{D}_w^{KL}(\underline{x} || G\underline{\varphi} + G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i \mathcal{D}^{KL}(x_i || (G\underline{\varphi})_i + (G\underline{\Delta f})_i). \quad (3.35)$$

En utilisant (3.7), il est possible de l'exprimer sous la forme

$$\mathcal{D}_w^{KL}(\underline{x} || G\underline{\varphi} + G\Delta\underline{f}) = \sum_i w_i x_i h^{KL} \left(\frac{(G\varphi)_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} \right), \quad (3.36)$$

où

$$h^{KL}(z) = -\log z + z - 1. \quad (3.37)$$

Notons que $h^{KL}(z)$ est convexe pour $z \geq 0$ et que $h^{KL}(1) = 0$.

Du fait de la convexité de la fonction, l'inégalité de Jensen peut être appliquée une première fois pour éliminer la translation (3.38) et une seconde fois pour fractionner les éléments (3.39), c.-à-d.,

$$h^{KL} \left(\frac{(G\varphi)_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} \right) \leq \frac{(x - G\varphi)_i}{x_i} h^{KL} \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(x - G\varphi)_i} \right) \quad (3.38)$$

et

$$h^{KL} \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(x - G\varphi)_i} \right) \leq \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^{KL} \left(\frac{\theta_j \sum_l u_{il} \theta_l^k}{(x - G\varphi)_i \theta_j^k} \right), \quad (3.39)$$

où les poids λ_j sont artificiellement introduits dans (3.39) et $\lambda_j \triangleq \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k}$, vérifient la somme à 1. k est le numéro de l'itération en cours et θ_j le $j^{\text{ème}}$ élément du vecteur des paramètres libres. La stratégie de MM est appliquée en minimisant la fonction auxiliaire déduite de (3.38) et (3.39), dont l'expression est la suivante :

$$\mathcal{H}_w^{KL}(\theta_j, \theta_j^k) = \sum_i w_i (x - G\varphi)_i \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^{KL} \left(\frac{\theta_j \sum_l u_{il} \theta_l^k}{(x - G\varphi)_i \theta_j^k} \right). \quad (3.40)$$

L'annulation de la dérivée par rapport à θ_j donne

$$\frac{\partial \mathcal{H}_w^{KL}}{\partial \theta_j} = \sum_i w_i u_{i,j} - \frac{\theta_j^k}{\theta_j} \sum_i w_i (x_i - (G\varphi)_i) \frac{u_{i,j}}{\sum_l u_{i,l} \theta_l^k} = 0. \quad (3.41)$$

Cette dernière se simplifie en regroupant les paramètres inconnus :

$$\frac{\theta_j^k}{\theta_j^{k+1}} = \frac{\sum_i w_i u_{i,j}}{\sum_i w_i (x_i - (G\varphi)_i) \frac{u_{i,j}}{\sum_l u_{i,l} \theta_l^k}}. \quad (3.42)$$

Le vecteur d'inconnus $\underline{\theta}$ à l'itération $k + 1$ s'exprime donc sous forme :

$$\underline{\theta}^{k+1} = \frac{\underline{\theta}^k}{U^T \underline{w}} \circ \left(U^T \frac{(\underline{x} - G\underline{\varphi}) \circ \underline{w}}{(U \underline{\theta}^k)} \right). \quad (3.43)$$

A ce stade, nous proposons de faire figurer l'indice i du vecteur courant dans $\Delta \underline{f}$ que nous avons omis pour les besoins de la démonstration, soit $\Delta \underline{f}_i$, afin de préparer le retour à la formulation matricielle. Le calcul de $\Delta \underline{f}_i$ revient à la multiplication de chaque terme par Γ_i , en même temps que nous substituons l'expression de la matrice U par $G \cdot \Gamma_i$,

$$\Delta \underline{f}_i^{k+1} = \frac{\Delta \underline{f}_i^k}{\Gamma_i \Gamma_i^T G^T w_i} \circ \left(\Gamma_i \Gamma_i^T G^T \frac{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i \circ w_i}{(G \Delta \underline{f}_i^k)} \right) \quad \forall i \in \{1, \dots, m\}. \quad (3.44)$$

Sachant que $\Gamma_i \Gamma_i^T = \text{diag}(1_{p \times 1} - \underline{\omega}_i)$ et $\underline{\omega}_i$ est la $i^{\text{ème}}$ colonne de la matrice Ω , il apparaît que la mise à jour intervient seulement sur les éléments sélectionnés de chaque vecteur de la matrice de profil F . L'expression précédente peut être généralisée sous forme matricielle :

$$\Delta F^{k+1} \leftarrow \frac{\Delta F^k}{G^T W} \circ \overline{\Omega} \circ G^T \frac{W \circ (X - G\Phi)}{G \Delta F^k}. \quad (3.45)$$

La règle de mise à jour du profil F s'écrit alors :

$$F - \Phi \leftarrow \frac{(F - \Phi)}{G^T W} \circ \overline{\Omega} \circ \left[G^T \frac{W \circ (X - G\Phi)}{G(F - \Phi)} \right]. \quad (3.46)$$

Cette règle doit s'accompagner de la règle de mise à jour de la matrice de contribution G donnée dans l'équation (2.99). Notons aussi que la divergence considérée dans (3.33) et étudiée dans [94] conduit au même majorant et procure les mêmes règles de mise à jour.

Nous allons maintenant nous intéresser à une divergence paramétrique qui englobe la divergence de Kullback-Leibler afin de généraliser les expressions de la NMF sous contraintes.

3.5 NMF sous contraintes à base de divergence α

Nous nous intéressons à la minimisation de la divergence α introduite dans le chapitre précédent. La minimisation de l'expression (2.120) utilisant la formulation (3.13) permet d'écrire une approximation de $X - G\Phi$. Comme dans la section précédente, deux types de minimisation peuvent être considérées. Chacune de ces minimisations définissent un sous-problème particulier introduit par,

$$\min_{\Delta F \succeq 0} \mathcal{D}_W^\alpha(X || G \cdot (\Phi + \overline{\Omega} \circ \Delta F)) \quad \Rightarrow \quad X \approx G \cdot (\Phi + \overline{\Omega} \circ \Delta F), \quad (3.47)$$

$$\min_{\Delta F \succeq 0} \mathcal{D}_W^\alpha(X - G\Phi || G(\overline{\Omega} \circ \Delta F)) \quad \Rightarrow \quad X - G\Phi \approx G(\overline{\Omega} \circ \Delta F). \quad (3.48)$$

Ici encore, elles conduisent aux mêmes règles de mise à jour. Nous choisissons de développer ici le problème introduit dans (3.48).

Nous proposons encore dans la suite de la démonstration de ne pas utiliser l'indice i pour les vecteurs $\Delta \underline{f}_i$, $\underline{\varphi}_i$, $\underline{\theta}_i$, et la matrice Γ_i . k désigne le numéro de l'itération en cours. Cette démonstration ayant de grandes similtudes avec la démonstration précédente, nous proposons de ne donner que les points essentiels. De même que précédemment, la fonction de coût à minimiser peut se scinder en des divergences partielles relatives à des vecteurs, c.-à-d.,

$$\mathcal{D}_w^\alpha(\underline{x} \| G\underline{\varphi} + G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i x_i h^\alpha \left(\frac{(G\underline{\varphi})_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} \right), \quad (3.49)$$

où

$$h^\alpha(z) = \frac{1}{\alpha(1-\alpha)} \left(\alpha + (1-\alpha)z - z^{1-\alpha} \right) \quad (3.50)$$

est une fonction convexe, $\forall \alpha \in \mathbf{R}$ et $z \geq 0$. La convexité de la fonction $h^\alpha(z)$ permet d'écrire une première majoration qui élimine la translation :

$$h^\alpha \left(\frac{(G\underline{\varphi})_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} \right) \leq \frac{(x - G\underline{\varphi})_i}{x_i} h^\alpha \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \right). \quad (3.51)$$

Cette relation (3.51) permet en définitive de comparer les deux divergences proposées initialement, c.-à-d.,

$$\mathcal{D}_w^\alpha(\underline{x} \| G\underline{\varphi} + G\underline{\Delta f}) \leq \mathcal{D}_w^\alpha(\underline{x} - G\underline{\varphi} \| G\underline{\Delta f}). \quad (3.52)$$

Nous utilisons la fonction majorante de l'expression précédente que nous cherchons à majorer pour rendre la recherche individuelle en les paramètres scalaires :

$$\mathcal{D}_w^\alpha(\underline{x} - G\underline{\varphi} \| G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i (x - G\underline{\varphi})_i h^\alpha \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \right). \quad (3.53)$$

La majoration issue de l'inégalité de Jensen utilise les mêmes coefficients de poids que dans (3.39), ainsi la structure de l'inégalité est la même, c.-à-d.,

$$h^\alpha \left(\frac{\sum_j u_{i,j} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \right) \leq \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^\alpha \left(\frac{u_{ij} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \frac{\sum_l u_{il} \theta_l^k}{u_{ij} \theta_j^k} \right). \quad (3.54)$$

La fonction majorante déduite de la précédente inégalité est :

$$\mathcal{H}_w^\alpha(\theta_j, \theta_j^k) = \sum_i w_i (x - G\underline{\varphi})_i \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^\alpha \left(\frac{u_{ij} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \frac{\sum_l u_{il} \theta_l^k}{u_{ij} \theta_j^k} \right). \quad (3.55)$$

La dérivée partielle de la fonction auxiliaire donne les expressions simplifiées [132] :

$$\frac{\partial \mathcal{H}_w^\alpha}{\partial \theta_j} = \frac{1}{\alpha} \sum_i w_i u_{ij} - \frac{1}{\alpha} \left(\frac{\theta_j^k}{\theta_j} \right)^\alpha \sum_i \frac{w_i u_{ij} (x - G\varphi)_i^\alpha}{\left(\sum_l u_{il} \theta_l^k \right)^\alpha}. \quad (3.56)$$

En annulant le gradient, on obtient l'expression du rapport des paramètres libres :

$$\left(\frac{\theta_j}{\theta_j^k} \right)^\alpha = \frac{\sum_i \frac{w_i u_{ij} (x - G\varphi)_i^\alpha}{\sum_l u_{il} \theta_l^k}}{\sum_i w_i u_{ij}}, \quad (3.57)$$

qui peut être condensée en une formulation vectorielle :

$$\left(\frac{\underline{\theta}}{\underline{\theta}^k} \right)^\alpha = \frac{U^T \frac{(x - G\varphi)^\alpha \circ \underline{w}}{(U \underline{\theta}^k)^\alpha}}{U^T \underline{w}}, \quad (3.58)$$

et les paramètres libres d'une colonne quelconque sont ainsi déduits :

$$\underline{\theta} = \underline{\theta}^k \circ \left[\frac{U^T \frac{(x - G\varphi)^\alpha \circ \underline{w}}{(U \underline{\theta}^k)^\alpha}}{U^T \underline{w}} \right]^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (3.59)$$

En utilisant l'expression (3.7), une colonne quelconque de la matrice de ΔF s'exprime sous la forme :

$$\Delta \underline{f}^{k+1} = \Delta \underline{f}^k \circ \left[\frac{\Gamma U^T \frac{(x - G\varphi)^\alpha \circ \underline{w}}{(U \underline{\theta}^k)^\alpha}}{\Gamma U^T \underline{w}} \right]^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (3.60)$$

En remplaçant la matrice U par l'expression $U \triangleq G\Gamma$ et en utilisant la propriété $\Gamma \Gamma^T = \text{diag}(1_{p \times 1} - \omega)$, nous pouvons déduire un masque permettant la mise à jour des paramètres libres et aboutir à la règle de mise à jour de F :

$$F - \Phi \leftarrow (F - \Phi) \circ \bar{\Omega} \circ \left[\frac{G^T \frac{(W \circ (X - G\Phi)^\alpha)}{(G(F - \Phi))^\alpha}}{G^T W} \right]^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (3.61)$$

Cette équation résume la mise à jour de la matrice de profil pour les deux minimisations évoquées au début. Elles mènent donc rigoureusement à la même règle de mise à jour. Il faut par ailleurs remarquer que la NMF par divergence de Kullback-Leibler est un cas particulier de la

NMF par divergence α pour $\alpha = 1$.

3.6 NMF sous contraintes à base de divergence β

Nous proposons dans cette partie d'étudier les règles de mise à jour en minimisant la fonction de coût de type divergence β pondérée (2.124) en utilisant la paramétrisation (3.13).

Celle-ci se décline en une première approche qui consiste à minimiser la fonction de coût (3.62), ainsi qu'une approche alternative développée dans le paragraphe variante.

3.6.1 Première approche de NMF avec divergence β

Nous avons opté dans ce paragraphe pour la minimisation suivante relative à la divergence β . Elle s'exprime par :

$$\min_{\Delta F \succeq 0} \mathcal{D}_W^\beta(X - G\Phi || G\Delta F) \Rightarrow X - G\Phi \approx G\Delta F. \quad (3.62)$$

Cette minimisation (3.62) conduit à une factorisation approchée de ce que l'on appelle les résidus. Elle peut se scinder en minimisation de divergences indépendantes relatives à des vecteurs. Dans un souci de généralité, nous proposons dans la suite d'omettre l'indice i pour les vecteurs $\Delta \underline{f}_i, \underline{\varphi}_i, \underline{\theta}_i$, et la matrice Γ_i . k désigne le numéro de l'itération en cours.

Nous utilisons encore la matrice U déjà définie dans (3.34). La divergence β entre deux vecteurs colonnes issus de la minimisation s'exprime par :

$$\mathcal{D}_{\underline{w}}^\beta(\underline{x} - G\underline{\varphi} || G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i \mathcal{D}^\beta((\underline{x} - G\underline{\varphi})_i || (G\underline{\Delta f})_i). \quad (3.63)$$

La stratégie MM permet de minimiser une fonction auxiliaire que nous cherchons à construire. La fonction (3.63) peut s'exprimer en fonction de la fonction $h^\beta(\cdot)$ sous la forme :

$$\mathcal{D}_{\underline{w}}^\beta(\underline{x} - G\underline{\varphi} || G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i^{\beta+1} \cdot h^\beta\left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i}\right), \quad (3.64)$$

où θ_j est le $j^{\text{ème}}$ élément du vecteur des paramètres libres et

$$h^\beta(z) \triangleq -\frac{1}{\beta} \left(z^\beta - \frac{1}{\beta+1} - \frac{\beta}{\beta+1} z^{\beta+1} \right). \quad (3.65)$$

La dérivée seconde de cette fonction s'écrit :

$$\frac{d^2(h^\beta(z))}{dz^2} = \beta z^{\beta-1} - (\beta-1)z^{\beta-2}, \quad (3.66)$$

ce qui permet de montrer que $h^\beta(z)$ est une fonction convexe pour $0 \leq \beta \leq 1$ et $z \geq 0$. L'inégalité de Jensen peut donc s'appliquer pour $0 \leq \beta \leq 1$ sous la forme

$$h^\beta \left(\frac{\sum_j u_{i,j} \theta_j}{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i} \right) \leq \sum_j \frac{u_{i,j} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^\beta \left(\frac{u_{i,j} \theta_j}{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i} \frac{\sum_l u_{il} \theta_l^k}{u_{i,j} \theta_j^k} \right), \quad (3.67)$$

où k désigne le numéro de l'itération en cours. La précédente inégalité (3.67) permet de trouver la fonction auxiliaire séparable en les paramètres libres :

$$\mathcal{H}_{1,w}^\beta(\theta_j, \theta_j^k) = \sum_i w_i (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i^{\beta+1} \sum_j \frac{u_{i,j} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^\beta \left(\frac{u_{i,j} \theta_j}{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i} \frac{\sum_l u_{il} \theta_l^k}{u_{i,j} \theta_j^k} \right). \quad (3.68)$$

La différentiation de la fonction auxiliaire $\mathcal{H}_{1,w}^\beta(\cdot)$ conduit à :

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{1,w}^\beta}{\partial \theta_j} = \left(\frac{\theta_j}{\theta_j^k} \right)^{\beta-1} \left[\left(\sum_i w_i u_{ij} \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^\beta \right) \frac{\theta_j}{\theta_j^k} - \left(\sum_i w_i u_{ij} \cdot (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^{\beta-1} \right) \right]. \quad (3.69)$$

La composante j du vecteur de paramètres libres est obtenu en annulant le gradient donné par l'équation (3.69), c.-à-d.

$$\frac{\partial \mathcal{H}_{1,w}^\beta}{\partial \theta_j} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\theta_j}{\theta_j^k} = \frac{\sum_i w_i u_{ij} \cdot (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^{\beta-1}}{\sum_i w_i u_{ij} \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^\beta}. \quad (3.70)$$

Le vecteur des paramètres libres peut être déduit de (3.70) :

$$\frac{\underline{\theta}}{\underline{\theta}^k} = \frac{U^T \left[(\underline{x} - G\underline{\varphi}) \circ (U\underline{\theta}^k)^{\beta-1} \circ \underline{w} \right]}{U^T \left[\underline{w} \circ (U\underline{\theta}^k)^\beta \right]}. \quad (3.71)$$

En utilisant l'équation (3.7), on peut déduire la règle de mise à jour du vecteur $\underline{\Delta f}$:

$$\underline{\Delta f}^{k+1} = \underline{\Delta f}^k \circ \frac{IU^T \left[(\underline{x} - G\underline{\varphi}) \circ (G\underline{\Delta f}^k)^{\beta-1} \circ \underline{w} \right]}{IU^T \left[\underline{w} \circ (G\underline{\Delta f}^k)^\beta \right]}, \quad (3.72)$$

et en remplaçant U par sa définition (3.34), l'équation (3.72) peut être simplifiée :

$$\Delta \underline{f}^{k+1} = \Delta \underline{f}^k \circ \frac{\Gamma \Gamma^T G^T \left[(\underline{x} - G\underline{\varphi}) \circ (G \Delta \underline{f}^k)^{\beta-1} \circ \underline{w} \right]}{\Gamma \Gamma^T G^T \left[\underline{w} \circ (G \Delta \underline{f}^k)^\beta \right]}. \quad (3.73)$$

Soit $\bar{\omega} \triangleq 1_{p \times 1} - \underline{\omega}$, où $\underline{\omega}$ désigne une colonne quelconque de la matrice Ω . Sachant que $\Gamma \Gamma^T = \text{diag}(1_{p \times 1} - \underline{\omega})$, l'équation (3.73) peut s'écrire en utilisant la multiplication matricielle terme à terme :

$$\Delta \underline{f}^{k+1} = \Delta \underline{f}^k \circ \frac{\bar{\omega} \circ \left(G^T \left[(\underline{x} - G\underline{\varphi}) \circ (G \Delta \underline{f}^k)^{\beta-1} \circ \underline{w} \right] \right)}{\bar{\omega} \circ \left(G^T \left[\underline{w} \circ (G \Delta \underline{f}^k)^\beta \right] \right)}. \quad (3.74)$$

L'expression (3.74) peut être généralisée au cas matriciel en remarquant que $\Delta \underline{f}$, $\underline{\omega}$ et $\underline{\varphi}$ sont respectivement les vecteurs des matrices générales ΔF , Ω et Φ . Les règles de mise à jour s'écrivent donc, en introduisant la matrice $\bar{\Omega}$ définie par $\bar{\Omega} \triangleq 1 - \Omega$:

$$\Delta F^{k+1} \leftarrow \Delta F^k \circ \bar{\Omega} \circ M_F^\beta, \quad (3.75)$$

avec

$$M_F^\beta = \frac{G^T \cdot \left[W \circ (X - G\Phi) \circ [G(F - \Phi)]^{\beta-1} \right]}{G^T \cdot \left[W \circ [G(F - \Phi)]^\beta \right]}. \quad (3.76)$$

L'expression (3.75) est uniquement valable dans le domaine de convexité de la divergence β , c.-à-d., pour $\beta \in [0; 1]$. Pratiquement, même si la démonstration en dehors de ce domaine n'est pas disponible, Févotte [55] mentionne que l'expression des règles en dehors du domaine de convexité préserve toutefois la décroissance monotone du critère. En dehors du domaine convexe, Févotte et Idier [55] proposent de séparer la fonction de coût à minimiser en partie convexe et concave ce qui conduit finalement à considérer un masque de mise à jour différent $(M_F^\beta)^{\gamma(\beta)}$ où $\gamma(\beta)$ est une fonction dépendant de β . Les explications détaillées sont données dans [55].

3.6.2 Une variante de la NMF avec divergence β

Contrairement à (3.62) où la minimisation concerne $\mathcal{D}_W^\beta(X - G\Phi || G\Delta F)$, une approche différente consiste à considérer la divergence $\mathcal{D}_W^\beta(X || G\Phi + G\Delta F)$. Cette dernière peut être divisée en divergences indépendantes relatives à des vecteurs, dont l'expression se décline en :

$$\mathcal{D}_w^\beta(\underline{x} || G\underline{\varphi} + G\Delta \underline{f}) = \sum_i w_i \mathcal{D}^\beta \left(x_i || (G\underline{\varphi})_i + (G\Delta \underline{f})_i \right). \quad (3.77)$$

En utilisant (2.124), il est possible de l'exprimer sous la forme :

$$\mathcal{D}_w^\beta(\underline{x} || G\underline{\varphi} + G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i x_i^{\beta+1} h^\beta \left(\frac{(G\underline{\varphi})_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} \right), \quad (3.78)$$

où $h^\beta(z)$ est définie dans l'équation (3.65). L'inégalité de Jensen peut être appliquée une première fois en remarquant que

$$\frac{(G\underline{\varphi})_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} = \frac{(x - G\underline{\varphi})_i}{x_i} \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \right) + \frac{(G\underline{\varphi})_i}{x_i} \cdot 1,$$

ce qui conduit à

$$h^\beta \left(\frac{(G\underline{\varphi})_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} \right) \leq \frac{(x - G\underline{\varphi})_i}{x_i} h^\beta \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \right). \quad (3.79)$$

La seconde étape est de séparer les paramètres libres en appliquant l'inégalité de Jensen similairement à (3.67)

$$h^\beta \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(x - G\underline{\varphi})_i} \right) \leq \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^\beta \left(\frac{\theta_j \sum_l u_{il} \theta_l^k}{(x - G\underline{\varphi})_i \theta_j^k} \right), \quad (3.80)$$

où k est le numéro de l'itération en cours et θ_j le $j^{\text{ème}}$ élément du vecteur des paramètres libres. La fonction auxiliaire est déduite de (3.78) en utilisant les inégalités (3.79) et (3.80), c.-à-d.,

$$\mathcal{H}_{2,w}^\beta(\theta_j, \theta_j^k) = \sum_i w_i x_i^\beta (x - G\underline{\varphi})_i \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} h^\beta \left(\frac{\theta_j \sum_l u_{il} \theta_l^k}{(x - G\underline{\varphi})_i \theta_j^k} \right). \quad (3.81)$$

En annulant le gradient $\frac{\partial \mathcal{H}_{2,w}^\beta}{\partial \theta_j}$ conformément aux résultats précédents, on obtient le paramètre libre optimal à l'itération $k+1$

$$\frac{\theta_j}{\theta_j^k} = \frac{\sum_i w_i u_{ij} \cdot x_i^\beta \cdot (x - G\underline{\varphi})_i^{(1-\beta)} \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^{\beta-1}}{\sum_i w_i u_{ij} \cdot x_i^\beta \cdot (x - G\underline{\varphi})_i^{-\beta} \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^\beta}, \quad (3.82)$$

et le vecteur des paramètres libres s'exprime sous la forme :

$$\frac{\underline{\theta}}{\underline{\theta}^k} = \frac{U^T \left[\underline{w} \circ \underline{x}^\beta \circ (x - G\underline{\varphi})^{1-\beta} \circ (U \underline{\theta}^k)^{\beta-1} \right]}{U^T \left[\underline{w} \circ \underline{x}^\beta \circ (x - G\underline{\varphi})^{-\beta} \circ (U \underline{\theta}^k)^\beta \right]}. \quad (3.83)$$

Sachant que $\Gamma \Gamma^T = \text{diag}(1_{p \times 1} - \underline{\omega})$ et en utilisant les équations (3.7) et (3.34), il est possible de

déduire la forme de mise à jour $\Delta \underline{f}^{k+1} \leftarrow \Delta \underline{f}^k \circ N_{\underline{f}}$ où

$$N_{\underline{f}}^{\beta} = \frac{\underline{\omega} \circ \left(G^T \left[\underline{w} \circ \underline{x}^{\beta} \circ (\underline{x} - G\underline{\varphi})^{1-\beta} \circ (U\underline{\theta}^k)^{\beta-1} \right] \right)}{\underline{\omega} \circ \left(G^T \left[\underline{w} \circ \underline{x}^{\beta} \circ (\underline{x} - G\underline{\varphi})^{-\beta} \circ (U\underline{\theta}^k)^{\beta} \right] \right)}. \quad (3.84)$$

L'équation (3.8) permet de déduire la règle de mise à jour de la matrice de profil F

$$F^{k+1} \leftarrow \Phi + \Delta F^k \circ \overline{\Omega} \circ N_F^{\beta}, \quad (3.85)$$

où

$$N_F^{\beta} = \frac{G^T \left[W \circ X^{\beta} \circ [(X - G\Phi)^+]^{1-\beta} \circ [(G(F^k - \Phi))^+]^{\beta-1} \right]}{G^T \left[W \circ X^{\beta} \circ [(X - G\Phi)^+]^{-\beta} \circ [(G(F^k - \Phi))^+]^{\beta} \right]}. \quad (3.86)$$

L'opérateur $^+$ est utilisé pour forcer les matrices $(X - G\Phi)$ et $G(F^k - \Phi)$ à être positives.

On remarque que N_F peut s'écrire sous la même forme que M_F dans l'équation (3.76) en définissant une matrice de poids

$$W_1 \triangleq W \circ X^{\beta} \circ [(X - G\Phi)^+]^{-\beta}. \quad (3.87)$$

La mise à jour proposée ici peut être vue comme une extension de la première mise à jour selon une matrice de poids adaptative W_1 au cours des itérations.

3.7 NMF basée sur la divergence $\alpha\beta$

Les minimisations envisagées dans les paragraphes précédents peuvent être étendues aux divergences $\alpha\beta$. Nous avons évoqué deux types de minimisation qu'il est possible de poursuivre dans ces paragraphes.

3.7.1 Rappel sur les divergences $\alpha\beta$

Les deux divergences relatives aux vecteurs que nous cherchions à minimiser sont d'une part,

$$\mathcal{D}_{\underline{w}}^{\alpha,\beta}(\underline{x} - G\underline{\varphi} \parallel G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i \mathcal{D}^{\alpha,\beta} \left((\underline{x} - G\underline{\varphi})_i \parallel (G\underline{\Delta f})_i \right), \quad (3.88)$$

et d'autre part,

$$\mathcal{D}_{\underline{w}}^{\alpha,\beta}(\underline{x} \parallel G\underline{\varphi} + G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i \mathcal{D}^{\alpha,\beta} \left(x_i \parallel (G\underline{\varphi})_i + (G\underline{\Delta f})_i \right). \quad (3.89)$$

Toutes deux s'expriment en fonction d'une fonction unique $h^{\alpha,\beta}(z)$, définie par

$$h^{\alpha,\beta}(z) = -\frac{1}{\alpha\beta} \left[z^\beta - \frac{\alpha}{\alpha+\beta} - \frac{\beta}{\alpha+\beta} z^{\alpha+\beta} \right] \quad \forall (\alpha, \beta, \alpha+\beta) \neq 0, \quad (3.90)$$

dont les expressions sont respectivement,

$$\mathcal{D}_{\underline{w}}^{\alpha,\beta}(\underline{x} - G\underline{\varphi} || G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i^{\alpha+\beta} \cdot h^{\alpha,\beta} \left(\frac{\sum_j u_{ij} \theta_j}{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i} \right), \quad (3.91)$$

et

$$\mathcal{D}_{\underline{w}}^{\alpha,\beta}(\underline{x} || G\underline{\varphi} + G\underline{\Delta f}) = \sum_i w_i x_i^{\alpha+\beta} \cdot h^{\alpha,\beta} \left(\frac{(G\underline{\varphi})_i + \sum_j u_{ij} \theta_j}{x_i} \right). \quad (3.92)$$

Cette fonction $h^{\alpha,\beta}(z)$ possède la propriété de convexité [35] $\forall z \geq 0$, dans le domaine des paramètres décrit par $\beta \in [\min(1, 1-\alpha); \max(1, 1-\alpha)]$. Nous nous restreignons à ce domaine de paramètres afin de préserver cette propriété.

De manière similaire aux inégalités (3.79) et (3.80), nous disposons des mêmes inégalités pour la fonction $h^{\alpha,\beta}(z)$ ce qui conduit aux deux fonctions majorantes

$$\mathcal{H}_{1,w}^{\alpha,\beta}(\theta_j, \theta_j^k) = \sum_i w_i (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i^{\alpha+\beta} \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} \cdot h^{\alpha,\beta} \left(\frac{\theta_j \sum_l u_{il} \theta_l^k}{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i \theta_j^k} \right), \quad (3.93)$$

$$\mathcal{H}_{2,w}^{\alpha,\beta}(\theta_j, \theta_j^k) = \sum_i w_i x_i^{\alpha+\beta-1} (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i \sum_j \frac{u_{ij} \theta_j^k}{\sum_l u_{il} \theta_l^k} \cdot h^{\alpha,\beta} \left(\frac{\theta_j \sum_l u_{il} \theta_l^k}{(\underline{x} - G\underline{\varphi})_i \theta_j^k} \right). \quad (3.94)$$

3.7.2 Règles de mise à jour par la première approche

L'annulation de la dérivée de la fonction auxiliaire (3.93) conduit à la mise à jour suivante de la composante j du vecteur des paramètres libres

$$\left(\frac{\theta_j}{\theta_j^k} \right)^\alpha = \frac{\sum_i w_i u_{ij} \cdot (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i^\alpha \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^{\beta-1}}{\sum_i w_i u_{ij} \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^{\alpha+\beta-1}}. \quad (3.95)$$

Le vecteur quelconque des paramètres libres s'exprime donc sous la forme

$$\left(\frac{\underline{\theta}}{\underline{\theta}^k} \right)^\alpha = \frac{U^T [\underline{w} \circ (\underline{x} - G\underline{\varphi})^\alpha \circ (U\underline{\theta}^k)^{\beta-1}]}{U^T [\underline{w} \circ (U\underline{\theta}^k)^{\alpha+\beta-1}]}. \quad (3.96)$$

Similairement aux paragraphes précédents, nous pouvons proposer une mise à jour du profil suivant le schéma suivant :

$$\Delta F^{k+1} \leftarrow \Delta F^k \circ \bar{\Omega} \circ M_F^{\alpha, \beta}, \quad (3.97)$$

avec

$$M_F^{\alpha, \beta} = \left[\frac{G^T \left(W \circ (X - G\Phi)^\alpha \circ (G(F - \Phi))^{\beta-1} \right)}{G^T \left(W \circ (G(F - \Phi))^{\alpha+\beta-1} \right)} \right]^{(\frac{1}{\alpha})}. \quad (3.98)$$

Il peut s'avérer utile d'adjoindre des protections correspondant aux valeurs nulles de certaines matrices, c.-à-d.,

$$M_F^{\alpha, \beta} = \left[\frac{G^T \left(W \circ ((X - G\Phi)^+)^{\alpha} \circ ((G(F - \Phi))^+)^{\beta-1} \right)}{G^T \left(W \circ ((G(F - \Phi))^+)^{\alpha+\beta-1} \right)} \right]^{(\frac{1}{\alpha})}. \quad (3.99)$$

La mise à jour de la matrice de contribution est issue de la méthode sans contrainte, celle-ci reste donc la même que dans (2.118), c.-à-d.,

$$G \leftarrow G \circ \left[\frac{\left(W \circ X^\alpha \circ (GF)^{\beta-1} \right) F^T}{\left(W \circ (GF)^{\alpha+\beta-1} \right) F^T} \right]^{(\frac{1}{\alpha})}. \quad (3.100)$$

3.7.3 Variante de la NMF sous contrainte à base de divergence $\alpha\beta$

Il convient aussi de développer les mises à jour pour la seconde fonction auxiliaire (3.94), dont l'annulation de la dérivée conduit à la mise à jour suivante de la composante j du vecteur des paramètres libres,

$$\left(\frac{\theta_j}{\theta_j^k} \right)^\alpha = \frac{\sum_i w_i u_{ij} \cdot (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i^{1-\beta} \cdot x_i^{\alpha+\beta-1} \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^{\beta-1}}{\sum_i w_i u_{ij} \cdot x_i^{\alpha+\beta-1} \cdot (\underline{x} - G\underline{\varphi})_i^{1-\alpha-\beta} \cdot (\sum_l u_{il} \theta_l^k)^{\alpha+\beta-1}}. \quad (3.101)$$

Le vecteur des paramètres libres se déduit de la même manière, c.-à-d.,

$$\left(\frac{\underline{\theta}}{\underline{\theta}^k} \right)^\alpha = \frac{U^T \left[\underline{w} \circ \underline{x}^{\alpha+\beta-1} \circ (\underline{x} - G\underline{\varphi})^{1-\beta} \circ (U\underline{\theta}^k)^{\beta-1} \right]}{U^T \left[\underline{w} \circ \underline{x}^{\alpha+\beta-1} \circ (\underline{x} - G\underline{\varphi})^{1-\alpha-\beta} \circ (U\underline{\theta}^k)^{\alpha+\beta-1} \right]}. \quad (3.102)$$

L'écriture de la forme matricielle permet une écriture compacte des règles de mise à jour sous la forme :

$$\Delta F^{k+1} \leftarrow \Delta F^k \circ \bar{\Omega} \circ N_F^{\alpha, \beta}, \quad (3.103)$$

avec

$$N_F^{\alpha,\beta} = \left[\frac{G^T \left(W \circ X^{\alpha+\beta-1} \circ (X - G\Phi)^{1-\beta} \circ (G(F - \Phi))^{\beta-1} \right)}{G^T \left(W \circ X^{\alpha+\beta-1} \circ (X - G\Phi)^{1-\alpha-\beta} \circ (G(F - \Phi))^{\alpha+\beta-1} \right)} \right]^{\left(\frac{1}{\alpha}\right)}. \quad (3.104)$$

Les sécurités interdisant les valeurs nulles de certaines matrices conduisent à l'expression

$$N_F^{\alpha,\beta} = \left[\frac{G^T \left(W \circ X^{\alpha+\beta-1} \circ ((X - G\Phi)^+)^{1-\beta} \circ ((G(F - \Phi))^+)^{\beta-1} \right)}{G^T \left(W \circ X^{\alpha+\beta-1} \circ ((X - G\Phi)^+)^{1-\alpha-\beta} \circ ((G(F - \Phi))^+)^{\alpha+\beta-1} \right)} \right]^{\left(\frac{1}{\alpha}\right)}. \quad (3.105)$$

Les deux expressions des masques (3.105) et (3.99) correspondent aux deux mises à jour de la matrice de profil qui unifient l'ensemble des contributions des NMF contraintes à base de divergence. Notons par ailleurs que leur validité est cependant limitée au domaine $\beta \in [\min(1, 1 - \alpha); \max(1, 1 - \alpha)]$.

Pour ce qui concerne la mise à jour des matrices de contribution, l'expression (3.100) reste valide quelque soit la divergence choisie. Un choix judicieux du couple (α, β) permet de retrouver les règles correspondant aux méthodes issues des divergences précédentes.

3.7.4 Conditions de KKT pour la NMF informée à base de divergence $\alpha\beta$

Les conditions de KKT sont utiles pour vérifier qu'un point limite correspond à un point stationnaire ou bien pour générer des règles de mise à jour par la méthode heuristique. Nous nous limitons cependant à la recherche de celles qui correspondent au problème

$$\{G, F\} = \arg \min_{G, F} \mathcal{D}_W^{\alpha\beta}(X - G\Phi || G\Delta F). \quad (3.106)$$

Les démonstrations des conditions de KKT sont données en annexe C. Nous donnons ici uniquement les résultats de synthèse pour plus de clarté, d'abord pour G ,

$$\left\{ \begin{array}{l} G \succeq 0 \\ \frac{1}{\beta} \left[W \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1} \left((GF^*)^\beta - (X - G\Phi)^\beta \right) \right] \Phi^T + \\ \frac{1}{\alpha} \left[W \circ GF^* \right]^{\beta-1} \circ \left((GF^*)^\alpha - (X - G\Phi)^\alpha \right) F^{*T} \succeq 0, \\ \frac{1}{\beta} G \circ \left[W \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1} \left((GF^*)^\beta - (X - G\Phi)^\beta \right) \right] \Phi^T + \\ \frac{1}{\alpha} G \circ \left[W \circ GF^* \right]^{\beta-1} \circ \left((GF^*)^\alpha - (X - G\Phi)^\alpha \right) F^{*T} = 0, \end{array} \right. \quad (3.107)$$

puis pour ΔF ,

$$\begin{cases} \Delta F \succeq 0, \\ \frac{1}{\alpha} \bar{\Omega} \circ \left(G^T (W \circ [(GF^*)^{\alpha+\beta-1} - ((X - G\Phi)^\alpha \circ (GF^*)^{\beta-1})]) \right) \succeq 0, \\ \frac{1}{\alpha} \Delta F \circ \bar{\Omega} \circ \left(G^T (W \circ [(GF^*)^{\alpha+\beta-1} - ((X - G\Phi)^\alpha \circ (GF^*)^{\beta-1})]) \right) = 0. \end{cases} \quad (3.108)$$

Il est possible de déduire les conditions de KKT pour la NMF informée utilisant la divergence α ou la divergence β à partir des conditions de KKT données en annexe C. Nous faisons observer aussi que les conditions KKT de la NMF pondérée et sans contraintes sont retrouvées en remplaçant tout simplement Φ par la matrice nulle.

En définitive, ces conditions permettent d'observer que les mises à jour proposées dans le cas de ΔF sont compatibles avec les règles qui ont été proposées.

3.8 Initialisation

Le succès des méthodes de NMF dépend étroitement de l'initialisation effectuée. En effet, les méthodes de NMF standards présentent de nombreux points stationnaires selon l'initialisation choisie puisque le problème n'a pas de solution unique en dehors de cas très particuliers. De multiples tirages aléatoires permettent de sélectionner la matrice stationnaire qui donne le critère minimum par la NMF. Dans notre application, nous ne pouvons pas nous contenter de cette stratégie qui consisterait à ne pas tenir compte des contraintes induites par l'expert sur les profils physico-chimiques. En effet, il arrive fréquemment que les solutions obtenues par cette méthode présentent un minimum global, mais ne donnent pas satisfaction dans l'interprétation physique des profils. Ainsi, la méthode courante de l'initialisation par tirage aléatoire multiple n'est pas satisfaisante.

Dans la littérature, on distingue souvent des méthodes d'initialisation dédiées au contexte de la classification [171] dans laquelle l'un des facteurs est parcimonieux. Ce contexte ne peut convenir dans le cas d'une application de séparation de sources où cette condition n'est pas vérifiée. Il est même vivement déconseillé de procéder ainsi, puisque le caractère parcimonieux d'un facteur est conservé dans un algorithme de NMF de type multiplicatif conduisant à des solutions sans intérêt.

De manière alternative, il peut s'avérer intéressant d'utiliser la sortie d'un algorithme d'ACI [14], modifié pour préserver la non-négativité, pour disposer d'une initialisation.

Notre approche consiste à se rappeler que nous disposons d'une connaissance approximative de la matrice de profil avec, pour partie, les éléments forcés et pour le reste les éléments libres.

Ces derniers peuvent être fixés à des valeurs non nulles afin de permettre la poursuite de la recherche par un algorithme de NMF. Nous allons donc considérer que nous disposons de la connaissance de la matrice de profil initial appelée F .

Soient \underline{w}_i , \underline{x}_i , et \underline{g}_i les $i^{\text{ème}}$ lignes de W , X , et G , respectivement. La $i^{\text{ème}}$ ligne de la matrice de contribution minimise un critère de type moindres carrés pondérés sous des contraintes spécifiques comme la non-négativité, c.-à-d.,

$$\mathcal{J}(\underline{g}_i) = \left(\underline{x}_i^T - F^T \underline{g}_i^T \right)^T \cdot D_{w_i} \cdot \left(\underline{x}_i^T - F^T \underline{g}_i^T \right), \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad (3.109)$$

où la matrice D_{w_i} est définie par $D_{w_i} = \text{diag}(\underline{w}_i)$. Cette fonction peut être ré-écrite sous une forme quadratique en développant l'équation précédente

$$\mathcal{J}(\underline{g}_i) = \frac{1}{2} \underline{g}_i H \underline{g}_i^T + u^T \underline{g}_i^T \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad (3.110)$$

où $H \triangleq 2F \cdot D_{w_i} \cdot F^T$ et $u^T \triangleq -2\underline{x}_i D_{w_i} \cdot F^T$.

L'initialisation de G consiste à estimer chacune de ses lignes séparément en minimisant

$$\min_{\underline{g}_i} \mathcal{J}(\underline{g}_i) \quad \text{s.c.} \quad \underline{g}_i^T \succeq \underline{0}, \quad \underline{x}_i^T \succeq \Phi_F^T \cdot \underline{g}_i^T \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}. \quad (3.111)$$

Les 2 contraintes stipulent que (i) chaque composante de \underline{g}_i est non-négative, (ii) la part induite par les profils forcés doit être inférieure ou égale à celle des données.

En pratique, l'équation (3.111) est résolue en utilisant les méthodes des points intérieurs pour programmation quadratique utilisées dans Matlab [107]. Cette solution permet d'initialiser les matrices de manière à pouvoir évoluer vers des solutions acceptables.

3.9 Critère d'arrêt

Dans un grand nombre d'algorithmes de NMF, les auteurs ne mentionnent pas de détail sur la condition d'arrêt des itérations. Les implémentations dans ce cas se limitent à arrêter le processus après un certains temps ou après un certains nombre d'itérations fixé à l'avance.

Certains chercheurs vérifient la variation du produit $G \cdot F$ entre deux itérations successives (3.112) ou bien la variation de G ou de F [38] entre deux itérations successives. La condition d'arrêt dans le premier cas peut s'écrire :

$$\mathcal{D}^{\alpha=1, \beta=1}((G \cdot F)^{k+1} || (G \cdot F)^k) = \left\| (G \cdot F)^k - (G \cdot F)^{k+1} \right\|_f^2 \preceq \epsilon, \quad (3.112)$$

où k est le numéro d'itération. Un autre critère d'arrêt consiste simplement à évaluer la distance

(ou la divergence) entre la matrice de donnée X et le produit $G \cdot F$ à l'itération k

$$\mathcal{D}^{\alpha=1, \beta=1}(X || (GF)^k) = \|X - (GF)^k\|_{\mathfrak{f}}^2 \preceq \epsilon. \quad (3.113)$$

Lin explique clairement dans [96], que ce type de condition d'arrêt ne garantit pas que la solution soit un point stationnaire, ce qui nous amène à considérer les conditions de KKT.

Pour la NMF, le découpage en sous-problèmes permet d'effectuer deux minimisations liées, l'une par rapport à F et l'autre par rapport à G . Le critère d'arrêt doit donc tenir compte des KKT sur F et sur G .

Si l'on considère chacun des sous-problèmes comme un cas particulier d'une optimisation sous contraintes de bornitude (la positivité étant vue comme une borne inférieure), une manière d'exprimer la condition de stationnarité d'un vecteur \underline{f}^k à l'itération k est de comparer la norme de gradients modifiés entre l'itération k et l'itération 0 [97],

$$\|\underline{\nabla}^P \mathcal{J}(\underline{f}^k)\|_{\mathfrak{f}} \preceq \epsilon \|\underline{\nabla}^P \mathcal{J}(\underline{f}^0)\|_{\mathfrak{f}} \quad (3.114)$$

où \mathcal{J} est le critère à minimiser et $\underline{\nabla}^P \mathcal{J}(f^k)$ désigne le vecteur gradient projeté défini par ses composantes :

$$(\underline{\nabla}^P \mathcal{J}(\underline{f}))_i \triangleq \nabla^P \mathcal{J}(f_i) \equiv \begin{cases} \nabla \mathcal{J}(f_i) & \text{si } l_i \preceq f_i \preceq u_i, \\ \min(0, \nabla \mathcal{J}(f_i)) & \text{si } f_i = l_i, \\ \max(0, \nabla \mathcal{J}(f_i)) & \text{si } f_i = u_i. \end{cases} \quad (3.115)$$

Dans le cadre de la NMF, la condition (3.114) s'exprime sous la forme :

$$\|\underline{\nabla}^P \mathcal{J}(G^k, F^k)\|_{\mathfrak{f}} \preceq \epsilon \|\underline{\nabla} \mathcal{J}(G^0, F^0)\|_{\mathfrak{f}} \quad (3.116)$$

où le symbole \mathfrak{f} désigne la norme de Frobenius appliquée aux matrices.

Si l'on se concentre sur les deux sous-problèmes liés de l'ANLS (2.64), la condition doit être spécifiée pour chacun des sous-problèmes à savoir,

$$\|\underline{\nabla}_F^P \mathcal{J}(G^k, F^{k+1})\|_{\mathfrak{f}} \preceq \epsilon_F, \quad (3.117)$$

$$\|\underline{\nabla}_G^P \mathcal{J}(G^{k+1}, F^{k+1})\|_{\mathfrak{f}} \preceq \epsilon_G, \quad (3.118)$$

où les seuils sont en général différents selon le sous-problème.

En conclusion, les choix de critères d'arrêt peuvent être multiples, mais le critère de vérifi-

cation de la stationnarité de Lin [96] semble être le plus utilisé⁶.

3.10 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié une paramétrisation qui tient compte des connaissances sur les profils. Cette paramétrisation a servi d'ossature tout au long de ce chapitre. Cela nous a permis de considérer la NMF sous contraintes comme équivalent à deux sous-problèmes dans lesquels nous nous sommes appuyés sur la stratégie de MM pour développer des règles de mise à jour.

Dans un premier temps, nous avons développé les règles de mise à jour pour notre matrice de profil libre pour les critères de minimisation pondérés à base de norme de Frobenius puis de divergence de KL. Ceci nous a permis de mettre en évidence les problèmes éventuels de non-stationnarité des solutions comme dans le cas des mises à jours multiplicatives.

Nous nous sommes ensuite intéressés aux cas des divergences paramétriques, en l'occurrence les divergences α et β pondérées. La paramétrisation évoquée a aussi permis de développer les règles de mises à jour dans le domaine de convexité de ces fonctions. Nous avons ensuite étendu ce travail aux divergences $\alpha\beta$ afin de fournir des règles générales de mise à jour dans le cadre de la paramétrisation évoquée. Ces règles ont permis d'unifier l'ensemble des méthodes de NMF vues dans ce chapitre. Nous y avons aussi ajouté des variantes qui modifient sensiblement le critère à minimiser. Nous avons aussi vérifié que les règles de mise à jour étaient compatibles avec les conditions de KKT qui sont les conditions incontournables pour la recherche de points stationnaires. Enfin, nous avons évoqué des points clés pour la réussite d'un algorithme de NMF, à savoir la mise en place d'un critère d'arrêt ou la question de l'initialisation.

Cependant, à ce stade, nous n'avons pas utilisé l'ensemble des connaissances a priori disponibles dans notre problématique pratique. Il convient donc dans le chapitre suivant de compléter ces informations dans la recherche de solution.

6. Mentionnons que Gillis [57] a proposé des variantes de méthodes multiplicatives dans lesquels des critères d'arrêt hybrides pour les boucles internes ont été instaurés.

Chapitre 4

Factorisation matricielle sous contraintes de bornitude et de normalisation

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons mis en avant l'intégration de contraintes de type égalité provenant de certaines composantes de profils, en particulier ceux rencontrés dans notre application environnementale. Nous avons mis l'accent sur les méthodes à base de divergence paramétrique permettant de prendre en compte les différentes modalités de points aberrants. Cependant, nous avons volontairement omis d'autres contraintes sur les profils. Dans ce chapitre, nous proposons d'intégrer toutes les nouvelles contraintes vérifiées par la matrice de profil en même temps que les contraintes précédentes. Ce chapitre s'appuie essentiellement sur les travaux publiés dans [95].

La première partie sera consacrée à la définition d'un profil qui se veut constitué d'un ensemble de proportions d'éléments par source. Cette définition induit une paramétrisation particulière des profils, en même temps qu'un ensemble de méthodes de NMF dédiées à ce que l'on appelle la normalisation des profils.

La seconde partie de ce chapitre sera dédiée à la prise en compte de contraintes de bornitude en supplément des contraintes de positivité, de forçage et de normalisation. Nous présenterons différentes variantes de ces méthodes dérivant de méthodes de NMF à base de projections. Toutes les méthodes de factorisation développées dans ce chapitre sont testées sur un jeu de données synthétiques comportant différents niveaux de bruits et font l'objet d'une comparaison.

4.2 Factorisation matricielle non négative avec contraintes de type égalité et de normalisation

Nos différents travaux ont permis de développer des règles de mise à jour pour la recherche de facteurs en présence de connaissances partielles. Nous avons omis jusqu’alors la nature normalisée de la matrice de profil. Nous proposons de formuler cette propriété et de l’exploiter dans les différents algorithmes de recherche.

Notons par ailleurs que d’autres stratégies auraient été possible comme par exemple d’étendre une approche de NMF à contrainte de somme à 1 [87] au cadre informé présenté dans le chapitre 3.

4.2.1 Présentation des contraintes vérifiées par un profil normalisé

La contrainte de normalisation a déjà été évoquée dans le chapitre 1. Elle revient à considérer qu’un profil de source exprimé par une ligne de la matrice F contient des proportions de différentes espèces chimiques dont la somme est égale à 1, ce qui s’écrit :

$$\sum_{j=1}^m f_{ij} = 1, \quad \forall i = 1, \dots, p. \quad (4.1)$$

soit d’un point de vue matriciel :

$$F_{p \times m} \cdot \mathbf{1}_{m \times m} = \mathbf{1}_{p \times m}. \quad (4.2)$$

La relation approchée $X \approx G \cdot F$ permet d’écrire une contrainte approchée vérifiée par la matrice de contribution, c.-à-d.,

$$G_{n \times p} \cdot \mathbf{1}_{p \times m} \approx X_{n \times m} \cdot \mathbf{1}_{m \times m}. \quad (4.3)$$

Cette relation établit que la somme d’une ligne de la matrice de contribution est approximativement égale à la somme d’une ligne de la matrice de données. Dans [87] au contraire, cette contrainte est vue comme une contrainte stricte, dont la rigueur interdit en fait la présence de points aberrants. Nous ne l’introduirons donc pas dans nos algorithmes.

Dans les sections suivantes, nous proposons d’introduire la contrainte de normalisation (4.2) dans la factorisation NMF à base de divergences $\alpha\beta$.

4.2.2 Présentation du problème avec normalisation

Pour la suite du document, nous adoptons la notation $\Omega^E \triangleq \Omega$ et $\Phi^E \triangleq \Phi$ qui sont les matrices définies en (3.2) et (3.4). La méthode de NMF sous contraintes consiste à trouver une factorisation approchée des données sous la forme $X \approx G \cdot F$ au sens de la divergence paramétrique tout en respectant l'ensemble des contraintes ci-dessous :

$$\min_{G,F} \mathcal{D}_W^{\alpha,\beta}(X||G \cdot F) \text{ s.c. } \begin{cases} F \succeq 0, G \succeq 0, \\ F \circ \Omega^E = \Phi^E, \\ F \cdot 1_{mm} = 1_{p \times m}. \end{cases} \quad (4.4)$$

En utilisant la paramétrisation des contraintes égalités (3.13) et l'équation (3.8) présentées dans le chapitre 3, l'équation (4.4) peut s'écrire sous la forme :

$$\min_{G,\Delta F} \mathcal{D}_W^{\alpha,\beta} \left(X || G \cdot (\Omega^E \circ \Phi^E) + G \cdot (\overline{\Omega}^E \circ \Delta F) \right) \text{ s.c. } \begin{cases} \Delta F \succeq 0, G \succeq 0, \\ \Delta F \cdot 1_{mm} = 1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{mm}. \end{cases} \quad (4.5)$$

Il est aussi possible de formuler une autre minimisation qui s'inspire des variantes introduites dans le chapitre précédent 3 :

$$\min_{G,\Delta F} \mathcal{D}_W^{\alpha,\beta} \left(X - G\Phi^E || G \cdot (\overline{\Omega}^E \circ \Delta F) \right) \text{ s.c. } \begin{cases} \Delta F \succeq 0, G \succeq 0, \\ \Delta F \cdot 1_{mm} = 1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{mm}. \end{cases} \quad (4.6)$$

Ces équations (4.5) et (4.6) constitueront les deux formulations envisagées du problème de NMF avec profils normalisés sous contrainte de type forçage de valeurs de F .

4.2.3 Présentation de l'algorithme en deux étapes

Nous proposons une approche séquentielle avec une première étape de recherche de profil sans normalisation suivie d'une deuxième étape de normalisation. La normalisation utilisée est la mise à l'échelle du profil (pour vérifier (4.2)), en même temps que celle de la matrice de contribution G , afin de préserver le produit $G \cdot F$ inchangé. Cela donne lieu à l'algorithme 1. Cet algorithme peut être écrit de manière plus synthétique. Nous allons dans la section suivante en proposer une écriture condensée qui réunit la mise à jour et la normalisation.

Algorithm 1 NMF sous contraintes de forçage et de normalisation

Lire Φ et Ω .

Initialiser G et F

Normaliser F et G

TantQue le critère d'arrêt n'est pas atteint **Faire**

 Contrôler la positivité de $(X - G\Phi)$ et projeter sur l'espace positif le cas échéant

 Rechercher F à G fixé selon (3.103) ou (3.105)

 Rechercher G à F fixé selon (3.100)

 Normaliser F et G

FinTantQue

4.2.4 Mise à jour en une seule étape

L'algorithme 1 peut être synthétisé en la recherche de la matrice de profil en une seule étape. Pour cela, il convient de donner une paramétrisation qui respecte la somme à 1 des profils. Lantéry *et al.* [87] proposent un changement de variables qui respecte la normalisation :

$$\tilde{F}_{ij} = \frac{F_{ij}}{\sum_{j=1}^m F_{ij}}. \quad (4.7)$$

L'écriture matricielle de l'équation (4.7) peut s'écrire sous forme matricielle

$$\tilde{F} = \frac{F}{F \cdot \mathbf{1}_{mm}}. \quad (4.8)$$

Le terme au dénominateur correspond en fait à un coefficient de mise à l'échelle pour chaque ligne de la matrice F . Cette écriture permet une normalisation des lignes de F tandis que la version symétrique permet de mettre à l'échelle les colonnes de G du coefficient d'échelle inverse, c.-à-d.,

$$\tilde{G} = G \circ [\mathbf{1}_{nm} \cdot F^T]. \quad (4.9)$$

Dans toute la suite du mémoire, nous conservons ces conventions où la matrice \tilde{F} est normalisée et \tilde{G} corrigé par un facteur d'échelle. Nous pouvons exprimer le produit $\tilde{G} \cdot \tilde{F}$ en utilisant les deux paramétrisations précédentes, ce qui nous permet d'obtenir

$$\tilde{G} \cdot \tilde{F} = \frac{F}{F \cdot \mathbf{1}_{mm}} \cdot (G \circ [\mathbf{1}_{nm} \cdot F^T]), \quad (4.10)$$

Soit pour le terme général :

$$(\tilde{G} \cdot \tilde{F})_{ij} = \sum_k \frac{G_{ik}}{\sum_l F_{kl}} \cdot F_{ki} \cdot \sum_l F_{kl} = \sum_k G_{ik} F_{ki} = (G \cdot F)_{ij}. \quad (4.11)$$

4.2. Factorisation matricielle non négative avec contraintes de type égalité et de normalisation

Cela signifie que le produit $G \cdot F$ est conservé même si l'on considère une expression normalisée. Comme le critère à minimiser dépend uniquement de ce produit, cela permet d'assurer la décroissance suffisante du critère à chaque itération, identique à un cas non-normalisé. Nous proposons donc de conserver les expressions trouvées dans ce chapitre pour les matrices de contributions et de profils et de leur appliquer les paramétrisations (4.8) et (4.9). Malheureusement, cette expression (4.8) ne préserve pas les valeurs forcées de la matrice de profil, dès lors que la mise à l'échelle s'applique. Conscient de cet inconvénient, nous préconisons néanmoins d'effectuer la recherche du numérateur en référence aux équations (3.97) et (3.100) en partant de la connaissance d'un couple de matrices issues d'un profil normalisé $(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$. Pour des raisons de notations, définissons $R_F^{\alpha,\beta}$ qui désigne un masque dont la valeur dépend du problème abordé.

$$R_F^{\alpha,\beta} \triangleq \begin{cases} M_F^{\alpha,\beta} & \text{pour le problème (4.5),} \\ N_F^{\alpha,\beta} & \text{pour le problème (4.6),} \end{cases} \quad (4.12)$$

où $M_F^{\alpha,\beta}$ est définie dans l'équation (3.99) et $N_F^{\alpha,\beta}$ est définie dans l'équation (3.105).

Ceci permet d'écrire :

$$\tilde{F}^{k+1} = \frac{\Omega^E \circ \Phi^E + \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\Omega^E \circ \Phi^E + \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{mm}}, \quad (4.13)$$

où la quantité ΔF^k est définie par $\Delta F^k \triangleq \tilde{F}^k - \Phi^E$. Cette quantité est multipliée terme à terme par $\overline{\Omega}^E$, ce qui induit

$$\Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E = \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E. \quad (4.14)$$

Ceci donne lieu à une mise à jour plus simple

$$\tilde{F}^{k+1} = \frac{\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{mm}}. \quad (4.15)$$

Cette normalisation est appelée pour la suite la normalisation 1 puisqu'elle normalise un profil sans tenir compte des valeurs forcées.

Il est aussi à noter que la matrice $R_F^{\alpha,\beta}$ se calcule en les matrices $(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$. Par déduction, la matrice F^{k+1} est non-normalisée et s'obtient par le numérateur de (4.13)

$$F^{k+1} = \tilde{F}^{k+1} \circ \left(\left[\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{mm} \right). \quad (4.16)$$

Le calcul de \tilde{G}^{k+1} s'appuie sur la règle de mise à jour de la NMF pondérée non-contrainte

complétée par un terme de mise à l'échelle

$$\tilde{G}^{k+1} = \tilde{G}^k \circ M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1}) \circ \left(1_{nm} \cdot \left[\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \bar{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right]^T \right), \quad (4.17)$$

où la matrice $M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1})$ est issue de l'expression (3.100) de la NMF par divergence $\alpha\beta$ pondérée et est rappelée ici :

$$M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1}) = \left[\frac{(W \circ X^\alpha \circ (\tilde{G}^k F^{k+1})^{\beta-1})(F^{k+1})^T}{(W \circ (\tilde{G}^k F^{k+1})^{\alpha+\beta-1})(F^{k+1})^T} \right]^{\left(\frac{1}{\alpha}\right)}. \quad (4.18)$$

Ces mises à jours correspondent à une méthode à base de combinaison de méthode multiplicative et de projection, considérant que la normalisation constitue une projection dans un sous-espace particulier.

4.2.5 Mise à jour avec une normalisation des éléments libres des profils

Nous avons déjà évoqué une paramétrisation intéressante du problème normalisé à travers l'équation (4.8) où finalement les éléments d'un profil de source s'écrivent comme des proportions dont la somme vaut 1. Toutefois, la paramétrisation (3.13) n'est pas compatible avec les contraintes (4.2), ce qui requiert l'usage d'une paramétrisation nouvelle. De même, la paramétrisation (4.8) n'est pas compatible avec (3.4). Il faut donc tenir compte de la présence des valeurs forcées du profil et normaliser les éléments libres de F , soit :

$$\tilde{F} \leftarrow \Omega^E \circ \Phi^E + \frac{\Delta F \circ \bar{\Omega}^E}{(\Delta F \circ \bar{\Omega}^E) \cdot 1_{mm}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{mm}), \quad (4.19)$$

où

- $\Omega^E \circ \Phi^E$ exprime les termes de forçage,
- $(1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{mm})$ désigne la matrice contenant la somme des éléments libres pour chaque source,
- $\frac{\Delta F \circ \bar{\Omega}^E}{(\Delta F \circ \bar{\Omega}^E) \cdot 1_{mm}}$ représente les différentes proportions des profils libres.

On vérifie aisément que la propriété (4.2) de normalisation est vérifiée. Par ailleurs, la propriété de conservation (3.4) des valeurs forcées est aussi vérifiée. Il faut aussi remarquer que la matrice ΔF doit demeurer positive. Nous proposons ainsi des mises à jours qui correspondent à cette paramétrisation. Ainsi nous proposons de rechercher ΔF^{k+1} qui se fonde sur les mises à jour non-normalisées évoquées dans le chapitre précédent.

4.2. Factorisation matricielle non négative avec contraintes de type égalité et de normalisation

Ainsi, la matrice des profils libres obtenue dans le chapitre précédent s'écrit

$$\Delta F^{k+1} = \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}. \quad (4.20)$$

Ici, nous supposons que nous disposons à l'itération k d'une matrice de profils libres normalisés notée $\Delta \tilde{F}^k$. La mise à jour des profils libres non normalisés conduit à une procédure similaire :

$$\Delta F^{k+1} = \Delta \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}. \quad (4.21)$$

La matrice de profils libres obtenue n'étant pas normalisée, sa normalisation s'écrit :

$$\Delta \tilde{F}^{k+1} = \frac{\overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \circ \Delta \tilde{F}^k}{\left[\overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \circ \Delta \tilde{F}^k \right]_{1mm}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{mm}). \quad (4.22)$$

Cette normalisation est appelée dans nos tests futurs la normalisation 2, elle normalise uniquement les profils libres sans modifier les composantes des profils forcés :

$$\tilde{F}^{k+1} = \Omega^E \circ \Phi^E + \frac{\overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \circ \Delta \tilde{F}^k}{\left[\overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \circ \Delta \tilde{F}^k \right]_{1mm}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{mm}). \quad (4.23)$$

En remarquant que $\Delta \tilde{F}^k = \tilde{F}^k - \Phi^E$, on peut simplifier l'expression précédente en utilisant uniquement \tilde{F}^k

$$\tilde{F}^{k+1} = \Omega^E \circ \Phi^E + \frac{\overline{\Omega}^E \circ \tilde{F}^k \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\overline{\Omega}^E \circ \tilde{F}^k \circ R_F^{\alpha,\beta} \right]_{1mm}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{mm}). \quad (4.24)$$

Dans cette approche, la matrice de contribution ne requiert pas une correction par un facteur d'échelle puisque seules les valeurs libres sont corrigées. L'intérêt de la normalisation 2 est qu'elle ne modifie pas les composantes des profils forcés. Nous avons ainsi l'assurance de retrouver une solution où les contraintes égalité sont parfaitement respectées.

Notons toutefois que cette méthode ne garantit pas une descente le long de la plus grande pente, puisque la quantité ΔF dans l'équation (4.19) intervient à la fois au numérateur et au dénominateur. Dans les premières itérations où la normalisation a beaucoup d'effet, il est possible que la direction de descente ne soit pas judicieuse.

Enfin, nous pouvons aussi faire remarquer que la contrainte de normalisation (4.3) de la matrice de contribution G n'a pas été appliquée puisqu'il s'agit d'une contrainte déduite de la factorisation approchée des données.

Tableau 4.1 – Les différentes méthodes avec normalisation

Acronyme	Règle sur F	Règle sur G	Masque sur F	Masque sur G
$\alpha\beta$ -N ₁ -CWNMF-R	Eq (4.15)	Eq (4.46)	$M_F^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1})$
$\alpha\beta$ -N ₁ -CWNMF	Eq (4.15)	Eq (4.46)	$N_F^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1})$
$\alpha\beta$ -N ₂ -CWNMF-R	Eq (4.24)	Eq (4.50)	$M_F^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^{k+1})$
$\alpha\beta$ -N ₂ -CWNMF	Eq (4.24)	Eq (4.50)	$N_F^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^{k+1})$

4.2.6 Description des algorithmes et leurs acronymes

Nous avons décrit dans les paragraphes précédents un ensemble de méthodes dédiées à la résolution des problèmes (4.5) et (4.6).

Nous décrivons dans le tableau 4.1 les méthodes correspondant à celles développées dans les paragraphes précédents. Nous y trouvons les règles de mise à jour ainsi que l'acronyme que nous utiliserons lors de nos expérimentations. Ils sont tous de la forme " $\alpha\beta$ -N-CWNMF(-R)" pour *Normalized and Constrained Weighted $\alpha\beta$ -NMF (using Residuals)* en anglais. En pratique, compte tenu du fait que 2 normalisations sont proposées dans ce travail, nous les distinguons avec N₁ et N₂.

Ces différentes méthodes seront donc expérimentées dans nos tests.

4.3 NMF sous contraintes de bornitude

4.3.1 Introduction

Dans la section 4.2, nous recherchions des profils respectant uniquement les contraintes de type égalité et la notion de normalisation. Dans un certains nombre d'applications et plus particulièrement dans la séparation de sources de pollution de l'air, des informations supplémentaires sont fournies par les experts et peuvent informer la méthode de factorisation et la guider vers un résultat plus proche de la réalité. Nous nous intéressons donc à des contraintes de bornitude appliquées à certains éléments de la matrice de profil F .

L'introduction des contraintes de bornitude s'effectue en étroite relation avec les contraintes égalité. L'ajout de contraintes de bornitude est envisagée aux positions où ne figurent aucune contrainte égalité afin d'éviter les conflits. La contrainte de bornitude est préconisée pour spécifier un ordre de grandeur d'un composé chimique pour une source donnée. Pour développer ce travail, nous nous sommes appuyés sur les travaux de Lin [96] qui développent des approches à base de gradients projetés. L'intérêt majeur des contraintes inégalité est de pouvoir guider la

recherche dans un chemin compatible avec les profils recherchés. Cela se traduit sous la forme d'une étape de projection sur le domaine admissible des contraintes. Nous suggérons de développer des contraintes de bornitude sous le même principe que la prise en compte des contraintes de forçage.

4.3.2 Définition du problème avec contraintes de bornitude

Nous introduisons Ω^I une matrice binaire de taille $p \times m$ qui indique la présence ou l'absence de contraintes de bornitude sur les éléments f_{ij} de la matrice F . De par la similitude avec Ω^E , nous disposons en parallèle leur définition⁷.

$$\omega_{ij}^E = \begin{cases} 1 & \text{si } f_{ij} \text{ est connu,} \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad \omega_{ij}^I = \begin{cases} 1 & \text{si } f_{ij} \text{ est borné,} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.25)$$

Nous introduisons aussi les matrices binaires $\overline{\Omega}^E$ et $\overline{\Omega}^I$ de taille $p \times m$ définies par :

$$\overline{\Omega}^E \triangleq 1_{p \times m} - \Omega^E, \quad (4.26)$$

$$\overline{\Omega}^I \triangleq 1_{p \times m} - \Omega^I. \quad (4.27)$$

Par construction, nous n'avons pas de contrainte de bornitude là où existent des contraintes égalité. Ainsi, il en résulte

$$\Omega^E \circ \Omega^I = 0. \quad (4.28)$$

Il apparaît aussi que les endroits libres de contraintes égalité exprimés par $\overline{\Omega}^E$ sont potentiellement disponibles pour les contraintes de bornitude. Chaque composante de la matrice binaire Ω^I est donc inférieure ou égale à son correspondant dans $\overline{\Omega}^E$, ce qui se traduit par

$$\Omega^I \preceq \overline{\Omega}^E. \quad (4.29)$$

De manière équivalente, nous pouvons exprimer une condition sur les contraintes de bornitude aux endroits des paramètres libres, à savoir,

$$\Omega^I \circ \overline{\Omega}^E = \Omega^I. \quad (4.30)$$

Soit Φ^E la matrice des valeurs contraintes de taille $p \times m$

$$\Phi^E \triangleq F \circ \Omega^E. \quad (4.31)$$

7. L'exposant E ou I indique en fait le type d'information apportée.

Notons aussi que φ_{ij}^E le (i, j) ème élément de Φ^E est égal à zéro si $\omega_{ij}^E = 0$.

Par conséquent, il est possible d'écrire :

$$\Phi^E \circ \Omega^E = \Phi^E, \quad \Phi^E \circ \overline{\Omega}^E = 0. \quad (4.32)$$

De la même façon que pour la définition des contraintes de forçage, nous introduisons les matrices Φ^{I+} et Φ^{I-} de taille $p \times m$ et qui représentent respectivement les bornes supérieures et inférieures des contraintes. Ces matrices vérifient

$$\Phi^{I-} \preceq F \circ \Omega^I \preceq \Phi^{I+}. \quad (4.33)$$

En définitive, nous disposons de 5 matrices définissant les connaissances a priori concernant les profils.

La méthode de NMF informée par les contraintes de bornitude consiste à rajouter la contrainte (4.33) à l'ensemble des contraintes présentées en (4.4) pour la NMF sous contraintes de forçage et de somme à 1,

$$\min_{G, F} \mathcal{D}_W^{\alpha, \beta} (X || G \cdot F) \text{ s.c. } \begin{cases} F \succeq 0, G \succeq 0, \\ F \circ \Omega^E = \Phi^E, \\ \Phi^{I-} \preceq F \circ \Omega^I \preceq \Phi^{I+}, \\ F \cdot 1_{m \times m} = 1_{p \times m}. \end{cases} \quad (4.34)$$

Ainsi, l'équation (4.5) peut aussi être formulée pour tenir compte des contraintes de bornitude et s'écrire sous la forme :

$$\min_{G, \Delta F} \mathcal{D}_W^{\alpha, \beta} \left(X || G \cdot (\Omega^E \circ \Phi^E) + G \cdot (\overline{\Omega}^E \circ \Delta F) \right) \text{ s.c. } \begin{cases} \Delta F \succeq 0, G \succeq 0, \\ \Phi^{I-} \preceq \Delta F \circ \Omega^I \preceq \Phi^{I+}, \\ \Delta F \cdot 1_{m \times m} = 1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{m \times m}. \end{cases} \quad (4.35)$$

Il est aussi possible de formuler une autre minimisation qui s'inspire de la variante (4.6)

$$\min_{G, \Delta F} D_W^{\alpha, \beta} \left(X - G \Phi^E || G \cdot (\overline{\Omega}^E \circ \Delta F) \right) \text{ s.c. } \begin{cases} \Delta F \succeq 0, G \succeq 0, \\ \Phi^{I-} \preceq \Delta F \circ \Omega^I \preceq \Phi^{I+}, \\ \Delta F \cdot 1_{m \times m} = 1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{m \times m}. \end{cases} \quad (4.36)$$

Les deux équations (4.35) et (4.36) sont deux formulations différentes pour le problème de NMF avec profils normalisés sous contrainte de bornitude qui étendent les approches de la section 4.2 en complétant par des contraintes de bornitude.

4.3.3 Présentation des aspects séquentiels de la résolution du problème

Les problèmes (4.35) et (4.36) peuvent être abordés en premier lieu uniquement sous contrainte de forçage des profils. Ceci nous amène à considérer les mises à jours proposées dans le chapitre 3. Nous pouvons ensuite appliquer les opérations de projection sur l'espace des contraintes de manière séquentielle. Ainsi, la conjugaison des contraintes de normalisation et de bornitude pourra s'appliquer dans l'ordre choisi. Les contraintes de bornitude agissent comme des barrières de sécurité afin d'empêcher les directions non réalistes. La méthode pondérée et sous contraintes de bornitudes que nous proposons permet de fixer des intervalles autorisés pour certains éléments de la matrice de profil F afin d'interdire les mauvaises directions dans la recherche de profils. Dans le premier jeu de méthodes, nous proposons donc de prendre en compte la contrainte de bornitude puis la contrainte de normalisation. Dans un second jeu de méthodes, nous préconisons de considérer la normalisation puis la contrainte de bornitude.

4.3.3.1 Méthodes de NMF sous contraintes de valeurs, de bornitude et de normalisation.

L'objet de ce paragraphe est de présenter formellement les règles de mise à jour en partant des acquis du chapitre précédent.

La première étape d'estimation de la matrice F a été abordée dans le chapitre 3. Nous avons établi dans les équations (3.97) et (3.103) les expressions de mise à jour de la matrice F pour la résolution des problèmes (4.5) et (4.6) que nous rappelons

$$\Delta F^{k+1} = \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}, \quad (4.37)$$

ce qui aboutit à,

$$F^{k+1} = \Phi^E \circ \Omega^E + \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F. \quad (4.38)$$

$R_F^{\alpha,\beta}$ désigne un masque dont la valeur dépend du problème abordé,

$$R_F^{\alpha,\beta} \triangleq \begin{cases} M_F^{\alpha,\beta} & \text{pour le problème(4.36),} \\ N_F^{\alpha,\beta} & \text{pour le problème(4.35),} \end{cases} \quad (4.39)$$

où $M_F^{\alpha,\beta}$ est définie dans l'équation (3.99) et $N_F^{\alpha,\beta}$ est définie dans l'équation (3.105).

En utilisant la propriété $\Omega^I + \overline{\Omega}^I = 1_{p \times m}$, l'équation (4.38) peut se diviser en composantes

forcées, en composantes complètement libres et composantes bornées

$$F^{k+1} = \Phi^E \circ \Omega^E + \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F + \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \Omega^I \circ R_F. \quad (4.40)$$

L'application des contraintes de bornitudes consiste à projeter les termes dont les valeurs sortent des intervalles fixés, sur les bornes les plus proches. La matrice de profil F (4.41) obtenue vérifie les différentes contraintes de type égalité et inégalité mais n'est pas de somme 1. La règle de mise à jour avant normalisation s'écrit donc

$$F^{k+1} = \Phi^E \circ \Omega^E + \Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F + \mathcal{P}_{\Omega^I} \left(\Delta F^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F \right), \quad (4.41)$$

où $\mathcal{P}_{\Omega^I}(\cdot)$ est l'opérateur de projection défini par,

$$\mathcal{P}_{\Omega^I}(U) \triangleq \begin{cases} \Omega^I \circ \Phi^{I-} & \text{si } \Omega^I \circ U \preceq \Phi^{I-}, \\ \Omega^I \circ \Phi^{I+} & \text{si } \Omega^I \circ U \succeq \Phi^{I+}, \\ \Omega^I \circ U & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.42)$$

En utilisant la propriété (4.14), nous pouvons simplifier l'écriture en faisant appel au profil normalisé à l'itération k , noté dans la suite du document \tilde{F}^k .

$$F^{k+1} = \Phi^E \circ \Omega^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F + P_{\Omega^I} \left(\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F \right). \quad (4.43)$$

La dernière étape est celle de la normalisation de la matrice F^{k+1} en utilisant les procédures de normalisation précédemment abordées. La première normalisation s'effectue sans attention aux valeurs forcées. Celle-ci conduit à

$$\tilde{F}^{k+1} = \frac{F^{k+1}}{F^{k+1} \cdot 1_{m \times m}}. \quad (4.44)$$

L'expression de la mise à jour condensée en une seule étape s'écrit alors

$$\tilde{F}^{k+1} = \frac{\Phi^E \circ \Omega^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F + P_{\Omega^I}(\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F)}{\left[\Phi^E \circ \Omega^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F + P_{\Omega^I}(\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F) \right] \cdot 1_{m \times m}}. \quad (4.45)$$

L'intérêt de cette écriture est qu'elle ne fait pas apparaître de variable intermédiaire. La mise à jour de la matrice de contribution suit donc la règle (4.17), puisque la mise à jour de la matrice

de profil suit un schéma similaire. Voici son expression littérale :

$$\tilde{G}^{k+1} = \tilde{G}^k \circ M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1}) \circ \left(1_{nm} \left[\Phi^E \circ \Omega^E + \tilde{F}^k \circ \bar{\Omega}^E \circ \bar{\Omega}^I \circ R_F + P_{\Omega^I}(\tilde{F}^k \circ \bar{\Omega}^E \circ R_F) \right]^T \right). \quad (4.46)$$

F^{k+1} suit l'équation (4.43) et \tilde{G}^{k+1} correspond à une contribution corrigée suite à la normalisation. La mise à jour s'écrit donc

$$M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1}) = \left[\frac{(W \circ X^\alpha \circ (\tilde{G}^k F^{k+1})^{\beta-1})(F^{k+1})^T}{(W \circ (\tilde{G}^k F^{k+1})^{\alpha+\beta-1})(F^{k+1})^T} \right]^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (4.47)$$

Les deux équations (4.45) et (4.46) constituent une méthode possible de résolution du problème posé dont l'acronyme est $\alpha\beta$ -BN₁-CWNMF, référencé dans le tableau 4.2.

Une autre option consiste à appliquer la seconde normalisation à la matrice F^{k+1} obtenue dans (4.43) qui préserve les valeurs forcées, c.-à-d.,

$$\tilde{F}^{k+1} = \Phi^E \circ \Omega^E + \frac{F^{k+1} - \Phi^E \circ \Omega^E}{(F^{k+1} - \Phi^E \circ \Omega^E) \cdot 1_{m \times m}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{m \times m}), \quad (4.48)$$

où F^{k+1} est obtenu par l'équation (4.43). Cette dernière équation se simplifie en remplaçant la matrice $F^{k+1} - \Phi^E \circ \Omega^E$ par sa valeur issue de (4.43). Ceci aboutit à,

$$\tilde{F}^{k+1} = \Phi^E \circ \Omega^E + \frac{\tilde{F}^k \circ \bar{\Omega}^E \circ \bar{\Omega}^I \circ R_F + P_{\Omega^I}(\tilde{F}^k \circ \bar{\Omega}^E \circ R_F)}{\left(\tilde{F}^k \circ \bar{\Omega}^E \circ \bar{\Omega}^I \circ R_F + P_{\Omega^I}(\tilde{F}^k \circ \bar{\Omega}^E \circ R_F) \right) \cdot 1_{m \times m}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{m \times m}). \quad (4.49)$$

Ceci permet en outre de conserver des relations relatives uniquement aux matrices de profils normalisés.

La règle de mise à jour de la matrice de contribution n'est pas soumise à des contraintes, elle suit donc l'équation multiplicative issue de (3.100), à savoir,

$$G^{k+1} = G^k \circ M_G^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^{k+1}), \quad (4.50)$$

où le masque est défini par :

$$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^{k+1}) \triangleq \left[\frac{\left(W \circ X^\alpha \circ (G^k \tilde{F}^{k+1})^{\beta-1} \right) (\tilde{F}^{k+1})^T}{(W \circ (G^k \tilde{F}^{k+1})^{\alpha+\beta-1}) (\tilde{F}^{k+1})^T} \right]^{\frac{1}{\alpha}}. \quad (4.51)$$

Les équations (4.49) et (4.50) constituent une seconde manière de résoudre les problèmes (4.35)

et (4.36). Cette méthode sera dénommée $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF dans le tableau 4.2.

4.3.3.2 Méthodes de NMF sous contraintes de valeurs, de normalisation et de bornitude :

Nous proposons dans ce paragraphe des variantes des méthodes précédentes dans lesquelles les contraintes de bornitude interviennent en dernière phase. L'approche consiste donc à appliquer l'opérateur de projection \mathcal{P}_{Ω^I} après la recherche de profils respectant les contraintes de forçage et de normalisation. Les règles de mise à jour avec contraintes de forçage et normalisation simultanée ont été développées dans le paragraphe adéquat et ont conduit à deux règles de mise à jour différentes suivant la normalisation adoptée. Nous partons pour cela de l'équation (4.15) que nous réécrivons de manière à intégrer le masque de bornitude :

$$\tilde{F}^{k+1} = \frac{\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{m \times m}} + \frac{\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \Omega^I \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{m \times m}}. \quad (4.52)$$

L'application des contraintes de bornitude rend le profil de manière générale non normalisé, ce qui nous conduit noter la matrice de profil sous la forme F^{k+1} . L'expression de mise à jour du profil se déduit en appliquant la projection sur le domaine des bornes connues :

$$F^{k+1} \leftarrow \frac{\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{m \times m}} + \mathcal{P}_{\Omega^I} \left(\frac{\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\Omega^E \circ \Phi^E + \tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{m \times m}} \right). \quad (4.53)$$

La mise à jour de la matrice de contribution se base sur l'expression (4.50), par contre, nous ne disposons pas d'une matrice de profil normalisé. Ainsi, la mise à jour s'écrit :

$$G^{k+1} = G^k \circ M_G^{\alpha,\beta}(G^k, F^{k+1}). \quad (4.54)$$

Les deux équations (4.53) et (4.54) définissent la méthode $\alpha\beta$ -N₁B-CWNMF dont l'acronyme est rappelé dans le tableau 4.2. Une alternative à la méthode précédente est d'utiliser l'équation (4.24) et de la décomposer en terme dépourvus de contrainte de bornitude et de terme

soumis éventuellement à bornitude.

$$\tilde{F}^{k+1} = \Omega^E \circ \Phi^E + \left(\frac{\overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ \tilde{F}^k \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\overline{\Omega}^E \circ \tilde{F}^k \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{m \times m}} + \frac{\Omega^I \circ \tilde{F}^k \circ R_F^{\alpha,\beta}}{\left[\overline{\Omega}^E \circ \tilde{F}^k \circ R_F^{\alpha,\beta} \right] 1_{m \times m}} \right) \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{m \times m}) \quad (4.55)$$

L'application de l'opérateur de bornitude conduit à l'expression de mise à jour de la matrice de profil non-normalisée F^{k+1} :

$$F^{k+1} = \Omega^E \circ \Phi^E + \frac{\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ \overline{\Omega}^I \circ R_F^{\alpha,\beta}}{(\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}) \cdot 1_{m \times m}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{m \times m}) + P \Omega^I \left(\frac{\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}}{(\tilde{F}^k \circ \overline{\Omega}^E \circ R_F^{\alpha,\beta}) \cdot 1_{m \times m}} \circ (1_{p \times m} - \Phi^E \cdot 1_{m \times m}) \right). \quad (4.56)$$

La mise à jour de la matrice de contribution est la même que dans l'équation (4.54). Cette dernière équation et l'équation (4.56) constituent une méthode dont l'acronyme $\alpha\beta$ -N₂B-CWNMF est proposée dans le tableau 4.2. En définitive, toutes ces méthodes présentent néanmoins l'inconvénient de perdre les attributs précédents recherchés pour la solution au cours des itérations. Cependant, en pratique, la convergence vers un point limite assure qu'asymptotiquement la matrice limite préserve ces attributs recherchés.

Avant de s'intéresser aux différentes expérimentations, il semble utile de présenter un résumé des différentes méthodes.

4.3.3.3 Description des algorithmes et leurs acronymes

Nous avons décrit dans les paragraphes précédents un ensemble de méthodes dédiées à la résolution des problèmes (4.35) et (4.36).

Nous décrivons dans le tableau 4.2 les 8 méthodes correspondant à celles développées dans les paragraphes précédents. Nous y trouvons les règles de mise à jour ainsi que l'acronyme que nous utiliserons lors de nos expérimentations.

Le -R signifie la version de la méthode appliquée aux résidus. Le N qualifie le type de la normalisation choisi tandis que le B se rapporte à l'usage de la bornitude et le C se rapporte à la contrainte de forçage de profils.

Les deux opérations de projection sont désignées par la normalisation (N_x) et la bornitude. Dans le tableau 4.2, le sigle à gauche juste avant -CWNMF correspond à la dernière opération de projection. Ainsi, BN₁ signifie que la normalisation 1 a été appliquée en dernier précédée des autres contraintes. Ces différentes méthodes seront donc expérimentées dans nos tests.

Tableau 4.2 – Les différentes méthodes avec bornes

Acronyme	Règle sur F	Règle sur G	Masque sur F	Masque sur G
$\alpha\beta$ -BN ₁ -CWNMF-R	Equ (4.45)	Equ (4.46)	$M_F^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1})$
$\alpha\beta$ -BN ₁ -CWNMF	Equ (4.45)	Equ (4.46)	$N_F^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, F^{k+1})$
$\alpha\beta$ -BN ₂ -CWNMF-R	Equ (4.49)	Equ (4.50)	$M_F^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^{k+1})$
$\alpha\beta$ -BN ₂ -CWNMF	Equ (4.49)	Equ (4.50)	$N_F^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^{k+1})$
$\alpha\beta$ -N ₁ B-CWNMF-R	Equ (4.53)	Equ (4.54)	$M_F^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, F^{k+1})$
$\alpha\beta$ -N ₁ B-CWNMF	Equ (4.53)	Equ (4.54)	$N_F^{\alpha,\beta}(\tilde{G}^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, F^{k+1})$
$\alpha\beta$ -N ₂ B-CWNMF-R	Equ (4.56)	Equ (4.54)	$M_F^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, F^{k+1})$
$\alpha\beta$ -N ₂ B-CWNMF	Equ (4.56)	Equ (4.54)	$N_F^{\alpha,\beta}(G^k, \tilde{F}^k)$	$M_G^{\alpha,\beta}(G^k, F^{k+1})$

4.4 Estimation de la qualité de la séparation

Afin de caractériser la qualité de nos résultats, il est souhaitable de proposer des indicateurs de performance des données entrantes ainsi que des signaux sortants.

4.4.1 Rapport Signal à Bruit des données

Nous proposons d'introduire le rapport Signal à Bruit global (SNR pour *Signal-to-Noise Ratio* en anglais) comme une moyenne des rapports signal à bruit pris en dB pour chaque espèce chimique. Cette définition est aussi celle qui est adoptée dans [115]. Le SNR se définit par,

$$\text{SNR}(X) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \text{SNR}_j(\underline{x}_j) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m 10 \log_{10} \frac{\sum_{i=1}^n x_{ij}^2}{\sum_{i=1}^n e_{ij}^2}, \quad (4.57)$$

avec x_{ij} les données non-bruïées et e_{ij} le bruit instantané. Cet indicateur, classiquement utilisé dans la littérature, permet de qualifier le bruit sur les données.

4.4.2 Évaluation de la qualité d'estimation

De nombreux indicateurs sont disponibles dans la littérature afin d'évaluer les performances des différentes méthodes de séparation de sources [103]. Nous ne citons ici que les plus courants utilisant G ou F ⁸.

8. Certains indicateurs se basent aussi sur l'inverse de la matrice de mélange qui n'est pas estimée dans notre cas .

4.4.2.1 Rapport signal sur interférence

Le rapport signal sur interférence (SIR pour *Signal-to-Interference Ratio* en anglais) est le quotient entre la puissance d'un signal et les différentes interférences qu'il peut subir. Couramment utilisé dans le domaine de la séparation de sources, le SIR_j se calcule en premier lieu sur chaque source j . Il mesure le niveau de distorsion dû à l'interférence résiduelle de n échantillons d'une source :

$$SIR_j = 10 \log_{10} \left(\frac{\sum_{k=1}^n s_{jk}^2}{\sum_{k=1}^n (s_{jk} - \hat{s}_{jk})^2} \right) \quad \forall j \in \{1 \dots p\}. \quad (4.58)$$

Un indicateur global SIR est obtenu en moyennant chacun des SIR_j des sources, c.-à-d.,

$$SIR = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p SIR_j. \quad (4.59)$$

Mansour [103] évoque plutôt un indice de diaphonie qui, en fait, est égal à l'opposé du SIR défini ci-dessus. Deville [47] propose une indice de facteur d'amélioration du SIR, noté SIRI, qui évalue l'amélioration entre les données entrantes et sortantes. Dans [62], l'auteur montre en pratique que le SIR n'est pas toujours adapté pour les données fortement corrélées. Dans notre application, il s'avère que certains profils des sources peuvent être corrélés, d'où la nécessité d'introduire d'autres indices.

4.4.2.2 Rapport mélange à erreur

Nous pouvons aussi avoir recours à un indicateur reconnu dans la littérature appelé le Rapport mélange à erreur (MER pour *Mixing Error Ratio* en anglais) [167], obtenu à partir de chaque colonne de la matrice G . Pour chaque source, nous pouvons exprimer une quantité MER_j exprimée en décibels. Pour un vecteur réel \underline{g}_j et son estimation $\hat{\underline{g}}_j$, il est possible d'écrire $\hat{\underline{g}}_j$ sous la forme :

$$\hat{\underline{g}}_j = \hat{\underline{g}}_j^{coll} + \hat{\underline{g}}_j^{orth}, \quad (4.60)$$

où $\hat{\underline{g}}_j^{coll}$ et $\hat{\underline{g}}_j^{orth}$ sont respectivement colinéaire et orthogonal au vecteur réel \underline{g}_j . Cette décomposition permet d'exprimer le MER de la source j , noté MER_j , défini par,

$$MER_j = 10 \log_{10} \frac{\|\hat{\underline{g}}_j^{coll}\|^2}{\|\hat{\underline{g}}_j^{orth}\|^2}. \quad (4.61)$$

Il faut noter que si les valeurs de ce vecteur sont infinies, la séparation est exacte. Une valeur de 0 dB correspond à deux composantes formant un angle de 45° .

Cet indicateur est ensuite rendu global en moyennant pour l'ensemble des sources, à savoir,

$$\text{MER} = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \text{MER}_j. \quad (4.62)$$

Grillière [62] indique que le MER permet, contrairement au SIR, de fournir une image fidèle des performances quel que soit le degré de corrélation des sources. Nous proposons donc d'évaluer nos méthodes en calculant le MER sur les colonnes de la matrice G .

4.5 Validation des méthodes sous contraintes de forçage et de normalisation

Nous consacrons cette partie à l'étude expérimentale des performances des différentes méthodes présentées précédemment. Nous avons volontairement choisi un exemple de taille très réduite afin de réduire la difficulté d'interprétation. Nos travaux se situent dans le domaine de l'identification des sources de pollution dans l'air.

Les données sont constituées de 50 échantillons et 7 espèces chimiques que sont Fe, Ca, SO_4^{2-} , Zn, Mg, Al et Cr. Des incertitudes σ_{ij} fournies par un expert chimique sont associées à chaque donnée x_{ij} . Un bruit uniforme sur l'intervalle $[-\min(\lambda \sigma_{ij}, x_{ij}); \lambda \sigma_{ij}]$ est superposé de manière à préserver la positivité des données. La variable λ permet de faire varier le SNR au cours des tests. Pour la validation des méthodes, nous utilisons un jeu de profils inspirés de différentes études chimiques de la littérature [101, 123]. Nous avons considéré uniquement 3 sources et les profils choisis dans notre exemple sont donnés dans le tableau 4.3. Ces profils présentent en particulier des similitudes, qui se traduisent par des espèces prioritaires communes dans la source 1 et la source 3 (les espèces Fe et Ca). En termes de signatures des sources, nous pouvons noter que l'élément Zn est une espèce caractéristique permettant de distinguer la source 1 et la source 3. Nous pouvons aussi mentionner que l'élément Cr est présent uniquement dans la source 2. Enfin, il faut remarquer que les profils définis ici sont normalisés à 1000ng/ μg , ce qui modifie d'un facteur 1000 les formulations des expressions de mise à jour des profils et aussi des contributions. Les matrices de contributions sont quant à elles aléatoires sur un intervalle de valeurs extrêmes réalistes.

Nous testons dans cette section les méthodes sous contraintes de forçage et de normalisation dont les acronymes sont donnés dans le tableau 4.1 ainsi que des cas particuliers de la NMF à base de divergence $\alpha\beta$ comme la α -NMF (pour $\alpha + \beta = 1$) et la β -NMF (pour $\alpha = 1$). Bien que nous ayons présenté le MER moyen comme indice de performance, nous donnerons les performances dans nos simulations en qualifiant de MER le produit $p \cdot \text{MER}$, représentant en

Tableau 4.3 – Matrice de profil théorique

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
700	100	80	60	40	20	0
300	400	5	0	200	75	20
400	200	80	0	120	200	0

réalité la somme des MER de chaque source.

Toutes les méthodes ont en commun une initialisation identique donnée dans le tableau 4.4. Le tableau 4.5 indique les éléments forcés de la matrice de profil F et le tableau 4.6 les valeurs de forçage de ces éléments. En définitive, 5 contraintes sont prises en compte sur un ensemble de 21 paramètres de profils.

Tableau 4.4 – Matrice F_{init} pour les premières simulations

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
500	250	20	60	150	20	0.001
550	225	5	50	100	50	20
300	200	100	50	60	120	170

Tableau 4.5 – Matrice Ω^E utilisée dans les premières simulations pour toutes les méthodes informées

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	1	0	0	1
0	0	1	0	0	0	1
0	1	0	0	0	0	0

Tableau 4.6 – Matrice Φ^E utilisée dans les premières simulations pour toutes les méthodes informées

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	60	0	0	0
0	0	5	0	0	0	20
0	200	0	0	0	0	0

4.5.1 NMF à base de divergence β

Nous nous intéressons ici aux méthodes de NMF basées sur la divergence β (qui correspond à la divergence $\alpha\beta$ pour $\alpha = 1$). Le jeu de données choisi correspond à un SNR de 30 dB et les conditions d'expérimentations sont celles décrites dans le paragraphe introductif. Les méthodes choisies sont la version à base de divergence β , de la NMF (β -NMF) [55], de la NMF pondérée (β -WNMF) [68, 92], et des 4 méthodes décrites dans le tableau 4.1.

La figure 4.1 montre que les performances de nos méthodes informées dépassent les méthodes de la littérature. Par ailleurs, on peut remarquer la méthode β -N₁-CWNMF-R reste plus stable que les autres méthodes quand β change. Nous pouvons aussi repérer l'intervalle de valeurs de β , $\beta \in [0.3; 0.7]$ qui procurent de bonnes performances pour toutes les méthodes. Dans cet intervalle, les méthodes informées sans résidus donnent de meilleures performances.

Dans la suite, nous sélectionnons $\beta = 0.5$ pour effectuer la comparaison avec les autres méthodes. Ainsi, la figure 4.2 rassemble les résultats de cette comparaison pour des données dont le SNR varie de 15 dB à 65 dB. Les méthodes présentent toutes une chute de performance lorsque le SNR décroît. Il est à noter que les méthodes sont toutes initialisées avec la même matrice F_{init} 4.4 Pourtant, ces dernières n'atteignent pas les performances des méthodes informées. La méthode β -N₁-CWNMF-R reste la plus performante parmi les méthodes à base de Résidus (-R), surtout pour des SNR élevés. Par ailleurs, les méthodes sous contraintes sans résidus (β -N₁-CWNMF, β -N₂-CWNMF) présentent les performances les plus élevées quelque soit la situation. L'apport de ces méthodes est cependant plus modéré pour les SNR faibles.

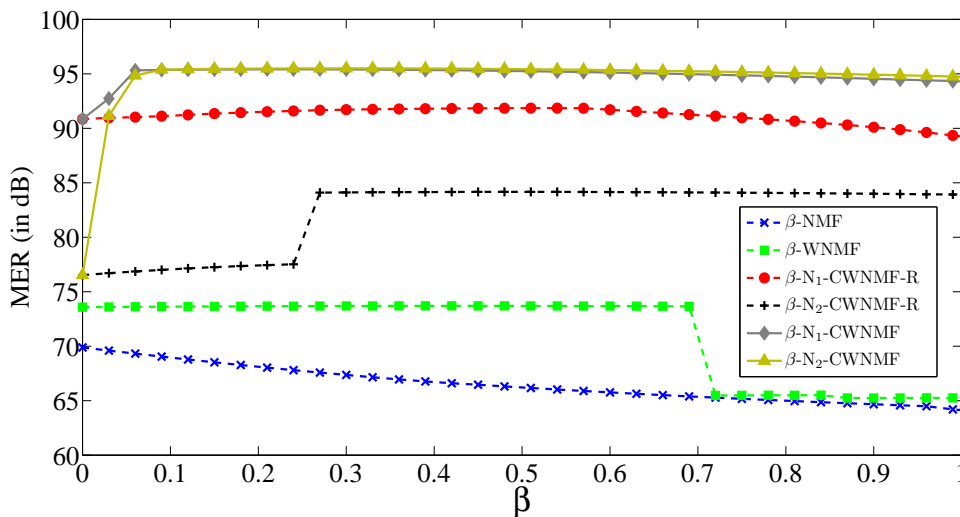


FIGURE 4.1 – Performance des méthodes de NMF en fonction de β (critère de performances : MER (en dB))

Nous avons voulu aussi observer l'influence d'un nombre de contraintes plus réduit sur la

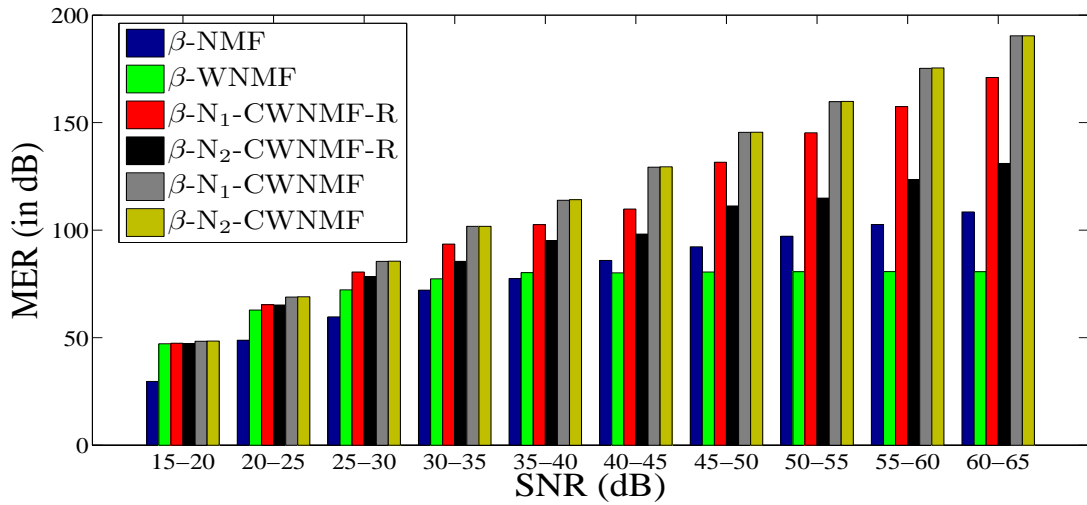


FIGURE 4.2 – Performances des NMF à base de divergence β en fonction du SNR : 5 contraintes, $\beta = 0.5$

qualité de la factorisation. Parmi les contraintes préalablement fixées, nous avons choisi d'en éliminer 2. Les nouvelles matrices de contraintes sont donc données dans les tableaux 4.7 et 4.8. La figure 4.3 montre en effet une chute de performances pour toutes les méthodes dues en partie à l'initialisation experte différente, cette dernière ne proposant que 3 contraintes égalité pour informer la recherche. De nouveau, les méthodes sans résidu sous contraintes donnent de meilleurs résultats qui sont visibles sur la figure 4.3.

Tableau 4.7 – La matrice Ω^E utilisée dans les seconds tests

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	0	0	0	1
0	0	1	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0

Tableau 4.8 – La matrice Φ^E utilisée dans les seconds tests

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	0	0	0	0
0	0	5	0	0	0	20
0	0	0	0	0	0	0

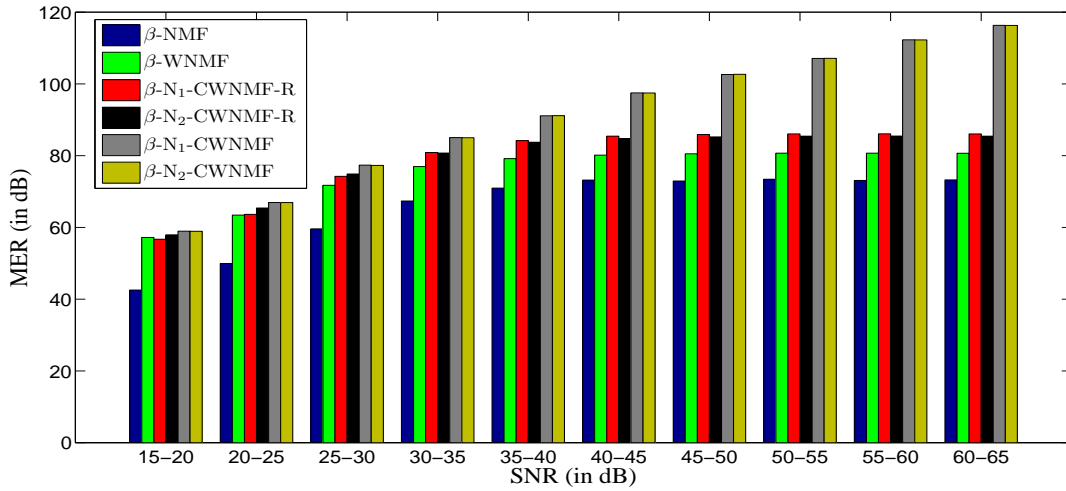


FIGURE 4.3 – Performances des méthodes NMF en fonction du SNR : 3 contraintes, $\beta = 0.5$

4.5.2 NMF à base de divergence α

Dans la continuité des tests précédents, nous nous intéressons aux mêmes méthodes, dédiées ici à la divergence α . Rappelons que pour la divergence α , les variantes informées avec résidus et sans résidus conduisent aux mêmes règles, débouchant ainsi sur uniquement 2 méthodes informées. En premier lieu, nous décidons de faire varier le paramètre α en fixant le SNR à 30 dB. La figure 4.4 montre une allure générale similaire aux tests précédents. Toutefois, il apparaît, contrairement aux autres expérimentations, que les méthodes sous contraintes de forçage ont exactement les mêmes performances quand $\alpha < 0.9$. Nous choisissons $\alpha = 0.3$ pour le reste des expérimentations.

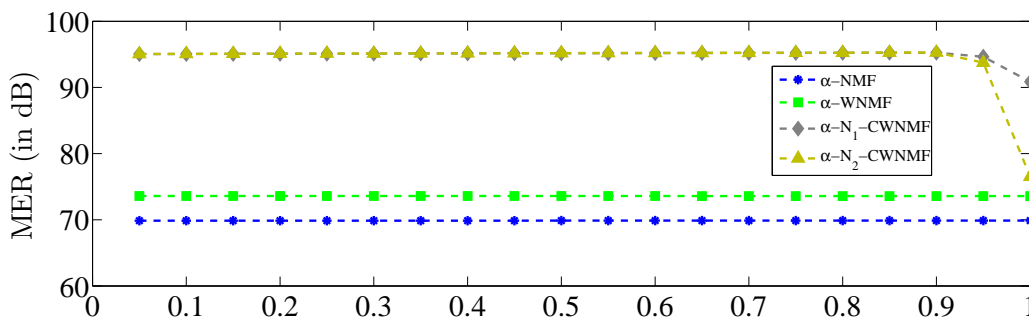


FIGURE 4.4 – Comparaison des différentes méthodes en fonction de α pour un SNR de 30 dB

L'allure générale de la figure 4.5 est la même que pour les NMF à base de divergence β . Nous pouvons cependant relever que les performances des deux méthodes informées à base de résidus sont exactement les mêmes. Le choix de α a permis de rehausser les performances de

la méthode α - N_2 -CWNMF pour se comporter comme la méthode α - N_1 -CWNMF. Le constat d'apport modéré en faible SNR demeure vrai pour ces méthodes sous contraintes.

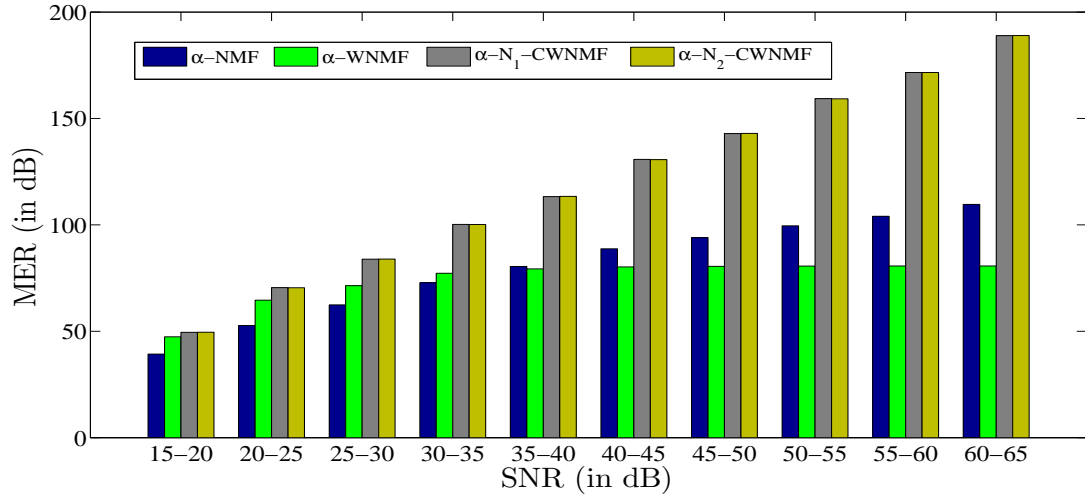


FIGURE 4.5 – Performance des méthodes en fonction du SNR pour $\alpha = 0.3$

4.5.3 Méthodes de NMF informées à base de divergence $\alpha\beta$

Nous venons d'examiner les performances de certaines méthodes spécifiques à base de divergences. Nous voulons généraliser ces résultats à des couples de paramètres (α, β) plus nombreux. Dans cette optique, nous proposons de représenter la disposition de ces paramètres. Nous avons déjà formulé des recommandations dans le choix de ces paramètres. Nous avons suivi ces recommandations pour sélectionner des points potentiellement intéressants. La figure 4.6 permet de visualiser les couples de valeurs utilisées lors des simulations. En rouge, nous avons les points utilisés dans ces expérimentations. La figure 4.7 montre les performances des 2 méthodes non-contraintes et des 4 méthodes informées en fonction du SNR pour les couples de paramètres (α, β) retenus. L'allure générale préalablement observée persiste. Il est cependant à noter que la méthode $\alpha\beta$ - N_1 -CWNMF-R donne parfois de mauvais résultats pour certains couples (α, β) . Ces performances basses sont observées sur la droite $\alpha + \beta = 1.2$, ce qui laisse penser que la direction de descente suivie n'est pas adéquate. Le choix de ces paramètres est donc vraiment sensible. La méthode $\alpha\beta$ - N_2 -CWNMF-R donne des résultats plus stables mais le gain en performances par rapport aux méthodes non-contraintes n'est pas conséquent. Par contre, nous observons que les méthodes contraintes sans résidus apportent une amélioration nette des performances surtout en SNR élevé. Ces deux méthodes ($\alpha\beta$ - N_1 -CWNMF, $\alpha\beta$ - N_2 -CWNMF) donnent presque en permanence les mêmes performances. Néanmoins, toutes les

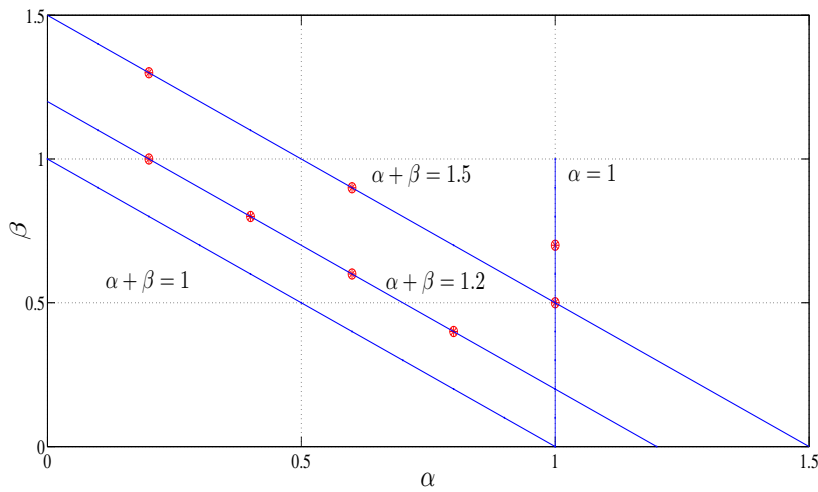


FIGURE 4.6 – Les différents couples α, β étudiés

méthodes contraintes ne donnent qu'un gain modéré en faible SNR par rapport aux méthodes non-contraintes.

4.5.4 Robustesse à l'initialisation

Nous avons jusqu'à présent considéré une seule initialisation, commune à toutes les méthodes et provenant d'un expert. Dans cette section, nous cherchons à examiner l'influence de l'initialisation sur la qualité des performances des méthodes.

La non unicité de la solution est effectivement un frein potentiel aux performances des méthodes. Nous proposons donc de faire varier la matrice de profil initial tout en respectant les connaissances expertes. Par ailleurs, la normalisation du profil initial doit aussi être respecté. L'observation de la qualité de l'initialisation est effectuée en calculant le SIR entre F_{init} et $F_{théo}$. Cependant, le SIR de chaque source ne peut pas descendre en dessous d'un certain seuil selon le nombre de contraintes présentes sur chaque source. Par exemple, la source 1 et 2 ne peuvent avoir des SIR inférieurs à approximativement 9 dB.

Pour cette première évaluation, les résultats sont rassemblés dans le tableau 4.9. Nous utilisons les données de SNR de 30 dB auxquelles nous appliquons les différentes NMF basées sur la norme de Frobenius. Le MER est évalué sur G pour chaque source et celui-ci est reporté en dessous de la méthode correspondante. On constate dans le tableau 4.9 que les méthodes classiques de la littérature présentent beaucoup de solutions de performances différentes. Par contre, les méthodes sous contraintes présentent une meilleure stabilité à l'initialisation, avec au maximum 2 solutions. Ce résultat est confirmé par la seconde salve de tests obtenus dans les figures 4.8 et 4.9. La figure 4.8 (respectivement 4.9) rapporte les performances obtenues par les différentes

4.5. Validation des méthodes sous contraintes de forçage et de normalisation

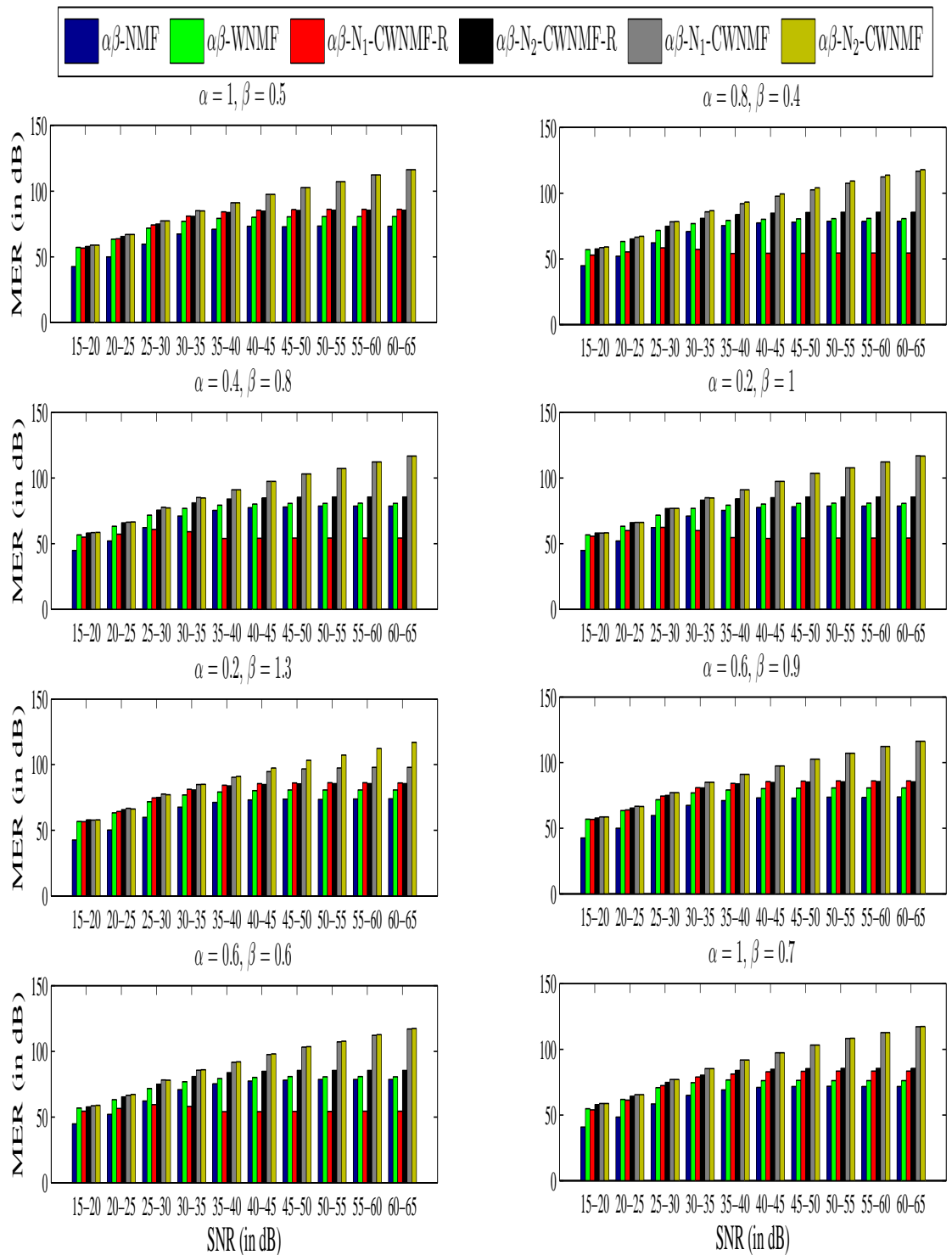


FIGURE 4.7 – Performances des différentes méthodes en fonction du SNR

méthodes pour de nombreux essais de données de SNR 30 dB (respectivement 17 dB) pour deux couples distincts de (α, β) . Nous pouvons remarquer que la méthode NMF comporte quasiment

Tableau 4.9 – Influence de l’initialisation sur les performances de NMF pour $\alpha = 1$, $\beta = 1$ et SNR=30 dB

SIR\MER	F_{init}			$\alpha\beta$ -NMF			$\alpha\beta$ -WNMF			$\alpha\beta$ -N ₁ -CWNMF-R			$\alpha\beta$ -N ₂ -CWNMF-R		
	Source 1	Source 2	Source 3	Source 1	Source 2	Source 3	Source 1	Source 2	Source 3	Source 1	Source 2	Source 3	Source 1	Source 2	Source 3
1	21.41	21.47	21.24	24.92	22.97	25.02	26.30	27.59	26.97	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
2	8.91	21.47	21.24	24.80	19.24	22.23	24.97	27.40	21.48	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
3	21.41	9.15	21.24	24.92	22.97	15.60	26.64	27.84	17.95	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
4	21.40	21.47	5.03	25.46	22.97	19.89	11.87	27.73	25.65	31.18	28.96	29.10	26.13	27.71	30.07
5	8.91	9.15	21.24	24.82	19.27	23.69	24.80	27.39	21.31	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
6	21.41	10.65	4.21	24.92	22.97	17.95	11.87	27.73	25.65	31.18	28.96	29.10	26.12	27.71	30.07
7	8.91	21.47	5.03	24.81	19.25	22.23	24.81	27.39	21.32	31.18	28.96	29.10	26.13	27.71	30.07
8	8.91	10.65	4.21	24.81	19.25	22.23	24.00	27.26	20.93	31.18	28.96	29.10	26.13	27.71	30.07
9	15.60	21.47	21.24	24.92	22.97	22.54	26.61	27.44	24.08	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
10	21.41	15.27	21.24	24.92	22.97	25.64	26.31	27.59	26.97	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
11	21.41	21.47	15.28	25.19	22.97	26.02	26.21	27.59	26.97	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
12	15.60	15.27	21.24	24.88	22.16	22.43	26.29	27.59	26.97	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
13	21.41	15.27	15.28	24.92	22.97	24.05	26.23	27.6	26.97	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
14	15.60	21.47	15.28	25.06	22.97	22.75	26.68	27.45	24.50	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70
15	15.60	15.27	15.28	24.92	22.97	23.44	26.20	27.59	26.97	31.18	28.96	29.10	24.91	27.67	24.70

autant de solutions que d’essais effectués. La méthode $\alpha\beta$ -WNMF présente encore beaucoup de solutions potentielles mais semble plus stable pour le couple $\alpha = 0.8$ et $\beta = 0.4$. Enfin, les méthodes contraintes donnent presque toujours une seule solution. On peut aussi remarquer que la méthode $\alpha\beta$ -N₂-CWNMF donne de meilleurs résultats, tant en termes de stabilité que de qualité du MER obtenu.

4.5. Validation des méthodes sous contraintes de forçage et de normalisation

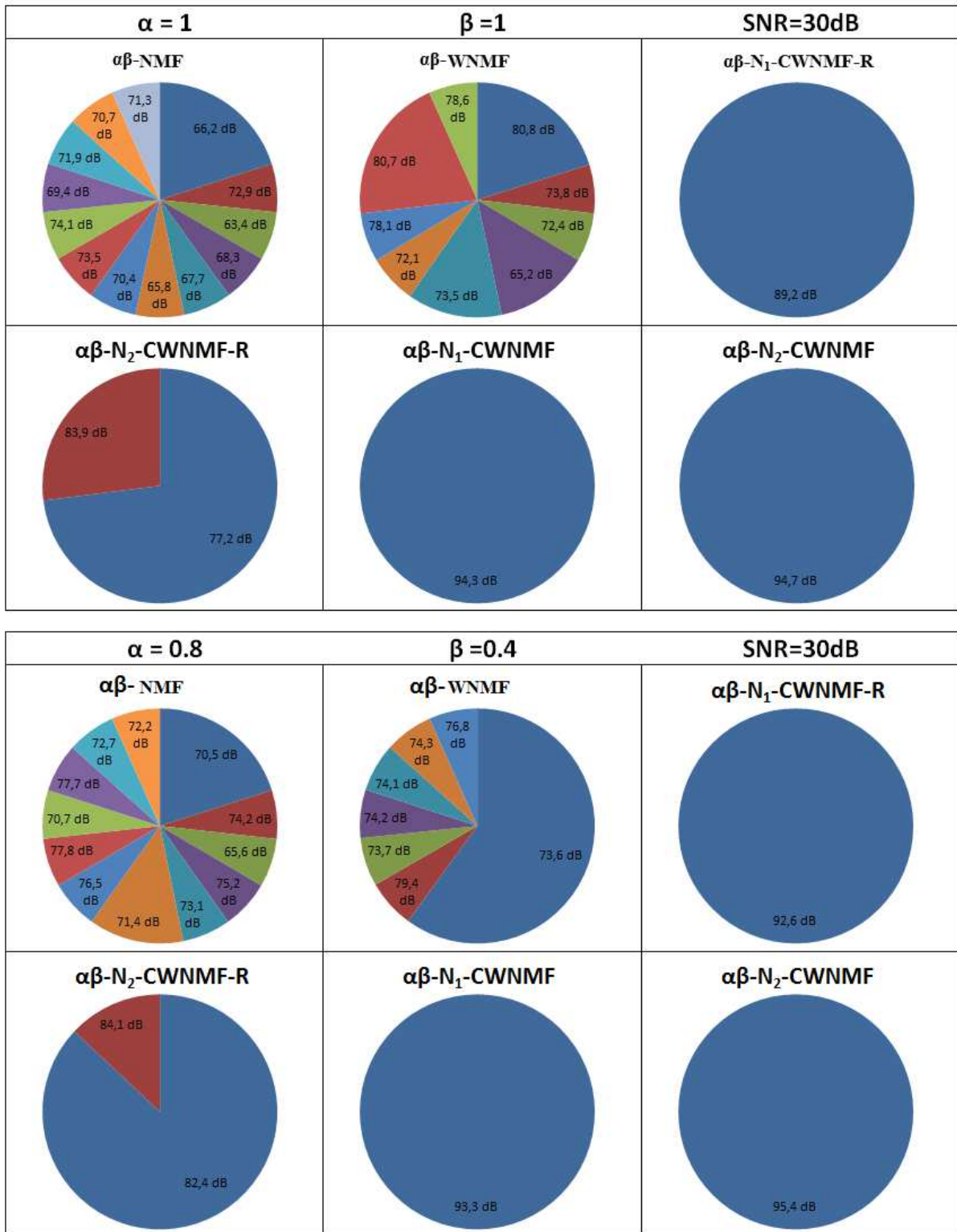


FIGURE 4.8 – Répartition des MER en fonction de l'initialisation pour les différentes méthodes ($SNR = 30$ dB)

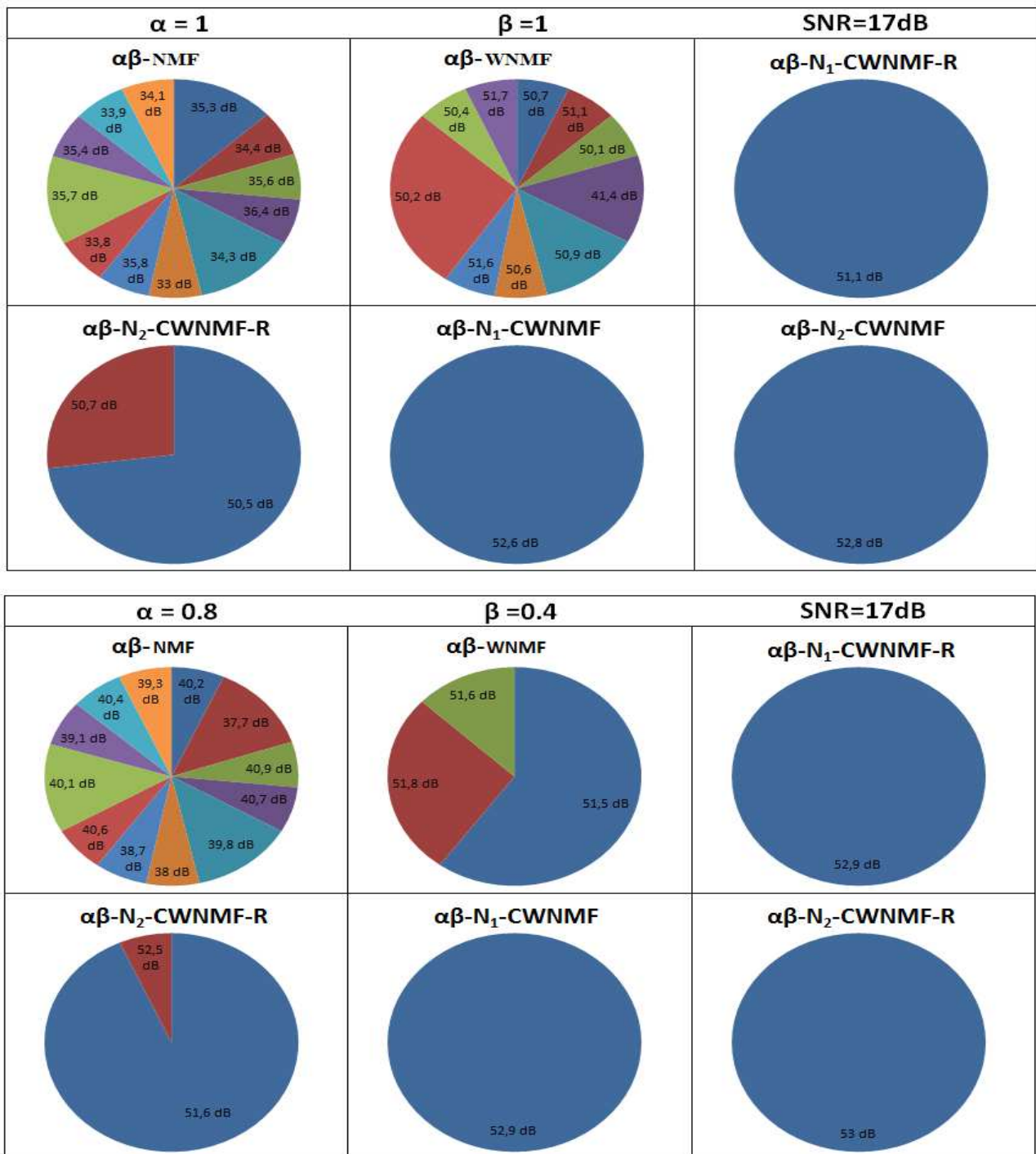


FIGURE 4.9 – Répartition des MER en fonction de l’initialisation pour les différentes méthodes ($SNR = 17$ dB)

4.6 Expérimentations des méthodes de NMF sous contraintes de bornitude

Nous proposons dans cette section de poursuivre les expérimentations effectuées avec l'exemple de simulation précédent. Nous proposons ici de confronter les méthodes de bornitude avec les autres méthodes en limitant le nombre de contraintes égalité.

Le nombre d'éléments figés dans la matrice de profil F est réduit ici à 3 éléments et 3 autres éléments sont soumis à des contraintes de bornitude. Ceci donne lieu aux différents tableaux de matrices de configurations (4.10 – 4.13).

Tableau 4.10 – Matrice Ω^E pour les simulations avec bornitude

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	0	0	0	1
0	0	1	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0

Tableau 4.11 – Matrice Φ^E pour les simulations avec bornitude

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	0	0	0	0
0	0	5	0	0	0	20
0	0	0	0	0	0	0

Tableau 4.12 – Matrice Ω^I pour les simulations avec bornitude

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	1	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0

Il s'agit d'examiner l'apport que peuvent constituer les contraintes de bornitude par rapport aux méthodes de la Table 4.1 et les méthodes standards. Etant donné la supériorité des méthodes sous contraintes ($\alpha\beta$ -N₁-CWNMF, $\alpha\beta$ -N₂-CWNMF) dans les tests précédents, nous envisageons de ne conserver que ces 2 méthodes parmi les 4 pour effectuer le comparatif. Dans le même ordre d'idée, nous avons uniquement implémenté les méthodes à bornes sans résidus

Tableau 4.13 – Matrice Φ^{I-} / Φ^{I+}

Fe	Ca	SO ₄ ²⁻	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	40/80	0	0	0
280/320	0	0	0	0	0	0
0	180/220	0	0	0	0	0

(sans le sigle -R) dont les acronymes sont donnés dans le Tableau 4.2. Ainsi, 8 méthodes (2 méthodes sans contraintes, 2 méthodes avec contraintes de forçage, 4 méthodes avec contraintes de bornitude) sont examinées en détail pour les différents SNR variant de 15 à 65 dB. La figure 4.10 rassemble les différents éléments de performances pour les couples de paramètres (α, β) d'intérêt. Pour les différents couples (α, β) , la valeur ajoutée des méthodes à bornes est importante surtout pour les mélanges qui présentent des grandes valeurs de SNR. Cependant, la qualité d'estimation évolue en fonction des paramètres (α, β) . Dans nos tests, nous notons que les meilleures performances sont atteintes pour $\alpha = 0.8$ et $\beta = 0.4$.

De manière générale, les 4 variantes de la $\alpha\beta$ -BN_x-CWNMF et $\alpha\beta$ -N_xB-CWNMF ont des performances similaires avec un léger avantage pour la normalisation 2. L'observation du résultat de la séparation aux endroits bornés de la matrice de profil F montre que les valeurs obtenues ne collent pas aux bords Φ^{I-} et Φ^{I+} .

Dans la figure 4.11, nous représentons en noir les moyennes des MER obtenues en fonction du SNR en entrée et en gris la distribution des MER liée aux différentes valeurs de (α, β) . Ces moyennes sont effectuées sur des petites tranches de SNR et pour tous les couples (α, β) à tester. Pour les différentes méthodes, les allures générales des courbes sont similaires mais les moyennes et les écarts types peuvent être très différents. Par ailleurs, la figure 4.11 montre des résultats moyens supérieurs pour les méthodes à contraintes de bornitude.

Examinons d'abord les méthodes à contraintes de forçage. La méthode $\alpha\beta$ -N₂-CWNMF est beaucoup moins sensible au choix des paramètres (α, β) que sa concurrente $\alpha\beta$ -N₁-CWNMF. En effet, les moyennes des MER sont légèrement plus élevées pour la normalisation 2 et les écarts types sont beaucoup moins grands.

Les résultats obtenus pour les méthodes avec bornitude $\alpha\beta$ -BN_x-CWNMF et $\alpha\beta$ -N_xB-CWNMF procurent des performances plus élevées que les méthodes avec des contraintes de type égalité uniquement. On peut aussi noter une dispersion des résultats plus grande lorsque le SNR est élevé pour les méthodes à bornitude. Cependant, dans le cas de ces méthodes, aucune des deux normalisations utilisées n'apparaît plus favorable. Enfin la figure 4.12 aboutit aux mêmes conclusions relatives à la limitation du nombre points stationnaires dans les méthodes informées avec un avantage clair pour les deux méthodes utilisant la normalisation N_1 .

En conclusion, les méthodes à contraintes de bornitude présentent un réel intérêt pour guider la solution vers des profils convaincants. Toutefois, en présence de bruit fort sur les données, le MER qui est évalué sur la matrice de contribution ne peut fournir des résultats que faiblement supérieur compte tenu du bruit fort sur les données.

4.7 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre évoqué dans un premier temps les méthodes de NMF couplées à des contraintes de forçage et de normalisation. Nous avons présenté 4 variantes qui ont débouché sur les règles respectives de mise à jour.

Dans un second temps, nous avons intégré le problème de NMF en présence en sus de contraintes de bornitude. L'intérêt potentiel de cette formulation consistait à essayer de guider la solution vers des solutions physiquement réalistes. Ceci a permis de définir des règles de mise à jour et 8 méthodes basées sur ces principes ont pu être élaborées. Nous avons mis en place des tests de simulation sur un jeu de données synthétiques de faible dimension comportant 3 sources. Nous avons pu intégrer une connaissance partielle de profils soit sous forme de contraintes de forçage soit sous forme de bornes minimales et maximales. Les tests effectués sur jeu de données synthétiques confirment l'amélioration de la qualité de la séparation apportée par la prise en compte de contraintes égalité et inégalité. L'indice de performance est bien plus élevé pour la séparation dans un mélange faiblement bruité (SNR fort). Cependant, pour les données à faible SNR, les performances des différentes techniques informées restent juste supérieures et l'amélioration n'est que de quelques dB en moyenne. Cet inconvénient peut être expliqué par le fait que toutes les contraintes sont apportées sur la matrice de profil F alors que l'indice de performances est calculé sur la matrice de contribution G . L'erreur d'estimation est donc essentiellement due à l'erreur sur les données d'entrées. L'apport sur la matrice de profil est indéniable dans toutes les méthodes évoquées.

Dans le but d'obtenir encore une meilleure séparation, nous proposons dans le chapitre suivant, de tenir compte des conditions météorologiques permettant d'ajouter des contraintes sur la matrice de contribution.

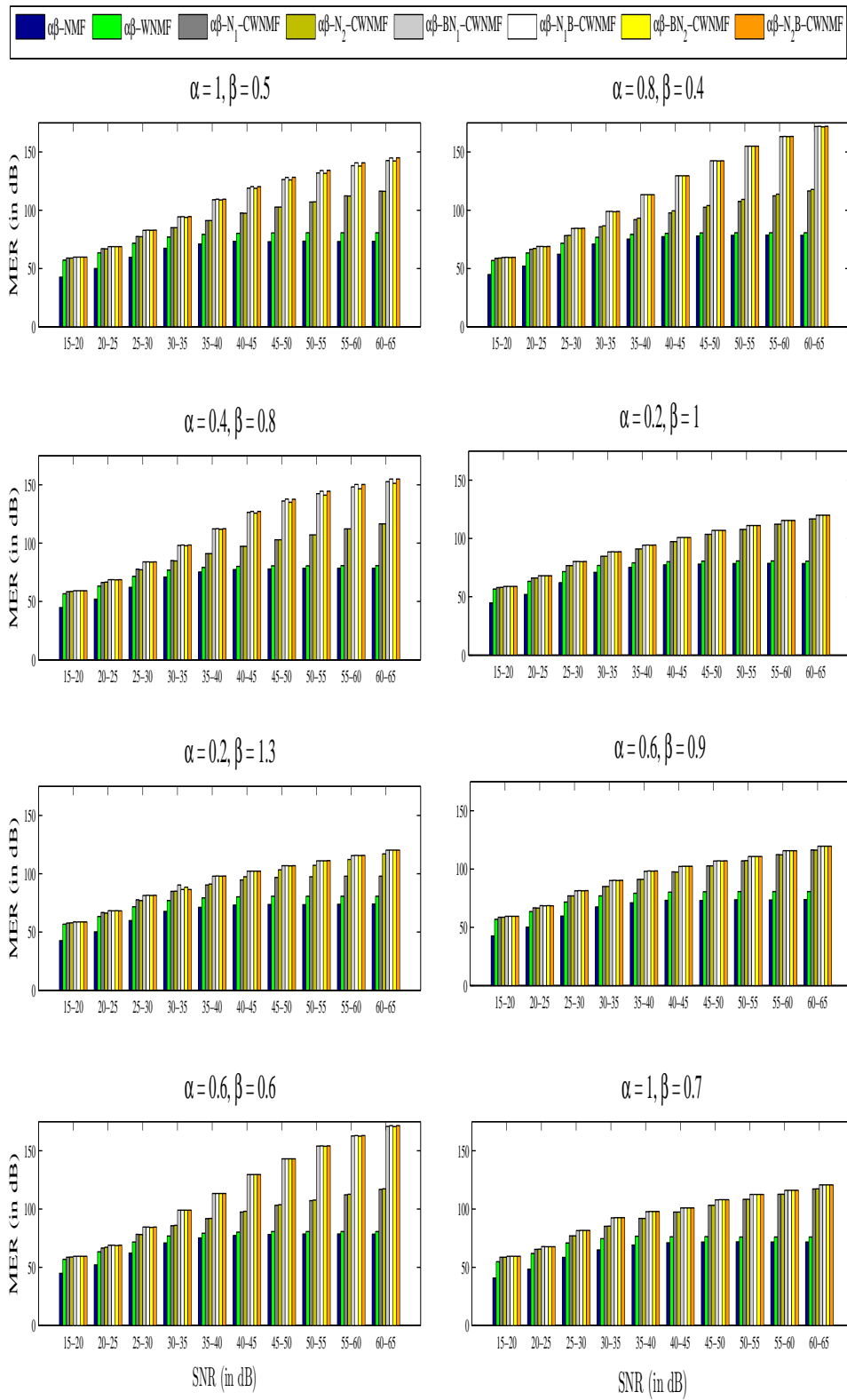


FIGURE 4.10 – Comparaison des méthodes en fonction du SNR

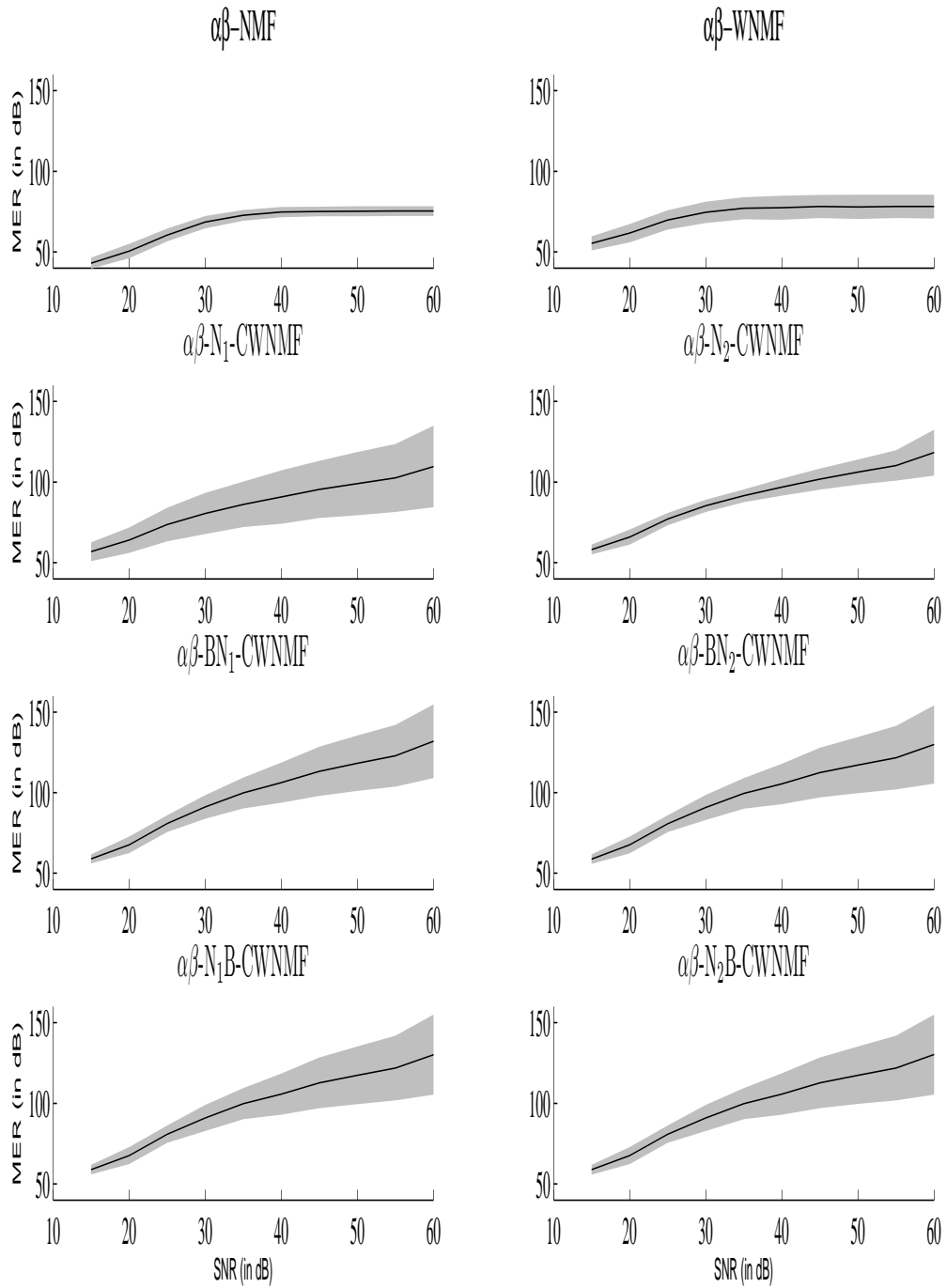


FIGURE 4.11 – Répartition des performances des différentes méthodes en fonction du SNR

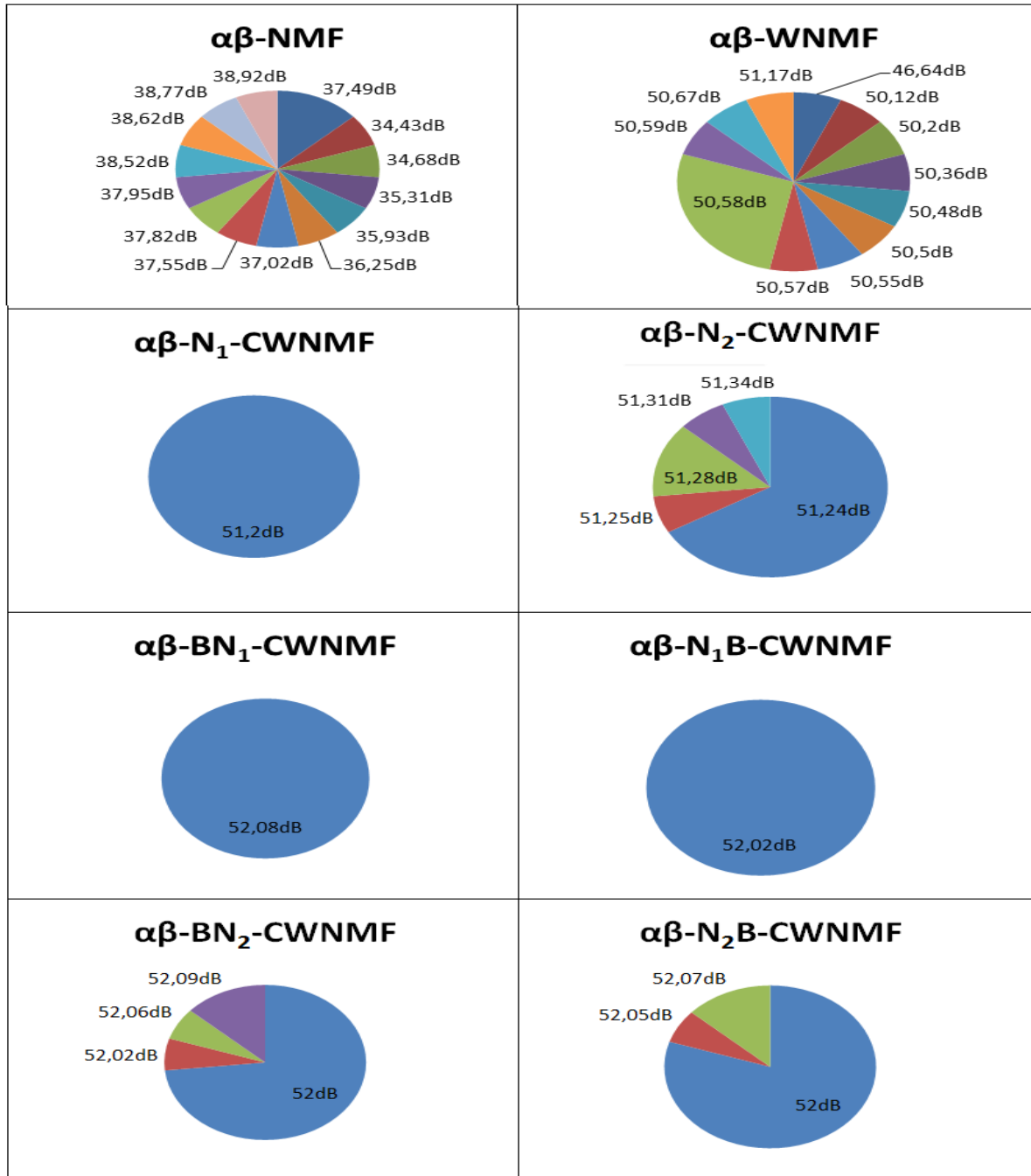


FIGURE 4.12 – Répartition des résultats en fonction des initialisations pour les différentes méthodes (SNR=17dB, $\alpha = 0.8$ $\beta = 0.4$)

Troisième partie

Apport des connaissances d'un modèle pour informer la NMF

Chapitre 5

Factorisation matricielle informée par un modèle physique

5.1 Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons développé des méthodes NMF informées intégrant plusieurs types d'information sur la matrice de profil.

Dans ce chapitre, notre souhait est d'intégrer en complément une information sur la forme de la matrice de contribution. Rappelons que cette matrice rassemble les quantités reçues de chaque source par le capteur. De manière générale, la matrice de contribution n'a pas de propriété particulière en dehors de la positivité si aucune information ne permet de conditionner le transfert source capteur ou l'activité de la source pour un échantillon donné. En revanche, la connaissance d'informations géographiques et météorologiques peuvent renseigner sur l'influence d'une source pendant un épisode de mesure. Par exemple, un modèle physique de dispersion est dans ce cas bien adapté pour évaluer l'influence d'une source (par exemple ponctuelle) sur un récepteur. Nous proposerons donc une méthode pour introduire le modèle physique au sein du modèle récepteur décrit dans l'équation (1.5).

Ainsi, nous allons d'abord nous intéresser à l'étude de quelques modèles de transfert source-capteur. Notons que ces modèles de dispersion transposent bien la réalité physique, et traduisent la forte sensibilité à l'intensité et à la direction du vent instantané. Les taux de transferts varient en grande amplitude en fonction du temps et de l'espace. L'emploi d'un modèle suppose des hypothèses de travail qui seront examinées. En particulier, il est nécessaire de faire quelques approximations sur le vent, dont l'estimation du champ réel 3D sort du cadre de cette étude. Le modèle sera donc ici un indicateur binaire de l'influence d'une source sur le récepteur.

La stratégie est d'utiliser un modèle pour structurer la matrice de contribution, et ce, en

amont de la factorisation informée par les autres contraintes.

La figure 5.1 recense les différentes étapes de l’approche. Nous nous intéresserons dans un premier temps à l’intégration du modèle physique dans le modèle récepteur dans un cadre multi-sources. La non-participation de certaines sources dans certains échantillons est prise en compte et nous proposons dans un second temps une structuration adaptée de la matrice de contribution tenant compte de l’influence instantannée des sources ponctuelles. Cette structuration a la particularité, par le caractère absorbant des zéros pour la multiplication, de conserver tout au long de la recherche les éléments inhibés par le masque Ω_G , résultant de l’étape de modélisation et seuillage. L’étape d’initialisation de la matrice de contribution requiert la connaissance de deux entités Ω_F et Φ_F respectivement définies par $\Omega_F \triangleq \{\Omega^E, \Omega^I\}$ et $\Phi_F \triangleq \{\Phi^E, \Phi^{I-}, \Phi^{I+}\}$.

La dernière étape exécute la recherche NMF informée avec les contraintes développées dans les chapitres précédents et utilise la structure développée dans les étapes amont.

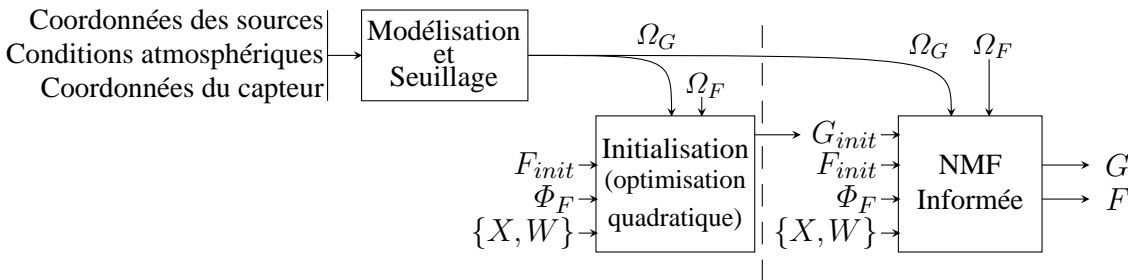


FIGURE 5.1 – Structure de la méthode NMF informée.

5.2 Etude des modèles de dispersion atmosphérique

Ces modèles caractérisent la manière dont se propage un polluant dans l’air suite par exemple à des rejets. Ces modèles peuvent être très complexes selon la nature des phénomènes pris en compte. Ils traduisent la conservation des masses libérées par les sources qui subissent deux phénomènes physiques conjoints que sont l’advection et la diffusion. L’advection est portée par le vent dont la modélisation du champ dynamique est également un problème délicat. Les fluides mis en jeu répondent à des comportements complexes modélisés par les équations de Navier-Stokes dont la résolution est encore un problème ouvert. La notion de domaine sur lequel s’appuie cette résolution est aussi d’importance.

Selon les hypothèses formulées, différentes familles de modèles de dispersion atmosphérique peuvent être recensées :

- les modèles analytiques gaussiens,
- les modèles intégraux,
- et les modèles CFD (pour *Computational Fluid Dynamics* en anglais)

5.2.1 Les modèles analytiques gaussiens

Le plus simple et le plus utilisé des modèles est le panache gaussien qui correspond à une source ponctuelle qui émet de manière permanente, selon un vent stable et uniforme orienté toujours dans la même direction dans un domaine infiniment ouvert. Il résulte de la résolution simplifiée des équations de conservation dans les conditions citées [160]. La diffusion est dépendante des distances depuis l'émission, mais aussi des classes de stabilité qui définissent la forme du panache. L'advection dépend de la vitesse et direction du vent. La distribution du gaz à un instant donné est représentée par un panache gaussien des deux cotés de l'axe de rejet, comme on peut le voir sur la figure 5.2. Dans ce type de modèle, la source d'émission est supposée ponctuelle et ses dimensions petites devant les dimensions du panache aux premiers instants de l'observation considérée [127].

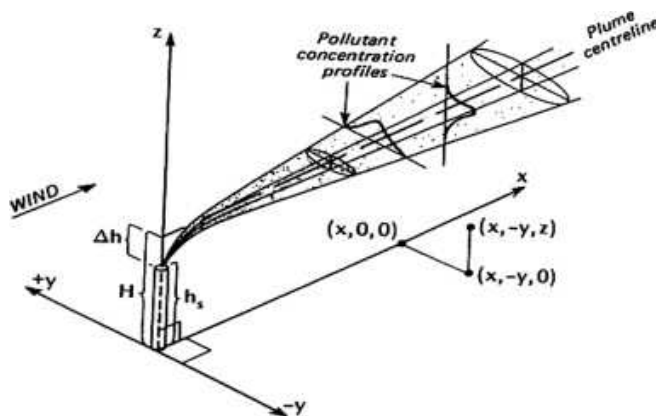


FIGURE 5.2 – Exemple de panache gaussien [163]. Le repère a pour origine le lieu d'émission de la source chimique.

5.2.2 Les modèles intégraux

Ces modèles sont basés sur la résolution simplifiée des équations de la mécanique des fluides. Le gaz peut en réalité subir plusieurs effets autres que ceux du vent et la stabilité atmosphérique et le modèle gaussien ne peut pas convenir dans ce cas. En effet :

- les gaz lourds peuvent être affectés par la gravité,
- les gaz légers peuvent subir les effets de flottabilité et de turbulence,
- les jets de gaz peuvent se faire à des vitesses importantes
- et les sources peuvent être vues autrement que comme des sources ponctuelles.

Le modèle intégral introduit des paramètres supplémentaires afin de spécifier des mécanismes non-représentés par les équations simplifiées de la mécanique des fluides. Cela nécessite donc en contrepartie une étape de calage de ces paramètres additionnels. Bien que ce modèle présente

l'avantage de modéliser les gaz lourds et légers, il suppose l'absence de tout type d'obstacle et de relief. De plus, quelques erreurs peuvent être engendrées à cause de la simplification d'équations de la mécanique des fluides. La turbulence atmosphérique est prise en compte par l'intermédiaire de classes de stabilité atmosphérique, permettant d'éviter une modélisation lourde de la turbulence. L'application de ces modèles se révèle utilisable sur des zones de taille inférieure à 10 km. Le logiciel ADMS utilisé dans [148] constitue un exemple de modèle intégral de dispersion atmosphérique.

5.2.3 Les modèles CFD

Les modèles CFD permettent une résolution numérique des équations de la mécanique des fluides. De ce fait, les outils CFD disposent d'un vaste champ d'application et prennent en compte des sources multiples et des débits variables associés. Leurs points forts proviennent de leur capacité à coller à la réalité du terrain et de tenir compte des différents facteurs qui interviennent dans le phénomène de dispersion (turbulence thermique, différents obstacles et reliefs...). Sa précision dépend de la méthode de résolution numérique choisie, de la forme du maillage et de la densité de ce maillage. Par ailleurs, et contrairement au modèle intégral, le modèle CFD peut être appliqué dans le cas de débit variable ou dans le cas de conditions météorologiques extrêmes.

Par contre, ce type de modèle peut présenter des difficultés de mise en oeuvre avec des algorithmes assez complexes et un temps de calcul long selon la zone étudiée. L'application pratique de ces modèles [148] reste limitée à des zones de taille inférieure à quelques kilomètres.

5.2.4 Un modèle physique, pour quel usage ?

Le premier usage possible d'un modèle de dispersion atmosphérique est la simulation d'épisodes de pollution chroniques ou accidentelles. Dans ce cas, on peut disposer de vents mesurés qui servent de paramètres entrants à ces modèles. On parle alors de données semi-synthétiques. Le calage de la simulation aux phénomènes observés constitue un challenge parfois difficile à relever. Les nombreux paramètres internes permettent en général ce calage. Le choix parmi les différentes familles de modèles doit être guidé par l'objectif de la simulation.

Le second usage possible d'un modèle de dispersion atmosphérique se situe dans le cadre de la problématique inverse. Il consiste à élaborer en général un modèle simplifié qui exprime un lien entre les causes et les conséquences observées [104]. Il résulte souvent d'hypothèses simplificatrices qui permettent de donner un lien causal entre ces variables. Toutefois, les paramètres de réglage fin sont souvent inconnus et requièrent leur identification simultanée ou préalable. La méconnaissance de ces paramètres rend plus délicate la restauration des signaux issus des

sources et la plupart de ces études considèrent ces paramètres connus [144, 43]. Parfois, des modèles convolutifs sont utilisés, mais la fréquence d'échantillonnage des données peut rendre impossible l'usage d'un tel modèle. En particulier, dans notre étude, les données sont recueillies toutes les 12 heures et le temps de transport d'une émission ponctuelle dure moins d'une heure.

Une autre voie, que nous proposons dans le cadre de cette thèse, consiste à utiliser un modèle atmosphérique, non pas pour exprimer la matrice de contribution de manière précise, mais pour spécifier uniquement sa structure. En effet, l'orientation du vent va conditionner la réception de polluants jusqu'au capteur. Cette matrice de contribution traduit en fait si un transfert de la source au capteur a pu s'opérer. Ainsi, nous proposons d'utiliser un modèle simple, conscient de ses limites, mais adapté à la recherche de structure. La précision de ce modèle n'est bien sûr pas garantie mais elle suffit largement pour déterminer la structure des transferts jusqu'au capteur.

Pour toutes ces raisons, nous choisissons d'utiliser le modèle gaussien qui est le plus simple à implémenter avec un coût calculatoire peu élevé comparé aux autres modèles. Le travail qui suit reprend les travaux publiés dans [136] et fait suite à un travail de Master de M. Plouvin [135].

5.3 Présentation du modèle gaussien et de ses paramètres

Le modèle gaussien décrit une dispersion de gaz dans le cadre d'une émission provenant d'une source ponctuelle. Il permet de calculer un coefficient de transfert décrivant la transmission du polluant de la source vers le capteur. Ce transfert dépend de différents paramètres météorologiques ou de paramètres décrivant la source et le capteur.

La figure 5.3 représente les différents paramètres intervenant dans le calcul du modèle gaussien atmosphérique et que nous nous proposons de décrire dans cette section.

5.3.1 Coordonnées sources, coordonnées capteur

Nous disposons potentiellement de plusieurs sources ponctuelles et d'un seul capteur. Leurs coordonnées cartésiennes sont nécessaires pour le calcul du transfert. Or, il est d'usage d'utiliser les coordonnées géographiques (latitude, longitude, hauteur) pour la saisie de positions terrestres. En conséquence, un module de conversion de coordonnées géographiques en coordonnées cartésiennes est requis. Pour effectuer cette conversion, des algorithmes associés à chacune des quatre projections coniques conformes de Lambert (voir la figure 5.4) sont disponibles [157] et applicables selon la zone d'appartenance des coordonnées dans le système de repérage Lambert. Puisque notre étude couvre le nord de la France, nous avons retenu unique-

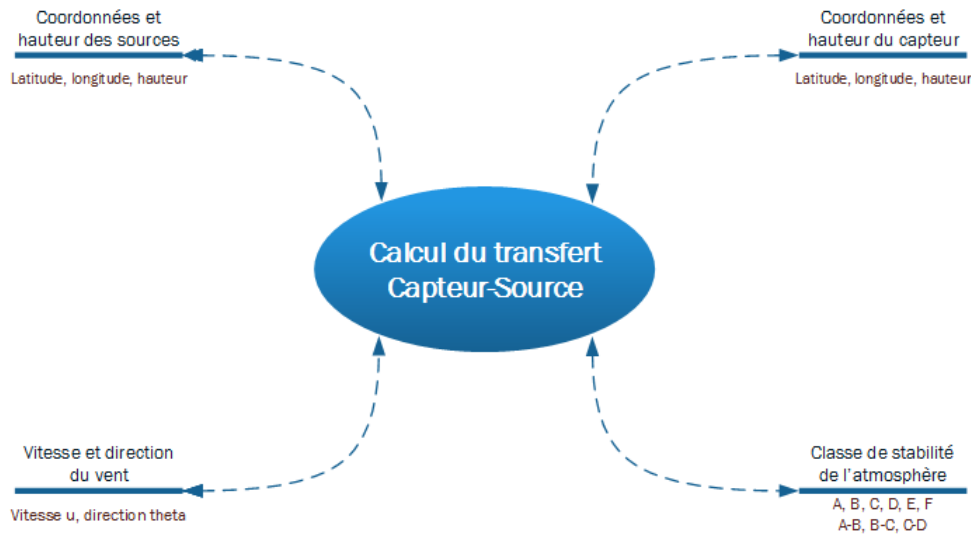


FIGURE 5.3 – Paramètres pour le calcul du transfert.

ment la conversion par l’algorithme Lambert I.

5.3.2 Paramètres météorologiques

Les paramètres météorologiques sont le vecteur vent et les classes de stabilité. Ces deux paramètres sont néanmoins différents dans le sens où le vent est mesuré directement tandis que les classes de stabilité sont déduites d’un ensemble de conditions météorologiques.

Pour le vent, celui-ci est obtenu par une mesure simultanée de l’intensité et de la direction angulaire dans le plan horizontal. Cette mesure est supposée stationnaire dans l’espace et pendant toute la durée de transfert sources-capteur. Ces hypothèses un peu simplificatrices correspondent ainsi à celles de l’utilisation d’un modèle gaussien.

Une difficulté provient des cadences des mesures effectuées. Ainsi, la mesure de pollution est réalisée toutes les $T_e = 12$ h tandis que la mesure de vent est en général effectuée tous les $\frac{T_e}{\nu}$ h, où ν est un entier représentant le coefficient de sur-échantillonnage. Ainsi, les modèles peuvent être évalués à la période d’échantillonnage du vent tandis que les mesures sont collectées plus rarement. Un moyennage des taux de transfert sera effectué sur chaque période de 12 h à partir des mesures de vent ν fois plus nombreuses.

Les classes de stabilité sont par contre des informations indirectes. Celles-ci sont obtenues à partir d’informations d’intensité de vent et de luminosité. 6 classes de stabilité ont été définies par Pasquill [163] afin de prendre en compte la turbulence atmosphérique (voir le tableau 5.1).

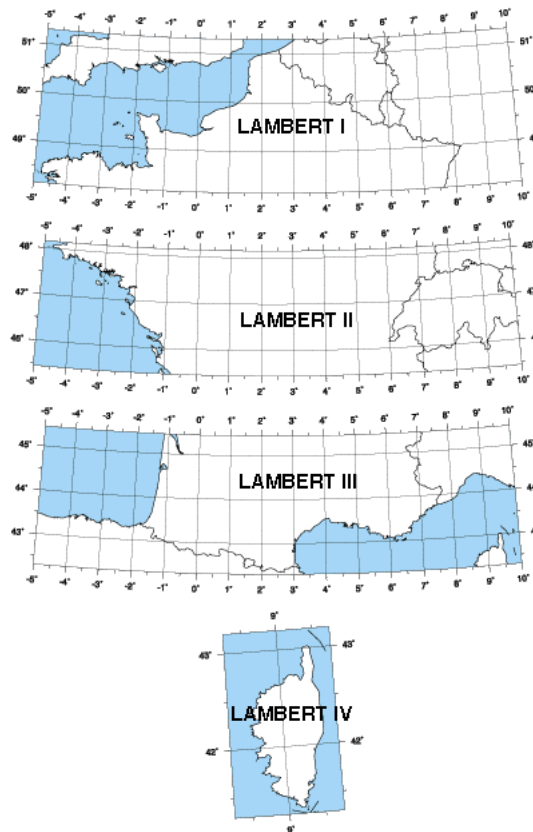


FIGURE 5.4 – Zone couverte par les quatre projections coniques conformes de Lambert.

Ces classes vont de A (très instable) à F (très stable).

Tableau 5.1 – Exemple d’une classe de stabilité : classe de stabilité de Pasquill.

Stabilité	Jour			Nuit	
	Rayonnement solaire incident			Nébulosité	
[m/s]	Fort	Modéré	Faible	entre $\frac{4}{8}$ et $\frac{7}{8}$	$< \frac{3}{8}$
< 2	A	A-B	B	F	F
2-3	A-B	B	C	E	F
3-5	B	B-C	C	D	F
5-6	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Ces classes de stabilité servent de référence pour déterminer les dispersions verticales et horizontales utilisées dans le modèle gaussien.

5.3.3 Équation de transfert

Le calcul du transfert nécessite la définition d’un repère lié au vent et centré sur la source.

5.3.3.1 Changement de repère

Nous disposons des coordonnées de la source (x_s, y_s, z_s) ainsi que des coordonnées du capteur (x_c, y_c, z_c) dans un repère fixe. Le changement de repère consiste à centrer le repère sur la source ramenée à l'altitude 0, et à se servir de l'orientation du vent comme sens des abscisses. Les coordonnées du capteur \underline{r} dans le nouveau repère s'expriment donc par

$$\underline{r} \triangleq (x, y, z)^T = P_\theta \cdot (x_c - x_s, y_c - y_s, z_c)^T, \quad (5.1)$$

où P_θ désigne la matrice de changement de repère dépendant du paramètre θ , représentant l'angle du vent dans le repère initial. Les coordonnées de la source s'écrivent donc $\underline{r}_s = (0, 0, h)$. La figure 5.2 nous montre le repère utilisé pour le calcul du transfert. La position du capteur influe directement sur la valeur du transfert qui traduit la transmission du polluant jusqu'au capteur.

5.3.3.2 Variables

Nous allons préciser les différentes variables intervenant dans le modèle :

- χ : la concentration du polluant (en $\text{ng} \cdot \text{m}^{-3}$) calculée au capteur de position $\underline{r} = (x, y, z)^T$. Elle est exprimée à la cadence de $\frac{T_e}{\nu}$ heures, où ν est un entier exprimant le facteur de sur-échantillonnage du vent. Cette quantité n'est pas mesurée, nous disposons uniquement de la mesure X à la cadence T_e heures.
- κ : débit massique du polluant (en $\text{ng} \cdot \text{s}^{-1}$).
- u : vitesse du vent (en $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$). Cette vitesse est mesurée à la cadence $\frac{T_e}{\nu}$ heures.
- h : hauteur d'émission de la source.
- σ_y : dispersion (suivant y) de la distribution gaussienne de la quantité de gaz par rapport à sa localisation (en m).
- σ_z : dispersion (suivant z) de la distribution gaussienne de la quantité de gaz par rapport à sa localisation (en m).

Il faut remarquer à ce stade que les paramètres de dispersion σ_y, σ_z s'expriment en fonction de la distance x et des paramètres de stabilité de l'atmosphère. Les modèles régissant ces dispersions sont nombreux, nous avons choisi d'utiliser le modèle de Pasquill-Gifford [163].

5.3.3.3 Équation du transfert

Le calcul du transfert dépend de 3 facteurs :

- Facteur d'intensité du vent : $f_1 = \frac{1}{u}$.
- Facteur de dispersion horizontale : $f_2 = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} \sigma_y} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)$.

- Facteur de dispersion verticale : $f_3 = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_z} \left\{ \exp\left(-\frac{(h-z)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(h+z)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right\}$. Ce dernier terme contient aussi une composante due à la réflexion au sol de la pollution.

Le transfert s'écrit comme le produit de ces facteurs, c.-à-d.,

$$t(x, y, z) = f_1 \cdot f_2 \cdot f_3, \quad (5.2)$$

ce qui se résume sous la forme condensée :

$$t(x, y, z) = \frac{1}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \left\{ \exp\left(-\frac{(h-z)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(h+z)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right\}. \quad (5.3)$$

Ainsi, nous avons l'équation de transfert suivante :

$$\chi = t(x, y, z) \cdot \kappa. \quad (5.4)$$

Cette relation exprime la relation de cause à effet entre une source et un capteur.

5.4 Lien entre le modèle de transfert obtenu par modèle physique et le modèle récepteur

Cette section revisite la description du modèle récepteur introduit par l'équation (2.1) et la confronte à l'équation (5.4) dans un cadre de sources multiples, d'origine à la fois anthropiques et aussi naturelles. Ces sources anthropiques sont aussi considérées comme ponctuelles, ce qui permet l'usage d'un modèle de dispersion atmosphérique. Il est commode de définir un ensemble \mathcal{A} tel que :

$$\mathcal{A} = \{i \in \{1, \dots, p\}, \text{ tel que } \underline{f}_i \text{ est un profil anthropique}\}, \quad (5.5)$$

ainsi que l'ensemble complémentaire

$$\bar{\mathcal{A}} = \{i \in \{1, \dots, p\}, \text{ tel que } \underline{f}_i \text{ est un profil naturel}\}. \quad (5.6)$$

Nous définissons la matrice de concentrations \mathcal{X} qui regroupe les mesures collectées à la période d'échantillonnage du vent ($\frac{T_e}{\nu}$). Nous introduisons aussi la matrice de profils anthropiques $F^{\mathcal{A}}$ ainsi que la matrice de profils naturels $F^{\bar{\mathcal{A}}}$ définis par :

$$F \triangleq \left[(F^{\mathcal{A}})^T (F^{\bar{\mathcal{A}}})^T \right]^T. \quad (5.7)$$

Cette partition de la matrice de profil permet d'effectuer la même procédure sur la matrice de contribution selon les colonnes, c.-à-d.,

$$\mathcal{G} \triangleq \begin{bmatrix} \mathcal{G}^A & \mathcal{G}^{\bar{A}} \end{bmatrix}. \quad (5.8)$$

L'équation (2.1) et les définitions (5.7) et (5.8) permettent de séparer la matrice de données \mathcal{X} en une partie provenant d'une activité industrielle \mathcal{X}^A et une partie provenant d'une activité naturelle $\mathcal{X}^{\bar{A}}$. Il est alors possible d'écrire :

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}^A + \mathcal{X}^{\bar{A}} \approx \mathcal{G} \cdot F \approx \mathcal{G}^A F^A + \mathcal{G}^{\bar{A}} F^{\bar{A}}. \quad (5.9)$$

A ce niveau, supposons que nous disposions de p^A sources industrielles ponctuelles parmi p dont l'effet peut être représenté par le modèle de dispersion atmosphérique Gaussien.

Pour la source numéro k opérant dans les conditions de l'échantillon i , un transfert \mathcal{T}_{ik} est calculé dépendant des conditions du moment. Ainsi une matrice de coefficients de transfert \mathcal{T} de taille $(n \cdot \nu) \times p^A$ peut être calculée. Elle traduit les différents transferts pour chaque source anthropique à la cadence de la période d'échantillonnage du vent.

Nous allons essayer de relier le modèle gaussien et le modèle récepteur. Pour cela, définissons :

- $\mathcal{X}_{i,j}^A$, la concentration de l'espèce j dans les conditions de l'échantillon i ,
- \mathcal{T}_{ik} , le coefficient de transfert de la source k dans les conditions de l'échantillon i ,
- $\mathcal{Q}_{k,j}(i)$, le débit de l'espèce j émise par la source k dans les conditions de l'échantillon i .

La partie anthropique des données s'écrit donc

$$\mathcal{X}_{ij}^A = \sum_{k=1}^{p^A} \mathcal{T}_{ik} \mathcal{Q}_{k,j}(i). \quad (5.10)$$

Le débit total d'une source à l'échantillon i donné peut être exprimé en sommant, pour la source k , les débits de l'ensemble des espèces j variant de 1 à m :

$$Q_{i,k} = Q_k(i) = \sum_{j=1}^m \mathcal{Q}_{k,j}(i). \quad (5.11)$$

La concentration de l'espèce j dans l'échantillon i peut donc être reformulée,

$$\mathcal{X}_{ij}^A = \sum_{k=1}^{p^A} \mathcal{T}_{ik} Q_{i,k} \left(\frac{\mathcal{Q}_{k,j}(i)}{Q_{i,k}} \right). \quad (5.12)$$

5.4. Lien entre le modèle de transfert obtenu par modèle physique et le modèle récepteur

Le modèle récepteur suppose l'invariance de $\frac{Q_{k,j}^{(i)}}{Q_{i,k}} = F_{k,j}^A$ en fonction du numéro d'échantillon i (c.-à-d., une composition relative identique en termes de proportions). En conséquence, on peut ré-exprimer le modèle précédent comme le terme général du modèle de mélange linéaire sous forme matricielle (1.5) :

$$\mathcal{X}_{i,j}^A = \sum_{k=1}^{p^A} \mathcal{G}_{i,k}^A F_{k,j}^A. \quad (5.13)$$

La comparaison des équations (5.12) et (5.13) permet de donner une expression de la matrice des contributions anthropiques \mathcal{G}^A sous la forme individuelle $\mathcal{G}_{i,k}^A = T_{ik} Q_{i,k}$ ou bien sous forme matricielle

$$\mathcal{G}^A = \mathcal{T} \circ \mathcal{Q}. \quad (5.14)$$

Il est donc possible d'écrire \mathcal{X}^A sous la forme :

$$\mathcal{X}^A = \begin{pmatrix} T_{1,1} \cdot Q_{1,1} & \cdots & T_{1,q} \cdot Q_{1,q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{\nu n,1} \cdot Q_{\nu n,1} & \cdots & T_{\nu n,q} \cdot Q_{\nu n,q} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} F_{1,1} & \cdots & F_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{q,1} & \cdots & F_{q,m} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Une mesure à la cadence T_e est donc le résultat de la moyenne des ν dernières valeurs de concentration :

$$X_{i,j}^A = \frac{1}{\nu} \sum_{l=1}^{\nu} \mathcal{X}_{\nu(i-1)+l,j}^A. \quad (5.16)$$

Elle peut aussi s'exprimer en fonction de la matrice de profil F en utilisant l'équation (5.13) :

$$X_{i,j}^A = \frac{1}{\nu} \sum_{l=1}^{\nu} \sum_{k=1}^{p^A} \mathcal{G}_{\nu(i-1)+l,k}^A F_{k,j}^A. \quad (5.17)$$

En inversant les signes sommes, il apparaît que

$$X_{i,j}^A = \sum_{k=1}^{p^A} \left(\frac{1}{\nu} \sum_{l=1}^{\nu} \mathcal{G}_{\nu(i-1)+l,k}^A \right) F_{k,j}^A. \quad (5.18)$$

En considérant l'expression des transferts (5.14) et en supposant que les débits sont stationnaires sur une période T_e , nous pouvons écrire que

$$X_{i,j}^A = \sum_{k=1}^{p^A} (T_{ik} Q_{i,k}) F_{k,j}^A, \quad (5.19)$$

où le transfert T_{ij} est défini par

$$T_{ij} = \frac{1}{\nu} \sum_{l=1}^{\nu} \mathcal{T}_{\nu(i-1)+l,k}. \quad (5.20)$$

L'expression (5.19) permet de faire apparaître la contribution globale à la cadence T_e sous la forme classique

$$X_{i,j}^A = \sum_{k=1}^{p^A} G_{i,k}^A F_{k,j}^A. \quad (5.21)$$

où la contribution s'exprime par

$$G_{i,k}^A = T_{i,k} Q_{i,k}. \quad (5.22)$$

Les très faibles valeurs de $T_{i,k}$ correspondent, dans la mesure où les débits aux sources sont comparables, à des contributions $G_{i,k}^A$ négligeables. Ainsi, ces dernières peuvent donc être considérées comme nulles dans la recherche de solutions.

5.5 Structuration de la matrice de contribution par seuillage

L'objet de ce paragraphe est de proposer une structure de la matrice de contribution. Plus précisément, parmi les sources anthropiques, nous devons être en mesure de préciser lesquelles ont émis pendant une durée T_e correspondant à un échantillon.

A l'issue des précédents travaux, nous avons calculé la matrice de transfert T et nous sommes maintenant en mesure d'exprimer la matrice de contribution anthropique G^A en fonction de ce transfert selon l'équation (5.22). En considérant que les débits des sources industrielles sont du même ordre de grandeur, la structure de la matrice G^A revient à étudier celle des transferts T . Mentionnons que selon les conditions de vent et de stabilité de l'atmosphère, un transfert peut varier typiquement entre 10^{-200} et 10^{-6} .

Nous considérons que, pour chaque échantillon, nous sommes astreints à conserver au moins une source industrielle correspondant à celle dont le transfert est le plus élevé. Nous pouvons aussi conserver des sources industrielles supplémentaires si le transfert est suffisant. Nous proposons une marge multiplicative heuristique entre deux transferts valant 10^6 pour l'échantillon i . Nous définissons alors un seuil, à partir duquel une source anthropique est considérée comme présente dans les observations, dépendant de l'échantillon considéré :

$$\epsilon_i = \max_{k \leq p^A} \frac{T_{i,k}}{10^6}. \quad (5.23)$$

Ainsi, une source présente potentiellement à l'échantillon i est soit non-anthropique (c.-à-d.

que $k \geq p^A$), soit anthropique avec un transfert dépassant le seuil (5.23). L'intégration de l'ensemble de ces connaissances apportées par les conditions de dispersion intervient sous la forme d'un masque Ω_G , défini de manière similaire aux chapitres précédents, qui indique les positions des zéros dans la matrice de contribution G . Ainsi la recherche par NMF informée ne concernera que les sources qui ont contribué aux échantillons. Il est calculé grâce au seuillage défini dans l'équation ci-dessous :

$$\Omega_{G_{i,k}} = \begin{cases} 0 & \text{si } T_{i,k} \geq \epsilon_i \text{ ou si } k \geq p^A \quad (G_{i,k} \text{ libre dans le calcul de la NMF}), \\ 1 & \text{sinon} \quad (G_{i,k} \text{ figé égal à 0 dans le calcul de la NMF}) \end{cases} \quad (5.24)$$

Ainsi, nous pouvons calculer une matrice Ω_G qui sert de structure pour la matrice de contribution. Cette structuration intervient comme matrice entrante dans deux étapes de l'algorithme, comme on peut le voir dans la figure 5.1 :

1. Pour une matrice F_{init} donnée, la détermination de la matrice G_{init} obtenue par une optimisation quadratique sous contraintes additionnelles telles que la positivité de G ou différentes contraintes linéaires satisfaisant le démarrage de la NMF.
2. La recherche de la contribution par l'algorithme de NMF informé par les connaissances expertes.

En conclusion, la matrice de structure Ω_G conditionne la recherche de l'initialisation de la matrice de contribution ainsi que l'algorithme de NMF informé. Nous allons nous intéresser maintenant aux aspects d'initialisation.

5.6 Initialisation de la matrice de contribution par optimisation quadratique

Le paragraphe précédent a permis de générer une matrice de structure de la matrice de contribution, exprimée par Ω_G . L'initialisation de la matrice de contribution a déjà été évoquée dans la partie 3.8 du chapitre 3. Cette section vise simplement à intégrer l'information de structure dans l'algorithme.

Nous avons déjà évoqué le découpage de la recherche de la matrice de contribution initiale non-négative en la recherche indépendante de ses n lignes. Nous partons de ce constat pour aborder le calcul de l'initialisation structurée.

Soit $\underline{w}_i, \underline{x}_i, \underline{g}_i, \underline{\omega}_{gi}$ représentant respectivement la $i^{\text{ème}}$ ligne de W, X, G et Ω_G et définis par

$$\underline{w}_i \triangleq W_{i,\cdot}, \quad \underline{x}_i \triangleq X_{i,\cdot}, \quad \underline{g}_i \triangleq G_{i,\cdot}, \quad \underline{\omega}_{gi} \triangleq \Omega_{G_{i,\cdot}}. \quad (5.25)$$

La $i^{\text{ème}}$ ligne de la matrice de contribution est obtenue en minimisant une fonction de coût basée sur la norme de Frobenius de l'écart d'estimation. Cette fonction de coût n'est autre qu'un coût de type moindres carrés pondérés :

$$\mathcal{J}(\underline{g}_i) = (\underline{x}_i^T - F^T \underline{g}_i^T)^T \cdot D_{w_i} \cdot (\underline{x}_i^T - F^T \underline{g}_i^T), \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad (5.26)$$

avec $D_{w_i} = \text{diag}(\underline{w}_i)$. Cette fonction peut être écrite sous une forme quadratique

$$\mathcal{J}(\underline{g}_i) = \frac{1}{2} \underline{g}_i \cdot H_i \cdot \underline{g}_i^T + \underline{u}_i^T \underline{g}_i^T, \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad (5.27)$$

avec $H_i = 2F \cdot D_{w_i} \cdot F^T$ et $\underline{u}_i^T = -2\underline{x}_i D_{w_i} F^T$. A cette minimisation, s'ajoutent des contraintes naturelles, déjà évoquées dans la section 3.8 du chapitre 3, ainsi que des contraintes déduites et des contraintes de structure.

L'initialisation de la matrice de contribution repose sur la contrainte de non-négativité de chaque élément du vecteur \underline{g}_i . La deuxième contrainte impose que les résidus vectoriels doivent demeurer positifs, c.-à-d., $\underline{x}_i^T \succeq \Phi_F^T \cdot \underline{g}_i^T$. De plus, sachant que la matrice de profil F est constituée de proportions (pourcentages), les auteurs de [87] montrent que $\sum_{j=1}^m g_{i,j} = \sum_{j=1}^m x_{i,j}$. Cette relation n'est autre que la relation (4.3) dans sa version vectorielle et exacte. Si dans notre algorithme NMF, nous n'avons pas voulu en tenir compte, en revanche, il nous semble opportun d'intégrer ici cette contrainte permettant d'approcher de façon réaliste la contribution. Ainsi le critère à minimiser peut être écrit sous la forme suivante :

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad \min_{\underline{g}_i} \mathcal{J}(\underline{g}_i) \quad \text{s.c.} \quad \begin{cases} \underline{g}_i \succeq \underline{0}, \\ \underline{x}_i^T \succeq \Phi_F^T \cdot \underline{g}_i^T, \\ \sum_j g_{i,j} = \sum_j x_{i,j}, \\ \underline{g}_i \circ \underline{\omega}_{Gi} = \underline{0}. \end{cases} \quad (5.28)$$

Les contraintes regroupent :

- La positivité de la $i^{\text{ème}}$ ligne de la matrice de contribution.
- La part des données dues aux profils forcés $\Phi_F^T \cdot \underline{g}_i^T$ est inférieure aux données \underline{x}_i^T .
- La somme d'une ligne de G est égale à la somme d'une ligne de X .
- Certains éléments de \underline{g}_i , correspondant aux 1 du vecteur $\underline{\omega}_{Gi}$, sont nuls.

Le critère peut donc être reformulé comme :

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad \min_{\underline{g}_i} \frac{1}{2} \underline{g}_i \cdot H_i \cdot \underline{g}_i^T + \underline{u}_i^T \underline{g}_i^T \quad \text{s.c.} \left\{ \begin{array}{l} \underline{g}_i \succeq \underline{0} \\ \underline{x}_i^T \succeq \Phi_F^T \cdot \underline{g}_i^T \\ \underline{g}_i \cdot \underline{1}_{p \times 1} = \underline{x}_i \cdot \underline{1}_{m \times 1} \\ \underline{g}_i \circ \omega_{Gi} = \underline{0} \end{array} \right. \quad (5.29)$$

La matrice H_i étant symétrique et strictement définie positive, la fonction de coût est strictement convexe et l'espace de définition des contraintes définit un polyèdre convexe. Dans ces conditions, la solution à ce problème dispose d'une solution unique si l'espace des contraintes n'est pas vide. L'expression (5.29) se formule donc comme un problème d'optimisation quadratique. En pratique, nous utilisons une méthode des points intérieurs proposée dans [107] implémentée dans la fonction `quadprog` de Matlab.

En réalité, nous devons indépendamment résoudre n problèmes quadratiques. Malheureusement, les matrices H_i et les vecteurs \underline{u}_i n'ont pas de termes communs si bien qu'aucune économie de calcul ne peut être réalisée. Quelques cas particuliers peuvent être recensés :

- Une seule source active peut rendre l'espace des contraintes de l'équation (5.29) non réalisable. En effet, la troisième contrainte peut être conflictuelle avec la seconde de l'équation (5.29). Dans ce cas particulier, nous proposons d'éliminer la troisième contrainte. Ce cas ne se rencontre jamais dans la mesure où des sources naturelles sont toujours présentes en complément des sources anthropiques.
- Il peut aussi arriver un conflit sur certaines espèces chimiques. En effet, la structure de la matrice de contribution peut parfois amener à l'absence d'une espèce chimique alors que celle-ci est présente dans les données. Cela arrive lorsqu'une espèce chimique est présente uniquement dans certaines sources anthropiques et que celles-ci ont été inhibées par le modèle compte tenu des directions de vent. Ce cas correspond à un conflit structurel qu'il faut alors reconsidérer.

Enfin, l'usage d'un modèle physique définit ainsi des nouvelles méthodes dont le sigle complète ceux définis dans les tableaux 4.1 et 4.2 par la lettre M disposé juste avant CWNMF. Ainsi, l'usage d'un modèle peut, par exemple, donner lieu à la méthode $\alpha\beta$ -N₁-MCWNMF-R, de même pour toutes les autres méthodes.

En résumé, nous avons donc proposé une initialisation qui tient compte des contraintes de structure liées aux conditions climatiques. Cette initialisation intervient donc comme matrice entrante des algorithmes de NMF déjà développés dans le chapitre 4.

5.7 Tests sur données de synthèse

Nous abordons ces tests sous l'angle des performances des méthodes et sous l'aspect stabilité des solutions à l'initialisation.

5.7.1 Étude des performances des méthodes

Dans le but de mesurer les performances de la méthode proposée, on considère 250 jeux de données synthétiques, avec des SNR différents, construits à partir de 2 sources industrielles et une source naturelle et comportant 50 échantillons et 7 espèces. Le contexte de simulation est tout à fait similaire aux expérimentations menées dans le paragraphe 4.5. Le nombre d'échantillons et les espèces chimiques sont donc identiques. Nous avons considéré 3 sources dont deux sont industrielles et une naturelle. Un bruit uniforme dont le support potentiellement asymétrique permet de préserver la positivité des données est superposé comme dans le paragraphe 4.5.

Les seuls changements proviennent, en premier lieu, du nombre de contraintes de forçage prises en compte, ici, 2. Cette matrice de forçage des profils est décrite en table 5.2. La seconde

Tableau 5.2 – Matrice Ω^E utilisée dans les simulations utilisant un modèle physique.

Fe	Ca	SO ₄	Zn	Mg	Al	Cr
0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0

modification concerne la matrice de contribution, qui n'est plus complètement aléatoire. Elle conserve sa part aléatoire pour la part naturelle de la contribution, où l'émission est permanente. Pour la partie industrielle, celle-ci est influencée par un vent décrit par son intensité et son angle. Ce dernier est généré par un mélange équiprobable de deux gaussiennes de moyenne correspondant à chaque angle source capteur. Ainsi, la direction du vent est donc choisie de sorte que au moins une source industrielle contribue significativement au mélange. D'un autre côté, la source naturelle reste toujours active.

La matrice de transfert est évaluée pour les deux sources industrielles. Le seuillage évoqué dans ce chapitre permet de proposer une structure de la part industrielle de la matrice de contribution. Après calcul, celle-ci est représentée sur la figure 5.5 qui traduit la présence des sources participant au mélange. De notre côté, nous avons constaté une bonne concordance entre la structure calculée et les angles de vent observés.

La méthode a été testée sans contraintes et sans modèle ($\alpha\beta$ -NMF et $\alpha\beta$ -WNMF), avec contraintes et sans modèle pour les méthodes décrites dans le tableau 4.1 et avec contraintes et

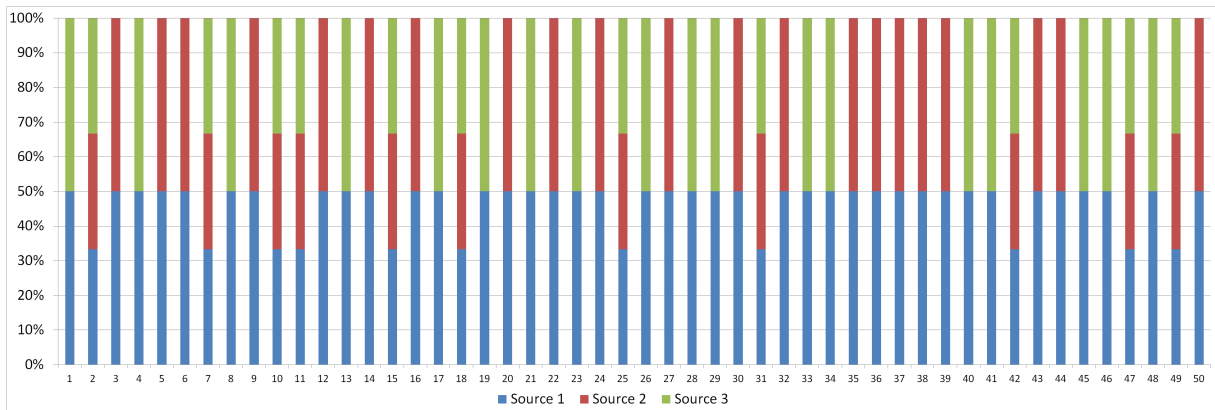


FIGURE 5.5 – Participation des sources aux différents échantillons.

modèle (Acronyme se terminant par MCWNMF) pour différents couples de paramètres α et β . Les MER sont ainsi utilisés pour évaluer la qualité des résultats, et ce, pour différents SNR sur les données.

La figure 5.6 montre que les méthodes $\alpha\beta$ -N₁-MCWNMF et $\alpha\beta$ -N₂-MCWNMF fournissent la meilleure qualité de factorisation quelque soit le SNR d'entrée. Il faut noter ici que les méthodes aveugles sont favorisées par l'initialisation de la matrice de profil F (la même que pour les approches informées) vérifiant les contraintes, ce qui constitue un avantage dans le cas des méthodes multiplicatives.

Pour les SNR faibles, la méthode NMF avec contraintes $\alpha\beta$ -N₁-CWNMF et $\alpha\beta$ -N₂-CWNMF donnent des performances qui sont certes meilleures que celles données par les approches aveugles mais l'apport des contraintes de forçage sur les MER reste assez modeste, probablement parce que uniquement 2 contraintes sont utilisées pour ce test. Dans ces conditions, les méthodes utilisant le modèle améliorent le MER d'environ 10 dB, ce qui est un apport significatif dans ces conditions difficiles.

D'autre part, la figure 5.7 montre que la dispersion des résultats en fonction du jeu de données est faible quelle que soit la méthode choisie, ce qui garantit une bonne stabilité des résultats dans la même gamme de SNR.

L'utilisation de la méthode NMF pondérée avec contraintes et modèle physique a permis pour ces données de faible SNR d'améliorer significativement la qualité de l'estimation.

En conclusion, les méthodes avec modèle présentent des MER significativement meilleurs pour toute la plage de SNR.

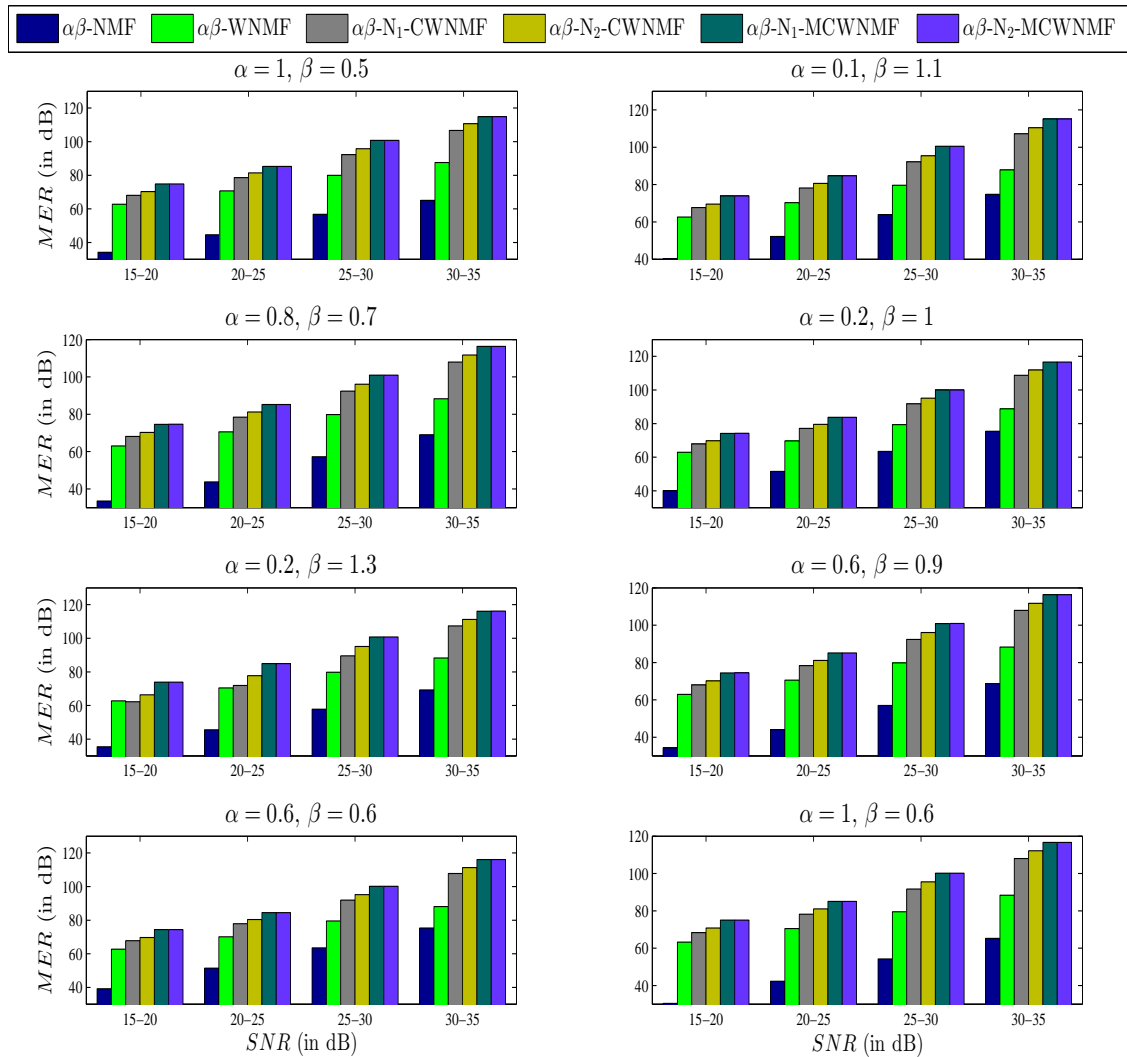


FIGURE 5.6 – Évaluation de la méthode de NMF informée en fonction du SNR des données.

5.7.2 Robustesse à l'initialisation

La non-unicité de la solution est un inconvénient pour les algorithmes de type NMF et la qualité de la séparation dépend entre autre de l'initialisation choisie. Comme pour les résultats de la section précédente, nous proposons de faire varier la matrice de profil initial tout en respectant les connaissances expertes, soit au total 15 initialisations différentes.

Pour cette évaluation, nous utilisons des données avec des SNR respectivement égaux à 30 dB et 17 dB. Nous observons la qualité des résultats obtenus avec les paramètres ($\alpha = 1, \beta = 1$) et ($\alpha = 0.8, \beta = 0.4$). La figure 5.8 montre les différentes solutions obtenues pour les différentes méthodes avec un SNR de 30 dB . Il apparaît que les méthodes non informées ($\alpha\beta$ -NMF et

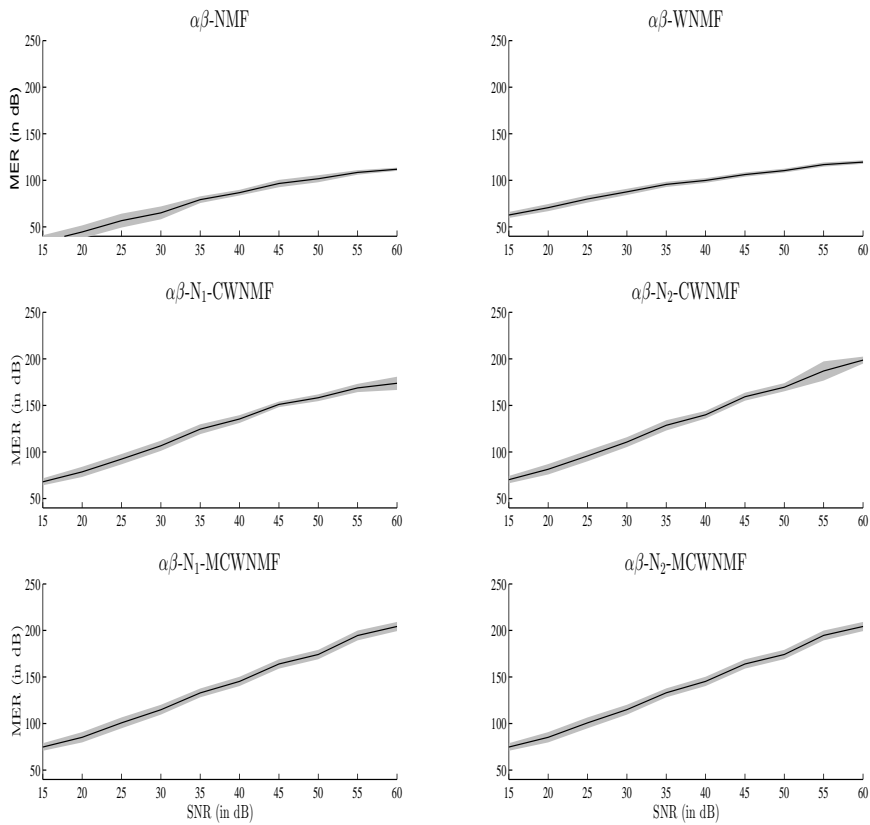


FIGURE 5.7 – Performances des différentes méthodes en fonction du SNR d’entrée (Moyenne et écart type des MER) pour $\alpha = 1$ et $\beta = 0.5$.

$\alpha\beta$ -WNMF) procurent de nombreuses solutions. Les méthodes informées sous contraintes de forçage fournissent au plus deux solutions tandis que les méthodes informées par le modèle physique donnent toujours une seule et unique solution aussi bien pour la normalisation 1 que pour la normalisation 2.

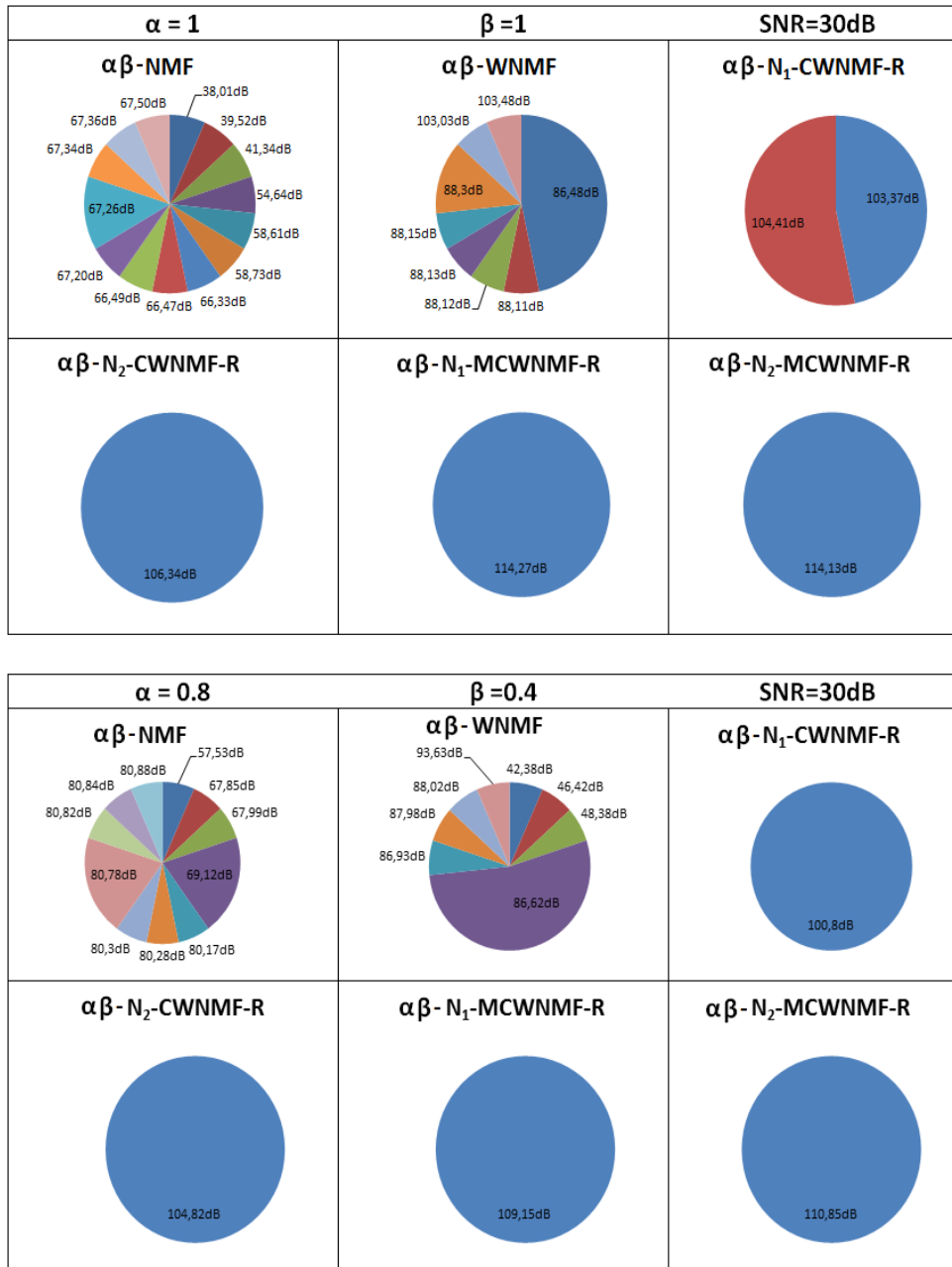


FIGURE 5.8 – Les solutions pour différentes initialisations pour les différentes méthodes (SNR=30dB).

La figure 5.9 rassemble les mêmes graphiques pour un SNR de 17dB. Il en ressort, qu’avec un bruit plus fort, la méthode avec modèle présente deux solutions différentes aux performances proches (N₁-MCWNMF-R). Quand le bruit augmente, les solutions potentielles sont globalement plus nombreuses et de moins bonne qualité.

En conclusion, les méthodes informées présentent globalement une meilleure résistance à l'initialisation que les méthodes non informées.

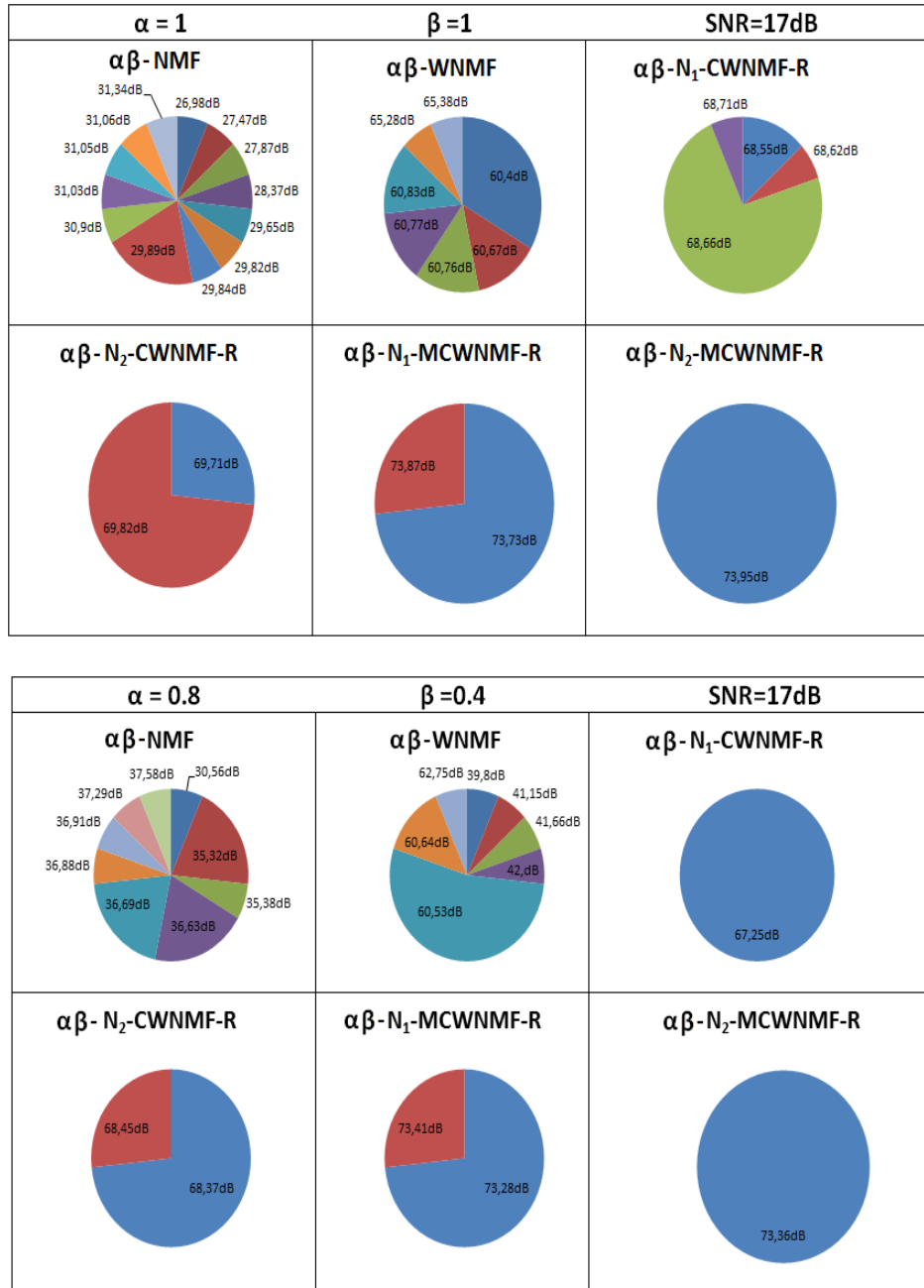


FIGURE 5.9 – Les solutions pour différentes initialisations pour les différentes méthodes (SNR=17dB).

5.8 Tests sur données réelles

5.8.1 Contexte

L'objet du projet est d'étudier l'origine des poussières en suspension dans l'air dans la ville de Dunkerque. Les poussières en suspension ciblées sont les PM_{2.5}, dont le diamètre, par définition, ne peut excéder 2.5 μ m. Ces particules sont un facteur important de risque pour la santé humaine car celles-ci sont inhalées de manière profonde dans les poumons et sont à l'origine des irritations chroniques des organes. De plus, si ces particules contiennent des composés toxiques, alors des conséquences plus néfastes (effets mutagènes) sont à envisager puisque celles-ci interagissent directement avec les organes.

La directive 1999/30/CE du 22 Avril 1999 définit les valeurs limites pour les particules PM₁₀ dans l'air ambiant qui est de 40 μ g/m³ depuis janvier 2005. En parallèle, la législation a évolué depuis 2010 pour les PM_{2.5} pour une valeur limite annuelle de 25 μ g/m³ en janvier 2015, avec un objectif à terme de 10 μ g/m³. Cependant, la communauté Européenne a pointé des pays comme la France où les concentrations moyennes de poussières dépassaient les valeurs limites de manière trop fréquente. Parmi les régions incriminées, la région Nord-Pas de Calais est particulièrement ciblée. Le site de Dunkerque est notamment représentatif pour son activité urbaine et industrielle multi-activités. L'entreprise ArcelorMittal, soucieuse de son impact environnemental, souhaite évaluer l'impact réel des sources à la fois industrielles mais aussi externes.

Quelques études ont été conduites sur le Dunkerquois dans le cadre des PM₁₀ [67], puis des études plus récentes en PM_{2.5} sur un ensemble de villes du littoral Nord-Pas-de-Calais [80]. Elles s'appuient toutes les deux sur le modèle de mélange linéaire auquel sont associés possiblement des contraintes d'ordre des sources dans chaque espèce. Cependant, Viana *et al.* [165] rapportent les faiblesses des méthodes de factorisation actuelles dans le cadre de la séparation des émissions de poussières fines. Par ailleurs, la séparation des particules minérales [53] est une tâche difficile puisque celles-ci sont émises à la fois par les sources industrielles et naturelles. L'objectif est donc de comparer les résultats de nos nouvelles méthodes à ceux obtenus dans [80].

5.8.2 Conduite du projet et instrumentation

Le projet consistait principalement en trois étapes :

- Les mesures étaient collectées toutes les 12 heures et correspondent à des périodes distinctes de l'hiver 2010 et du printemps 2011 prise au coeur de la ville de Dunkerque.

Le travail a été réalisé par l'Unité de Chimie Environnementale et Interactions sur le Vi-

vant (UCEIV), ULCO, sous la responsabilité du scientifique du Professeur Courcot et du Docteur Ledoux.

- La caractérisation chimique de l'ensemble des échantillons a été effectuée par l'UCEIV, toujours sous la responsabilité scientifique du Professeur Courcot et du Docteur Ledoux. L'accent a été mis sur les espèces ioniques, les éléments majeurs et éléments trace, et le carbone total. Cette part de travail est relatée par exemple dans [80].
- L'identification des sources a été confiée au Laboratoire d'Informatique, Signal et Image de la Côte d'Opale et a nécessité le développement d'un logiciel élaboré en C++ dans le cadre du projet avec le groupe ArcelorMittal Atlantique et Lorraine.

Le matériel d'instrumentation mis en place est un échantillonneur automatique de type DA80, développé par la société Digitel dont l'illustration est donnée sur la figure 5.10. Le principe de l'appareil est d'aspirer un volume d'air de manière périodique afin de piéger les particules présentes. Un système de filtrage permet de ne conserver sur le filtre (destiné à collecter les particules) uniquement celles qui correspondent aux PM2.5. Chaque filtre est ensuite stocké de manière automatisée, à la suite de quoi, un nouveau filtre est mis en place. Le choix des filtres est aussi discuté en détail dans [80]. L'appareil est capable d'enregistrer les heures et dates des mesures ainsi que les mesures de pression et température. En complément, des mesures de vent sont aussi disponibles à la période de 60 minutes. L'instrument de mesure a été implanté sur le toit de l'Université à Dunkerque, maintenu par des sangles attachées à des plaques de ciments (comme on peut le voir sur la figure 5.11), pour supporter des vents forts.

Ainsi, après analyse des différents filtres, nous avons à notre disposition un fichier de données reprenant les différentes informations relatives à un échantillon.

5.8.3 Les données

Le fichier de mesures qu'il nous est donné d'étudier regroupe 164 échantillons répartis sur l'hiver 2010 et le printemps 2011. Ces données rassemblent 28 espèces chimiques, dont certaines sont des ions, d'autres des espèces métalliques et enfin le carbone total. Le détail de ces espèces est donné dans le tableau 5.3. En correspondance à chaque mesure, nous disposons d'une incertitude caractérisant la précision de la mesure. Ainsi, nous disposons en réalité de deux matrices X et Σ utilisées comme données entrantes de la factorisation. Ces mesures sont datées et accompagnées d'informations liées aux conditions météorologiques.

5.8.4 Les sources en présence

Des études préalables [80] ont permis de mettre en évidence un certain nombre de sources qui peuvent être classées en sources naturelles, sources longues distances (particules ayant sé-

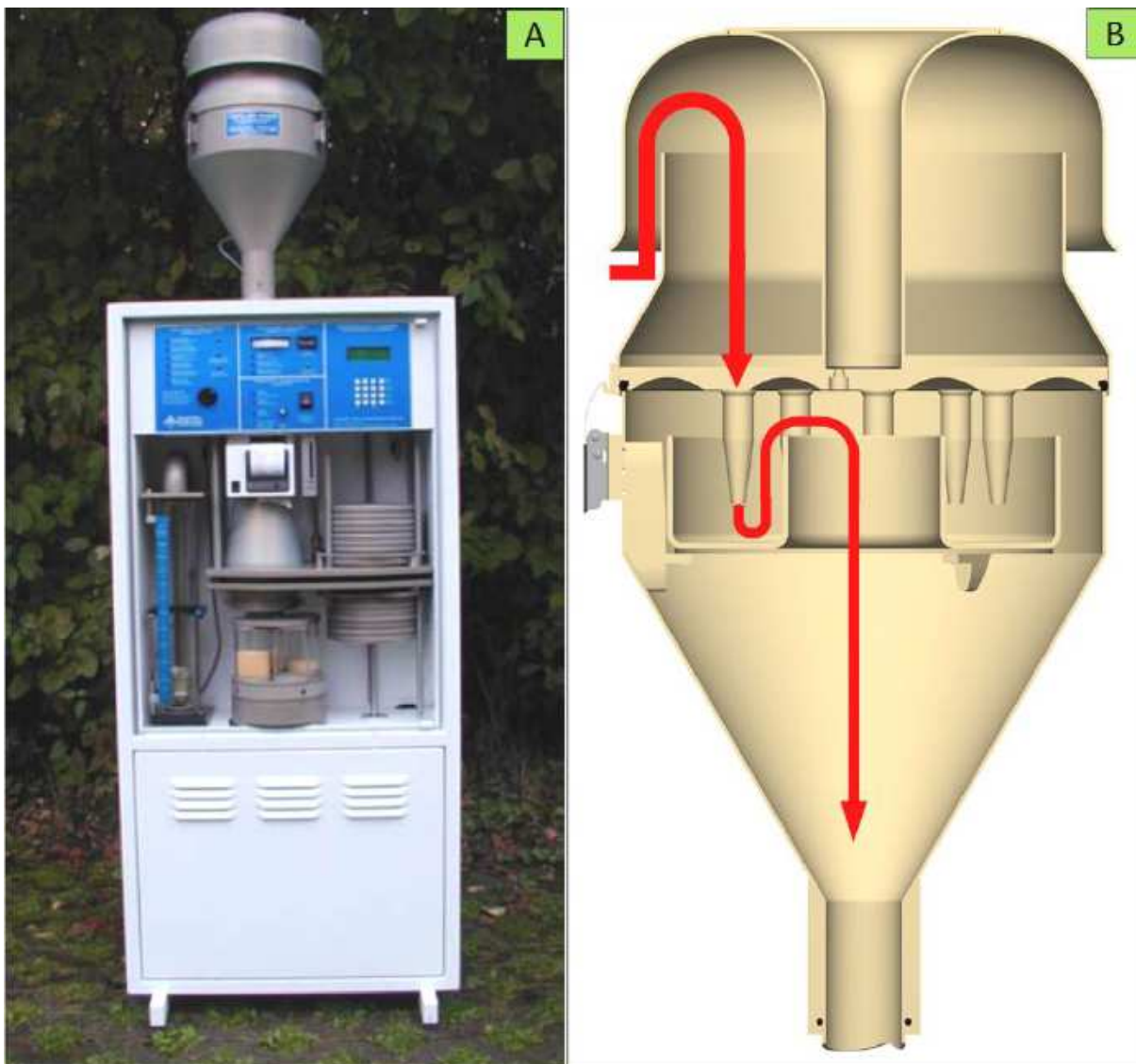


FIGURE 5.10 – Matériel utilisé pour l'échantillonnage.

jours longtemps dans l'atmosphère) ou sources anthropiques (dont les sources industrielles). Dans ce contexte, nous avons pu identifier au préalable onze sources, dont cinq peuvent correspondre à des sources naturelles. Nous pouvons identifier dans les six sources restantes, trois sources industrielles, deux sources liées au trafic automobile, et une source liée au chauffage urbain. Parmi les trois sources industrielles, deux sources sont imputables à l'unité d'agglomération du site ArcelorMittal. La caractérisation précise de l'ensemble des sources est difficile à réaliser. Nous ne pouvons donner une référence absolue de profils attendus. Les connaissances des experts se matérialisent d'une part par des rapports d'espèces caractéristiques majeures, d'autre part par l'absence de composés chimiques particuliers.

Pour des raisons de concision, nous choisissons de représenter graphiquement les profils



FIGURE 5.11 – Implantation du DA80.

obtenus pour uniquement 5 sources représentatives parmi les 11 recherchées (les autres sources estimées sont présentées dans l'Annexe D). La liste des sources est disponible dans le tableau 5.3. Deux sources liées à l'activité sidérurgique sont prises en compte par l'intermédiaire de l'unité d'agglomération. Ici, nous nous focalisons sur une source naturelle, la source *Marine*, une source de trafic appelée *trafic sauf échappement* et les sources industrielles à savoir la source *Ascométal*, la source *Agglomération ponctuelle* et la source *Agglomération secondaire*.

Les espèces associées à la source *Marine* sont, par ordre décroissant des proportions, Cl^- , Na, SO_4^{2-} , Mg, K et Ca. Le reste des espèces est donc absent de ce profil. La caractérisation courante de cette source est faite aussi par le rapport $\frac{\text{Cl}}{\text{Na}}$ voisin de 2. La source *Marine* présente un profil assez similaire à une autre source qualifiée de source *Marine agée* et la confusion avec cette dernière est donc possible.

Le profil de la source *Trafic sauf échappement*, contient des espèces métalliques que nous classons ici dans l'ordre décroissant des proportions, c.-à.-d. Cu, Sb, Fe, Zn, Al et Ca. Ces espèces résultent de l'usure des freins et des pneus. Ces espèces sont plutôt présentes sous forme de trace dans les mesures, d'où la difficulté de restaurer ce profil.

La source *Ascométal* est une source industrielle dont l'espèce majoritaire est le Zinc Zn, suivie des espèces Fe, Mg, Ca, Mn, Pb, Cr et Cu. Le reste des espèces est soit absent soit largement minoritaire.

La source *Agglomération secondaire* est une source industrielle située sur le site d'Arcelor-Mittal, cette source a pour espèce majoritaire le fer Fe, suivi des espèces Ca, Zn, Al, Mg et Mn. Le reste des espèces est soit absent soit largement minoritaire.

La source *Agglomération ponctuelle* est la seconde source située sur le site d'ArcelorMittal, et a pour espèce majoritaire le chlorure Cl^- , suivi des espèces K, Fe, TC, NH_4^+ , Ca et Na. Le reste des espèces est soit absent soit largement minoritaire.

5.8.5 Résultats des estimations des profils

Les profils d'intérêt ont été précisés dans le paragraphe précédent. Cependant, malgré cet état des lieux des sources, l'estimation des différents profils et contributions demeure une tâche très ardue. Plusieurs raisons font que cette entreprise est complexe :

- Les données sont soumises à des aberrations d'origines multiples, comme par exemple l'apparition d'une nouvelle source non prévue initialement dans la liste des sources potentielles.
- Une pollution de fond non attribuable à une source se superpose aux mesures.
- Les profils des sources sont parfois proches géométriquement et leur activité est de plus simultanée.
- Le nombre de sources ponctuelles est de 3, ce qui réduit l'apport des informations d'origine météorologiques.

Aucune référence de profil n'existe, nous n'avons aucun moyen de mesurer quantitativement la qualité des résultats. Ainsi, nous avons choisi de représenter les profils dans l'ordre des espèces décroissantes selon les connaissances de l'expert. Ceci permet à l'utilisateur d'observer de gauche à droite la décroissance des proportions si l'estimation est correcte. Dans le cas contraire, une espèce située sur la droite de la courbe en forte proportion constitue donc une anomalie.

Nous avons choisi de comparer nos résultats à ceux publiés dans [80] puisque les données sont identiques. Les méthodes utilisées en comparaison sont les méthodes $\alpha\beta$ -WNMF, $\alpha\beta$ -N₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -N₂-MCWNMF, $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF. Les tableaux de contraintes précisent quels types de contraintes sont utilisés pour les méthodes à l'étude. Ceux-ci ont été obtenus à partir d'essais multiples afin de garantir une solution acceptable. Le tableau 5.3 associé à la matrice $\Phi^E = 0$ est utilisé dans toutes les méthodes sauf la méthode $\alpha\beta$ -WNMF. Les tableaux 5.4–5.6 sont utilisées pour les méthodes avec bornes, c.-à-d., pour

les méthodes $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF.

Tableau 5.3 – Matrice Ω^E utilisée pour les tests sur données réelles.

	Al	Ca	Fe	K	Mg	Na	Ag	As	Ba	Cd	Co	Cr	Cu	Mn
Marine	1	0	1	0	0	0	1	1	0	1	1	1	0	1
Marine secondaire	1	0	1	0	0	0	0	1	0	1	0	0	1	1
Source Crustale	0	0	0	0	0	0	1	1	0	1	1	0	0	0
Sulfates secondaires	1	0	0	0	1	1	1	0	1	0	1	0	0	1
Nitrates secondaires	1	0	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	1
Agglomération secondaire	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
Agglomération ponctuelle	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Trafic échappement	0	1	0	0	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0
Trafic sauf échappement	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Combustion biomasse	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	0
Ascométal	0	0	0	1	0	1	0	0	1	0	1	0	0	0
	Ni	Pb	Rb	Sb	Sn	Sr	Ti	V	Zn	NH ₄ ⁺	Cl ⁻	NO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	TC
Marine	1	1	1	0	0	1	1	1	1	1	0	1	0	1
Marine secondaire	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
Source Crustale	0	1	0	1	1	0	0	1	1	1	0	0	0	0
Sulfates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Nitrates secondaires	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Agglomération secondaire	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1
Agglomération ponctuelle	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0
Trafic échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Trafic sauf échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	1	0
Combustion biomasse	1	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0
Ascométal	0	0	0	0	0	1	1	1	0	1	0	0	1	1

Tableau 5.4 – Matrice Ω^I utilisée pour les tests sur données réelles.

	Al	Ca	Fe	K	Mg	Na	Ag	As	Ba	Cd	Co	Cr	Cu	Mn
Marine	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Marine secondaire	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Source Crustale	1	0	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Sulfates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Nitrates secondaires	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Agglomération secondaire	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Agglomération ponctuelle	0	0	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1
Trafic échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Trafic sauf échappement	1	1	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	1	1
Combustion biomasse	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Ascométal	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	Ni	Pb	Rb	Sb	Sn	Sr	Ti	V	Zn	NH ₄ ⁺	Cl ⁻	NO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	TC
Marine	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
Marine secondaire	1	0	0	0	0	0	0	1	0	1	1	0	1	1
Source Crustale	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	1	1
Sulfates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	1
Nitrates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1
Agglomération secondaire	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	1	0
Agglomération ponctuelle	0	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	1	1
Trafic échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	1	0
Trafic sauf échappement	1	1	0	1	1	0	0	0	1	0	1	0	0	1
Combustion biomasse	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
Ascométal	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0

Nous avons effectué de multiples essais pour différentes valeurs des paramètres (α, β) , et nous avons observé dans le jeu de paramètres utilisés dans le chapitre 4 une grande stabilité des résultats dans une zone centrée autour des paramètres $\alpha = 0.8$ et $\beta = 0.4$. Nous rapportons donc ici les essais obtenus pour ces paramètres.

Le profil de la source *Marine* est donné sur la figure 5.12 pour toutes les méthodes étudiées. Nous pouvons constater que, pour la méthode $\alpha\beta$ -WNMF, le *Carbone total* TC devrait être

Tableau 5.5 – Matrice Φ^{I-} utilisée pour les tests sur données réelles.

	Al	Ca	Fe	K	Mg	Na	Ag	As	Ba	Cd	Co	Cr	Cu	Mn
Marine	0	0	0	0	0	110	0	0	0	0	0	0	0	0
Marine secondaire	0	0	0	0	0	140	0	0	0	0	0	0	0	0
Source Crustale	320	0	50	90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Sulfates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Nitrates secondaires	0	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Agglomération secondaire	1	120	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Agglomération ponctuelle	0	0	50	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
Trafic échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Trafic sauf échappement	30	0.05	90	0	0	0	0	0	0.05	0	0	0	50	0
Combustion biomasse	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Ascométal	0	5	0	0	110	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	Ni	Pb	Rb	Sb	Sn	Sr	Ti	V	Zn	NH ₄ ⁺	Cl ⁻	NO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	TC
Marine	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	60	0
Marine secondaire	0	0	0	0	0	0	0	0	0	30	0	0	140	10
Source Crustale	0	0	0	0	0	0	5	0	0	0	0	0	25	0
Sulfates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	140	0	0	0	10
Nitrates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	150	0	0	0	150
Agglomération secondaire	0	0	0	0	0	0	0	0	80	0	0	0	0	0
Agglomération ponctuelle	0	0	0	0	0	0	0	0	0	30	300	0	0	20
Trafic échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	90	0	0	1	135	0
Trafic sauf échappement	0	0	0	90	0	0	0	0	30	0	0	0	0	0
Combustion biomasse	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	20	400
Ascométal	0	0	0	0	0	0	0	0	350	0	0	0	0	0

Tableau 5.6 – Matrice Φ^{I+} utilisée pour les tests sur données réelles.

	Al	Ca	Fe	K	Mg	Na	Ag	As	Ba	Cd	Co	Cr	Cu	Mn
Marine	0	0	0	0	0	400	0	0	0	0	0	0	0	0
Marine secondaire	0	20	0	0	0	200	0	0	0	0	0	0	0	0
Source Crustale	800	0	180	200	0	30	0	0	0	0	0	0	0	0
Sulfates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Nitrates secondaires	0	200	50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Agglomération secondaire	50	250	0	40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Agglomération ponctuelle	0	0	130	300	0	70	0	0	0	0	0	0	0	10
Trafic échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Trafic sauf échappement	100	50	160	50	0	0	0	0	5	0	0	0	400	30
Combustion biomasse	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Ascométal	0	100	0	0	200	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	Ni	Pb	Rb	Sb	Sn	Sr	Ti	V	Zn	NH ₄ ⁺	Cl ⁻	NO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	TC
Marine	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	150	0
Marine secondaire	20	0	0	0	0	0	0	30	0	10	80	0	400	15
Source Crustale	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	30	50	65
Sulfates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	300	10	150	0	150
Nitrates secondaires	0	0	0	0	0	0	0	0	0	400	0	0	0	400
Agglomération secondaire	30	0	0	0	0	0	0	0	200	30	0	0	30	0
Agglomération ponctuelle	0	50	0	0	0	0	0	0	0	100	500	0	50	110
Trafic échappement	0	0	0	0	0	0	0	0	200	0	0	50	300	0
Trafic sauf échappement	30	50	0	400	70	0	0	0	110	0	15	0	0	50
Combustion biomasse	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	90	150	650
Ascométal	0	0	0	0	0	0	0	0	700	0	0	3	0	0

absent alors qu'il est prépondérant. Par ailleurs, le rapport $\frac{Cl^-}{Na}$ n'est pas du tout cohérent pour cette méthode à cause d'un déficit flagrant en Na. De même, les résultats obtenus par [80] ne sont pas complètement satisfaisants de ce point de vue (rapport approximativement égal à 4 au lieu de 2). Finalement, les méthodes informées ($\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF) sont celles qui s'approchent le plus de l'expertise chimique.

Le profil de la source *Trafic sauf échappement* est donné sur la figure 5.13. Nous pouvons y remarquer que les méthodes $\alpha\beta$ -WNMF, $\alpha\beta$ -N₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -N₂-MCWNMF ont donné un profil non-satisfaisant en rendant majoritaire le TC. De même, la méthode de [80] a sous-estimé

largement la présence du Cu. La méthode la plus satisfaisante est une fois encore l'approche informée $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF qui fournit un profil assez équilibré.

Le profil de la source *Ascométal* (figure 5.14) est censé être majoritairement constitué de Zn. Les profils de toutes les méthodes sont plutôt satisfaisants, en dehors des méthodes $\alpha\beta$ -N₂-CWNMF et $\alpha\beta$ -N₂-MCWNMF qui ont trouvé une espèce minoritaire en grande importance. Toutefois, la méthode de [80] a surestimé la présence de Zn. Seules les méthodes $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF sont complètement en accord avec le profil attendu. Dans la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF, l'estimation des proportions est très correcte jusque la 8^e espèce.

Les deux sources *Agglomération secondaire* et *Agglomération ponctuelle* représentent le site de Dunkerque de l'entreprise ArcelorMittal. Le profil de la source *Agglomération secondaire* est donné en figure 5.15. Il représente les émissions localement diffuses à basse altitude mais pouvant être considérées comme ponctuelles au milieu de l'unité d'agglomération d'ArcelorMittal à l'échelle de la distance source-captteur. Ce profil est censé comporter majoritairement du Fe et du Ca. Seules les méthodes de [80] et $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF donnent un profil acceptable. La méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF fournit des estimations des espèces minoritaires plus cohérentes par rapport à [80].

Le profil de la source *Agglomération ponctuelle* est représentée en figure 5.16. Il correspond aux émissions des cheminées de cuisson de l'unité d'agglomération. Seules les méthodes de [80], $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF et $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF fournissent un profil acceptable en respectant les espèces majeures. Toutefois, la méthode de [80] ne fournit pas de TC alors que les deux méthodes $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF et $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF sont cohérentes de ce point de vue. Le reste des profils sont accessibles en annexe D.

En conclusion, sur les 5 profils présentés dans cette section (et le reste des profils qui ne sont pas présentés pour des raisons de concision), les deux méthodes $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF, $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF donnent des performances réellement satisfaisantes du point de vue des experts chimistes. Nous ne sommes cependant pas en mesure d'affirmer que les informations d'origine météorologiques seules sont suffisantes pour fournir un profil cohérent. L'association de l'ensemble des contraintes a cependant permis d'apporter une amélioration importante dans la qualité des profils. Nous allons compléter ces informations par une observation des concordances entre espèces chimiques estimées et mesurées.

5.8.6 Concordance des estimations par espèce chimique

La cohérence des profils n'est pas le seul élément permettant de qualifier les résultats. La concordance des estimations et des concentrations peut être observée dans un graphe pour l'en-

semble des échantillons. En effet, en ré-estimant les observations \hat{X} à partir des estimations de G et F , on peut mesurer sa distance par rapport aux données observées X . En toute rigueur et dans un cas idéal non-bruité, la représentation des espèces chimiques estimées en fonction des données correspondantes doivent être alignées selon la droite $y = x$. La qualité d'estimation de $\hat{x}_j \quad \forall j \in \{1, \dots, m\}$ peut donc être mesurée par la régression par moindres carrés du nuage de points (x_{ij}, \hat{x}_{ij}) . Cependant, en pratique, à cause des points aberrants, nous avons choisi de ne régresser que 80% des points : ceux divergeant le moins des données observées. En pratique, en plus de la pente de la droite de régression (qui doit être le plus proche de 1), nous avons calculé la corrélation de régression. Enfin, pour des raisons de concision, nous avons choisi de ne représenter cette concordance que pour 3 méthodes :

- l'approche de [80],
- la factorisation aveugle pondérée $\alpha\beta$ -WNMF
- et la méthode informée $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF.

La figure 5.17 rassemble les différentes espèces chimiques pour la méthode issue de [80]. On peut y noter l'absence de concordance pour 6 espèces mineures rencontrées à l'état de traces. La figure 5.18 montre la concordance des espèces pour la méthode $\alpha\beta$ -WNMF. On constate que la corrélation est bonne pour la plupart des espèces, obtenus cependant au prix de profils tout à fait incohérents. La figure 5.19 indique une concordance correcte entre espèces pour la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF, de qualité supérieure à la méthode donnée dans [80] mais de moins bonne qualité que la méthode $\alpha\beta$ -WNMF. Globalement, la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF procure des profils physiquement très réalistes associés à des concordances d'espèces chimiques convenables.

5.8.7 Examen des contributions et des origines des poussières par groupe d'émetteurs.

Nous avons choisi de représenter ici les contributions de chacune des 3 sources industrielles en fonction du numéro d'échantillon. La figure 5.20 rassemble ces différentes contributions pour la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF. On peut par exemple constater que l'échantillon 15 est un échantillon remarquable car la méthode a conservé deux sources industrielles (orientées dans des directions différentes du capteur) parmi les 3, car le vent a tourné au cours de la période. Les pics de contribution industrielles sont visibles et ces informations permettent à l'utilisateur de reconstruire la part des émissions industrielles dans les échantillons. Afin de voir l'impact des différentes sources dans les données, nous avons regroupé quelques sources par familles à savoir :

- Les sources *Marine* et *Marine secondaire* deviennent la source *Mer*.

- Les sources *Sulfates secondaires* et *Nitrates secondaires* sont la source *Aérosols secondaires*.
- Les sources *Trafic échappement* et *Combustion biomasse* deviennent la part appelée *Combustion*
- Les sources *Agglomération secondaire*, *Agglomération ponctuelle* et *Ascométal* sont regroupés dans la part *Industrie*.

Nous avons mis en évidence sur la figure 5.21 la participation des différentes sources dans les données. Nous pouvons voir que l'industrie n'est pas la source la plus importante en terme de pollution générale. Nous remarquons également la forte participation des sources *aérosols secondaires* (*Sulfates et Nitrates secondaires*) et *Combustion* (*Trafic échappement et Combustion biomasse*) dans les données.

Par contre, en regardant les données concernant l'espèce Fe sur la figure 5.22, nous remarquons que l'industrie est la source qui en émet le plus, au contraire de la source combustion qui est quasiment inexistante.

5.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé de tenir compte des informations de type météorologiques par l'utilisation de modèles physiques de propagation dans l'air. Ces modèles alimentés par les connaissances des sources et des conditions atmosphériques ont permis de renseigner la structure de la matrice de contribution du modèle de mélange. Cette information de structure a été utilisée pour initialiser les matrices de contribution et par conséquent, aussi pour les différentes variantes des méthodes informées de NMF.

Ces méthodes utilisant un modèle ont été expérimentées dans le cadre de données synthétiques, provenant de profils et de mesures de vent synthétiques. Elles ont mis en évidence une amélioration sensible des performances dans toute la plage de SNR étudiés. Même si en bruit fort, l'apport est moindre, il reste néanmoins perceptible.

Enfin, nous avons expérimenté nos méthodes avec modèles et sans modèles sur un jeu de données réelles issues du site industriel et urbain de Dunkerque. Nous avons montré que les profils obtenus avec les méthodes $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF étaient globalement plus satisfaisantes que les autres méthodes dont [80] et procuraient une meilleure interprétabilité chimique des profils que les autres méthodes, en particulier, la méthode $\alpha\beta$ -WNMF.

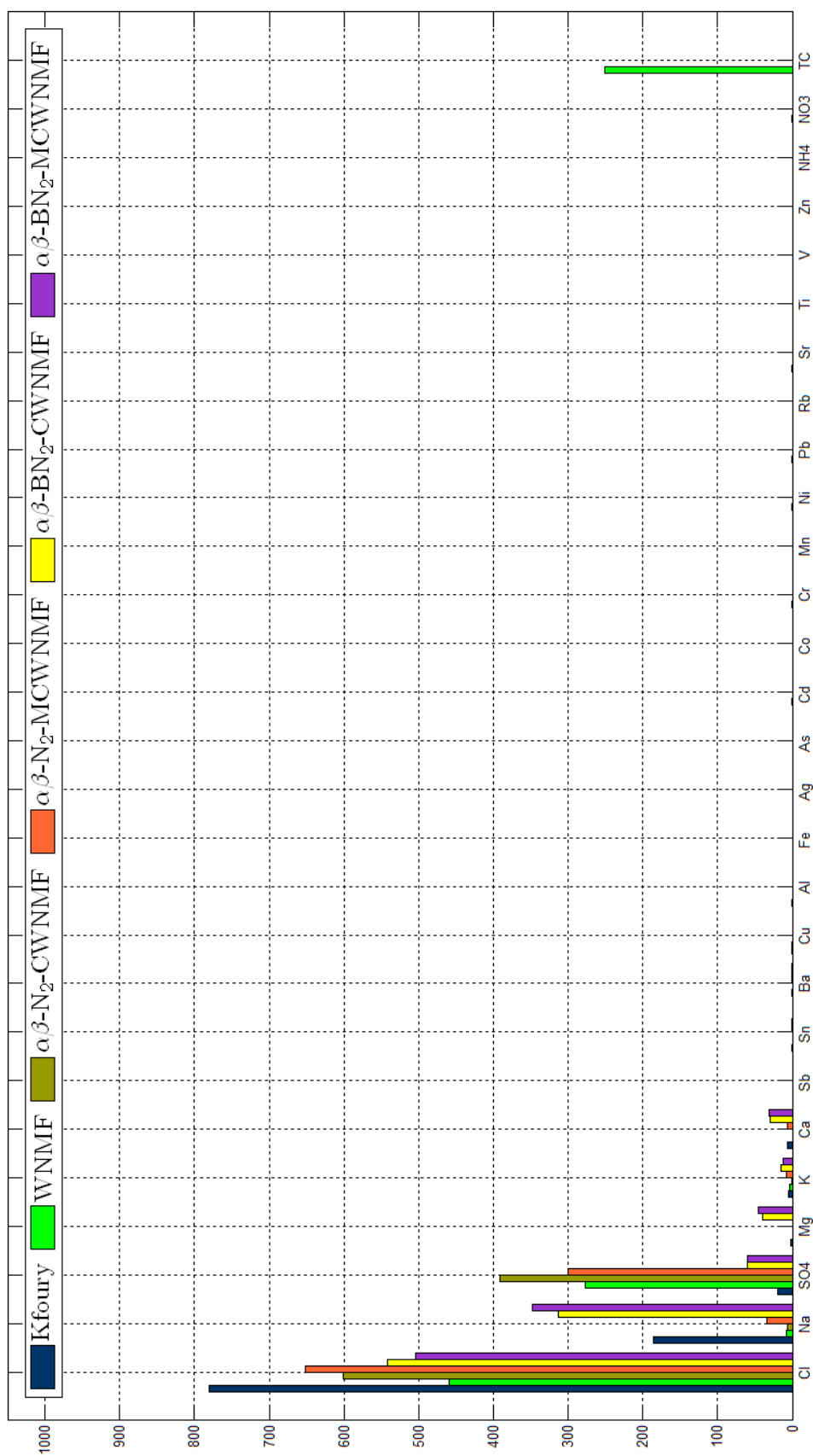


FIGURE 5.12 – Estimation du profil de la source marine.

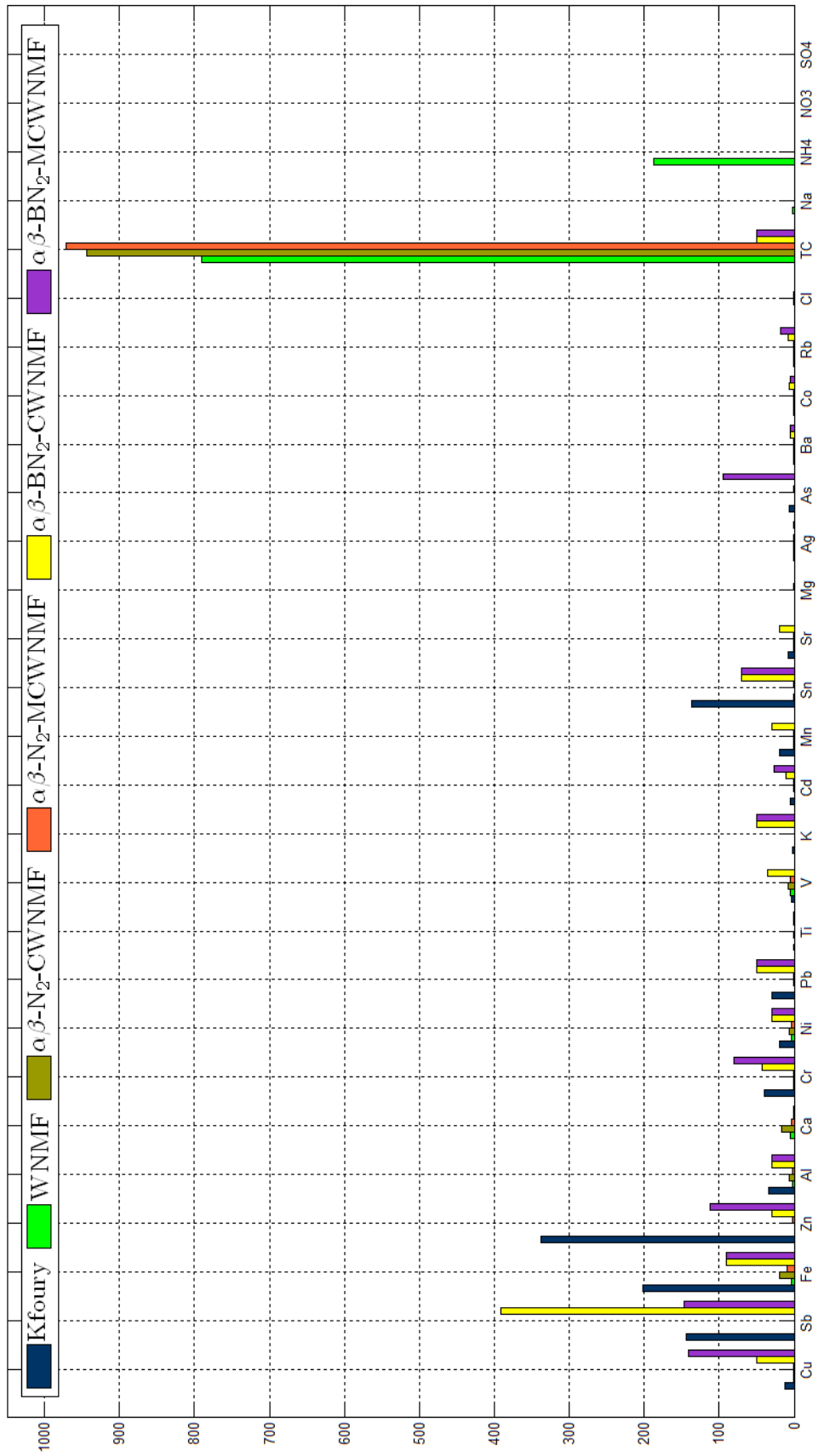


FIGURE 5.13 – Profil de la source Trafic sauf échappement.

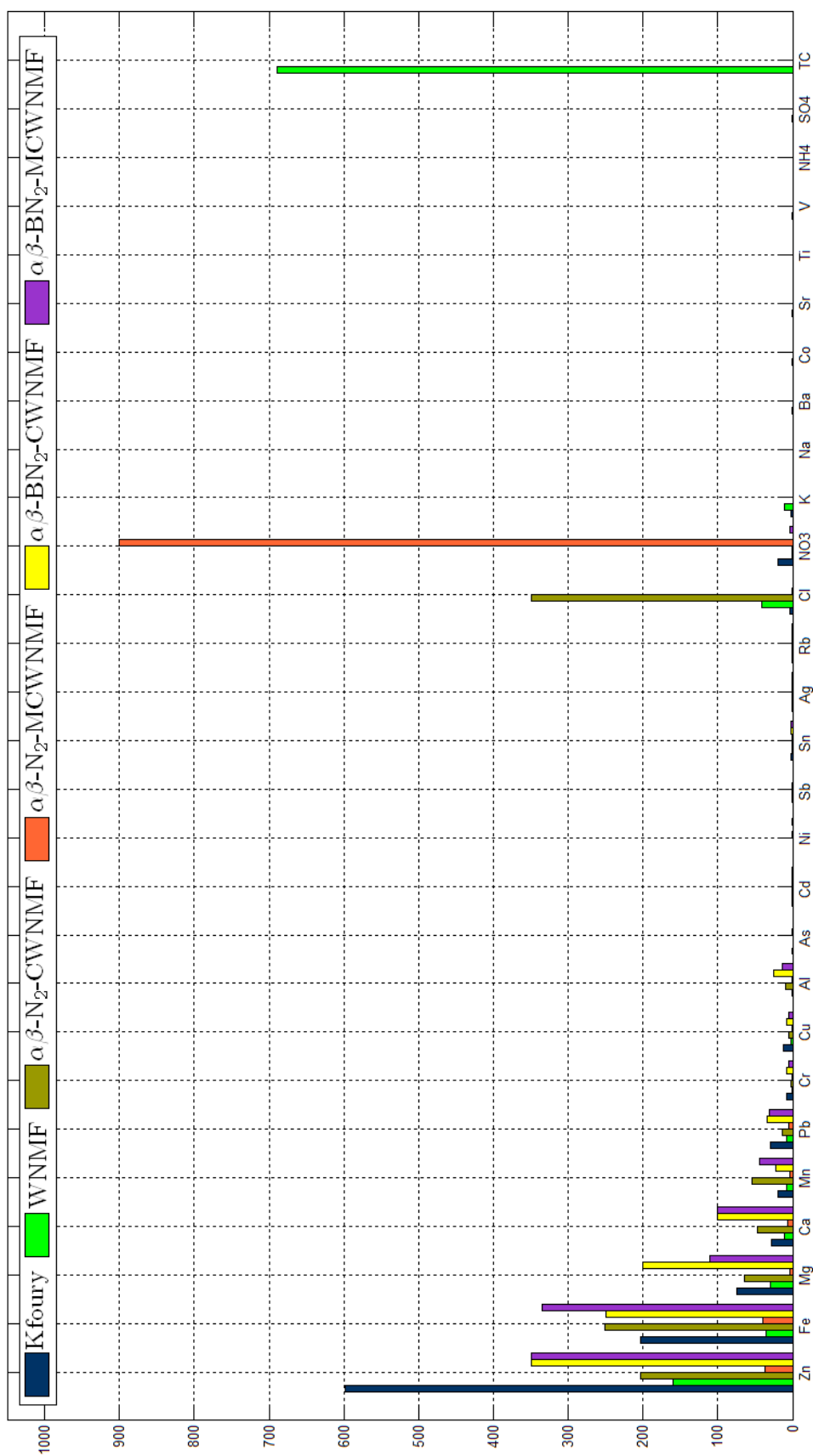


FIGURE 5.14 – Profil de la source Ascométal.

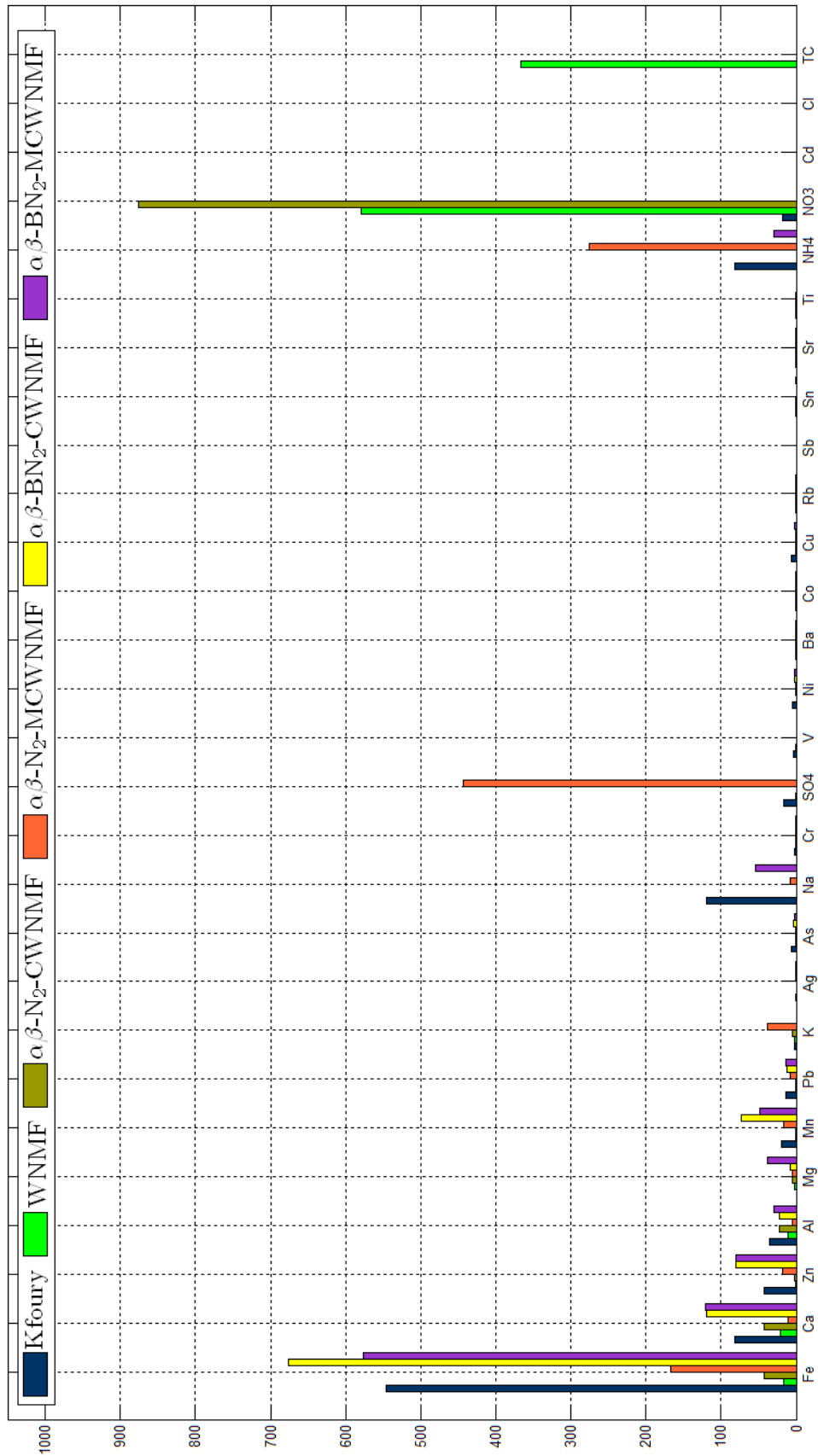


FIGURE 5.15 – Profil de la source *Agglomération secondaire*.

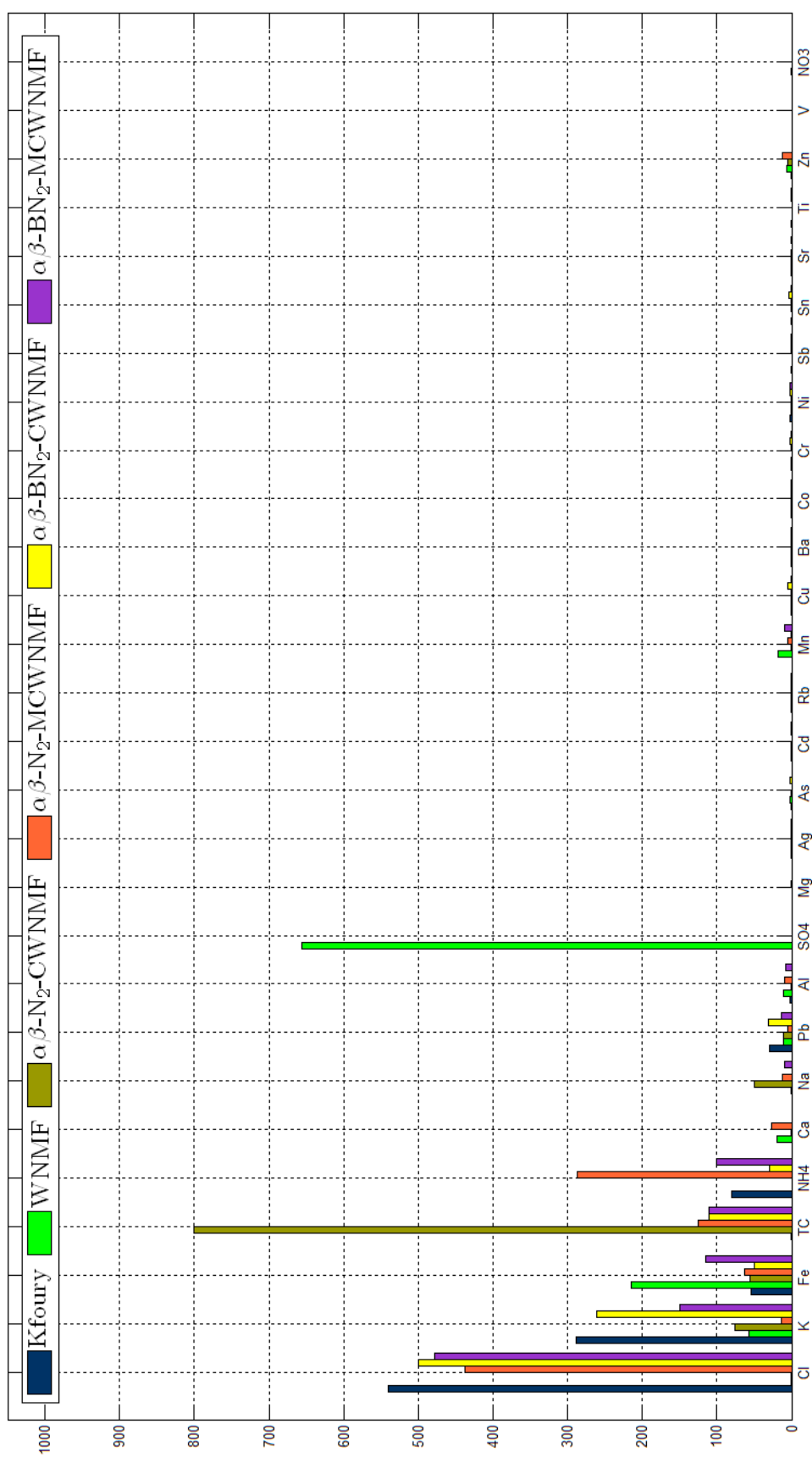


FIGURE 5.16 – Profil de la source *Source d'agglomération ponctuelle*.

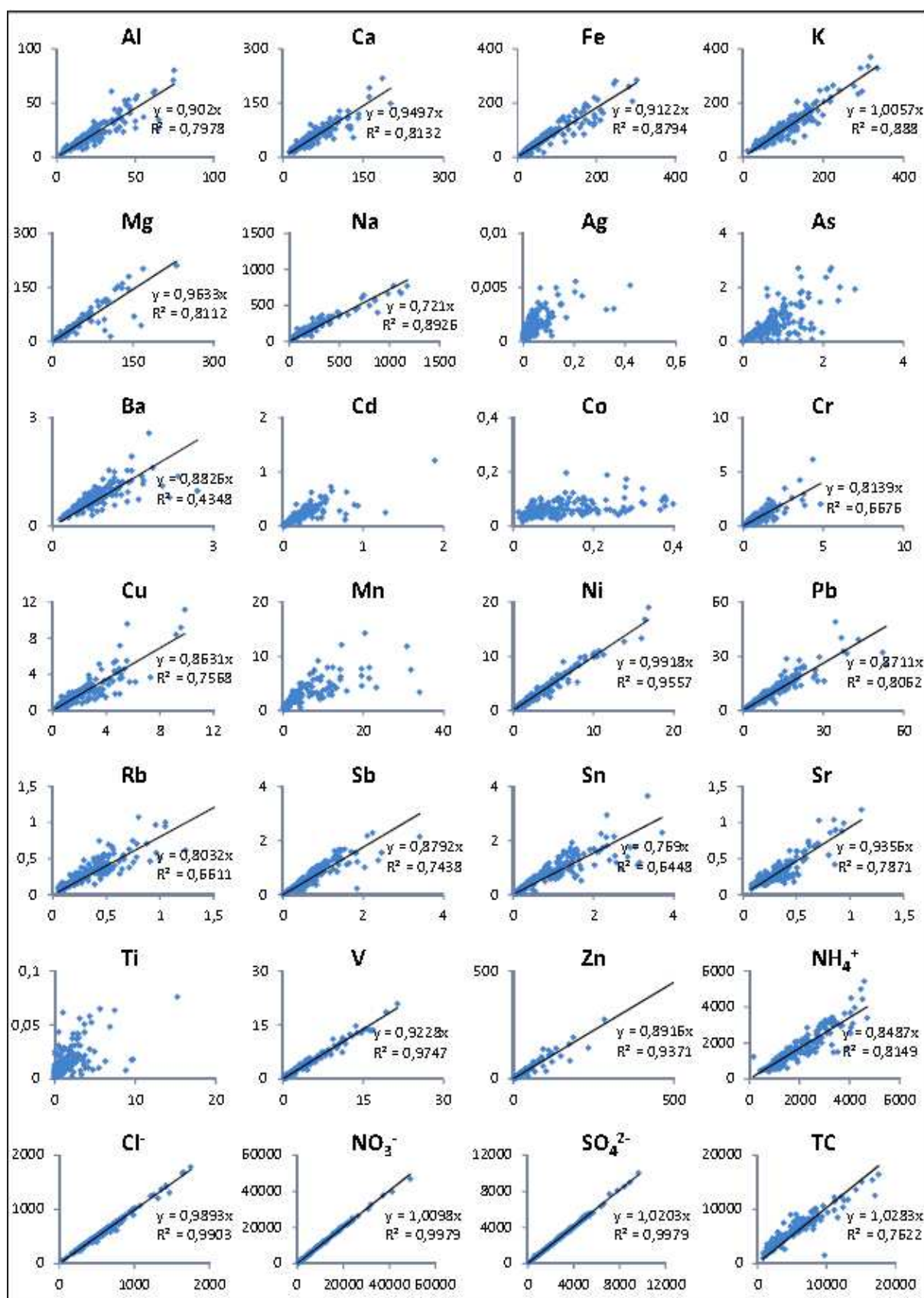


FIGURE 5.17 – Données estimées vs données réelles obtenues par [80].

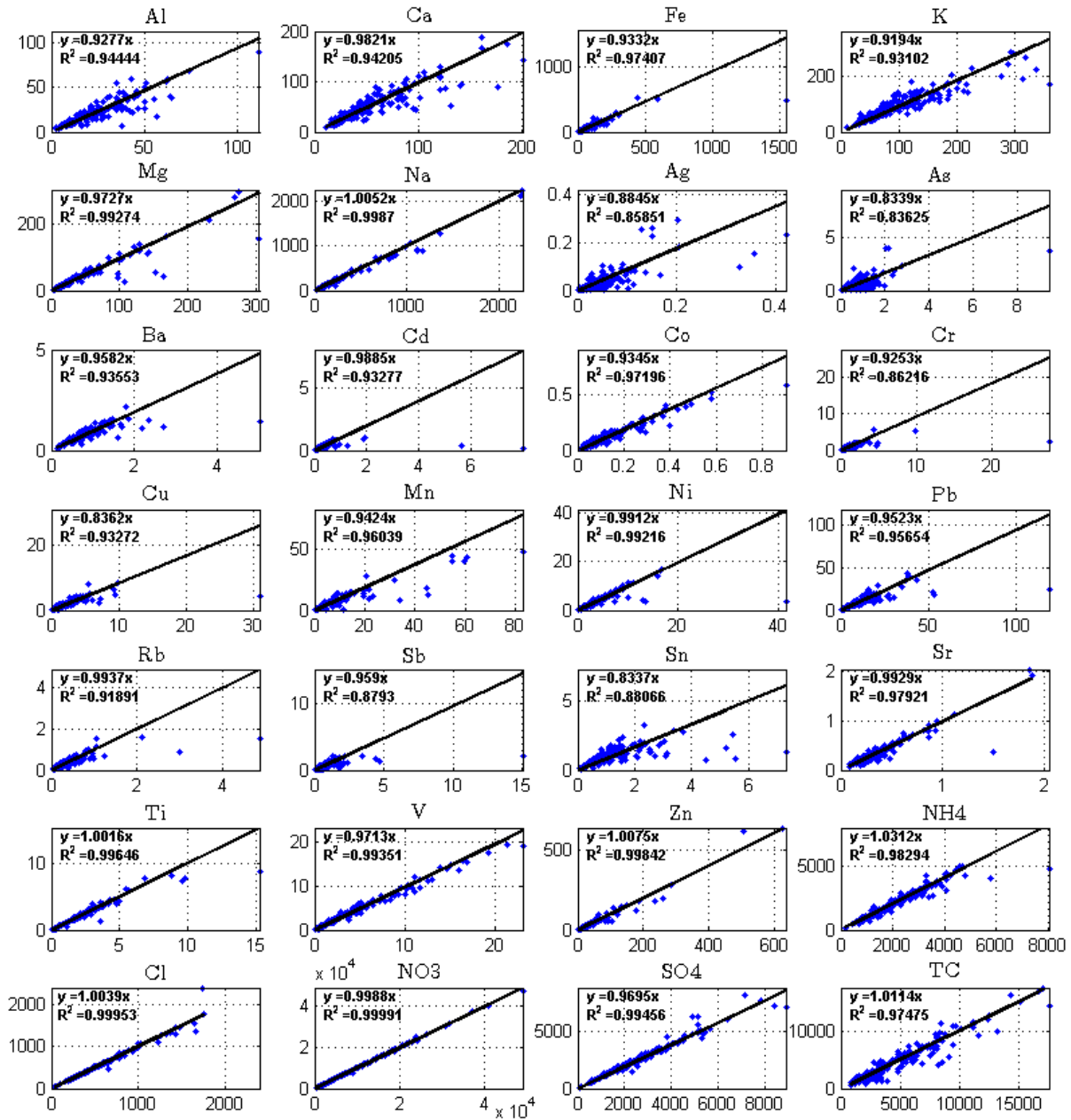
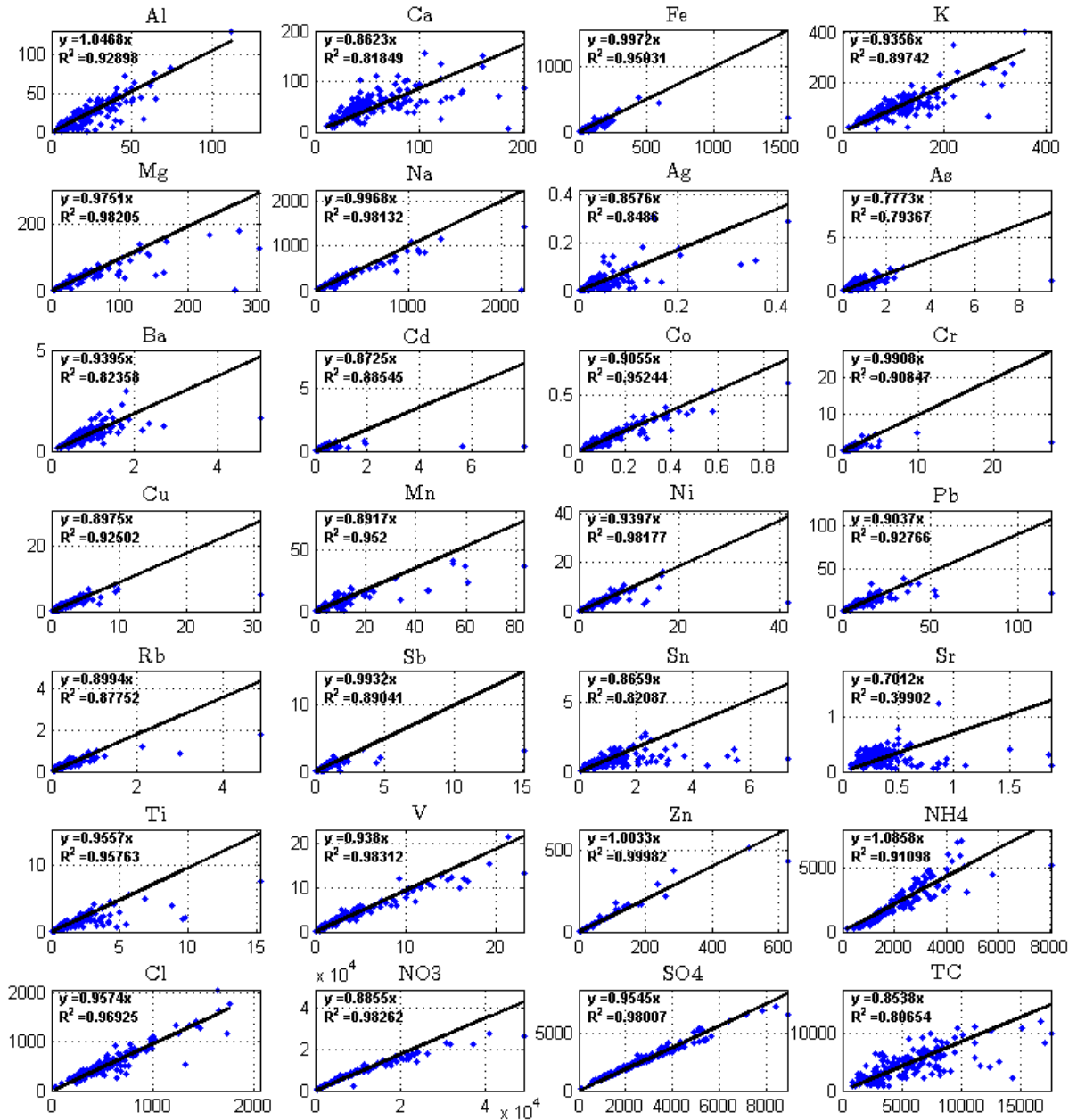


FIGURE 5.18 – Données estimées vs données réelles par la méthode $\alpha\beta$ -WNMF.

FIGURE 5.19 – Données estimées vs données réelles par la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF.

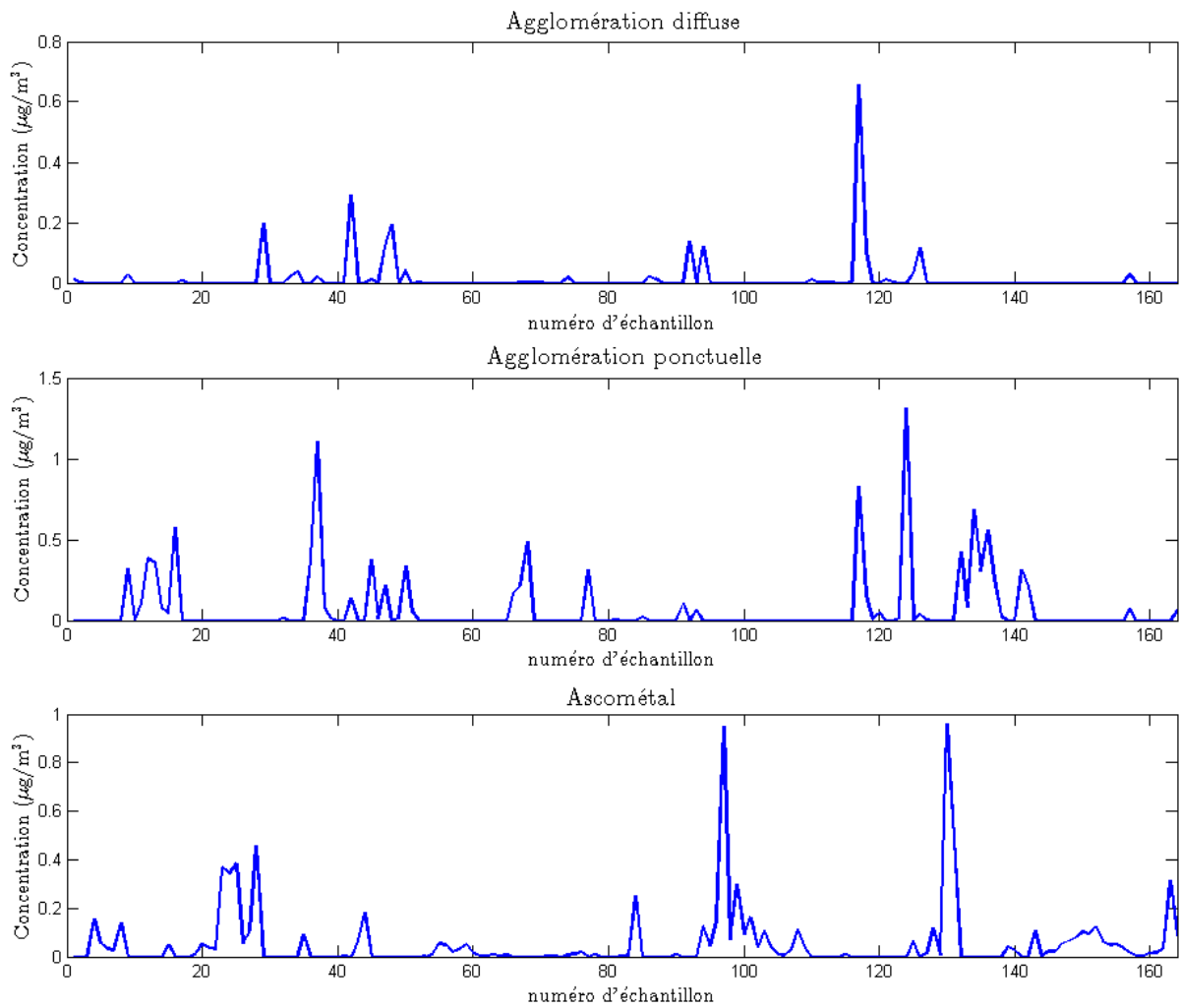


FIGURE 5.20 – Contributions des sources industrielles par la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF.

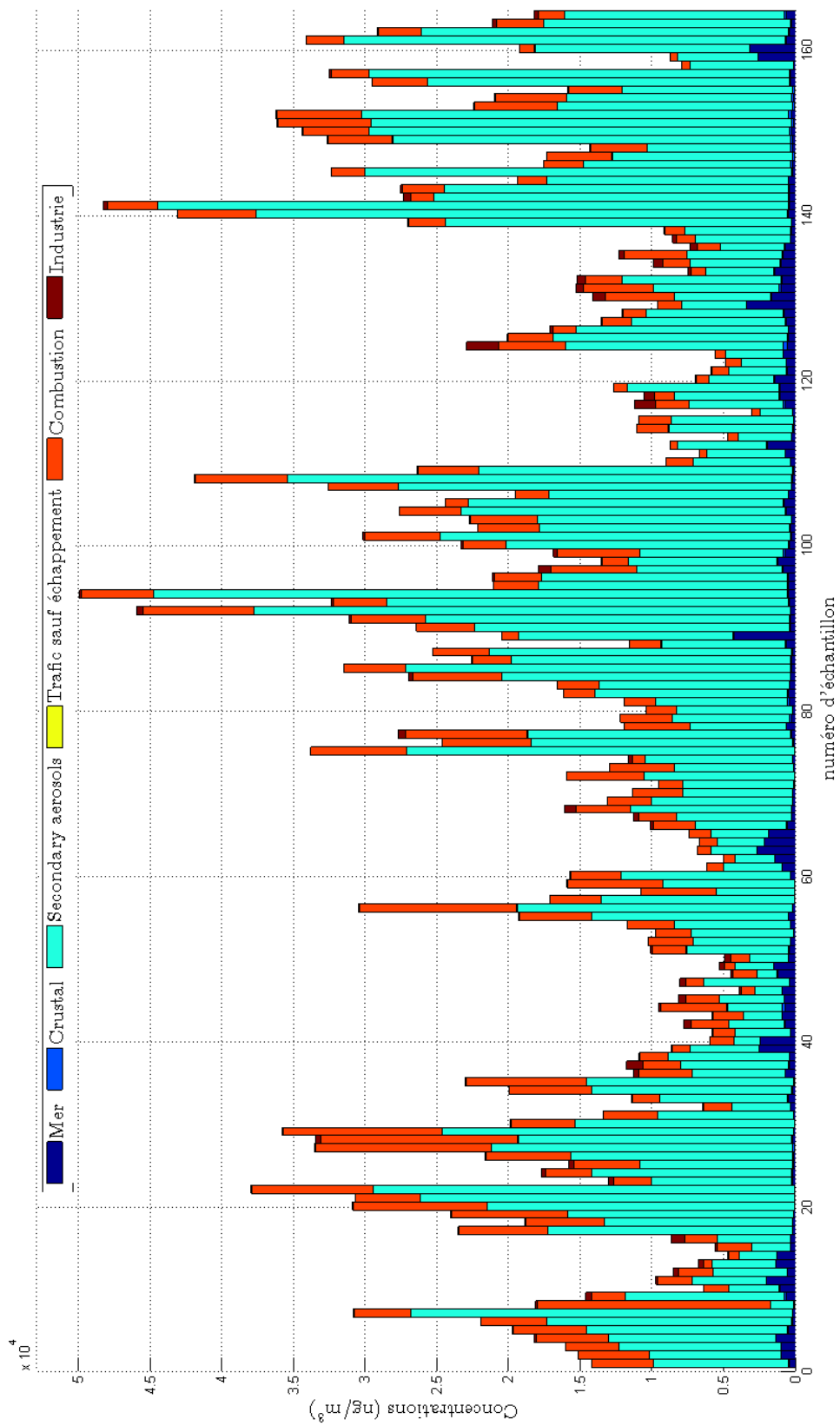


FIGURE 5.21 – Estimation de la participation des sources dans les données

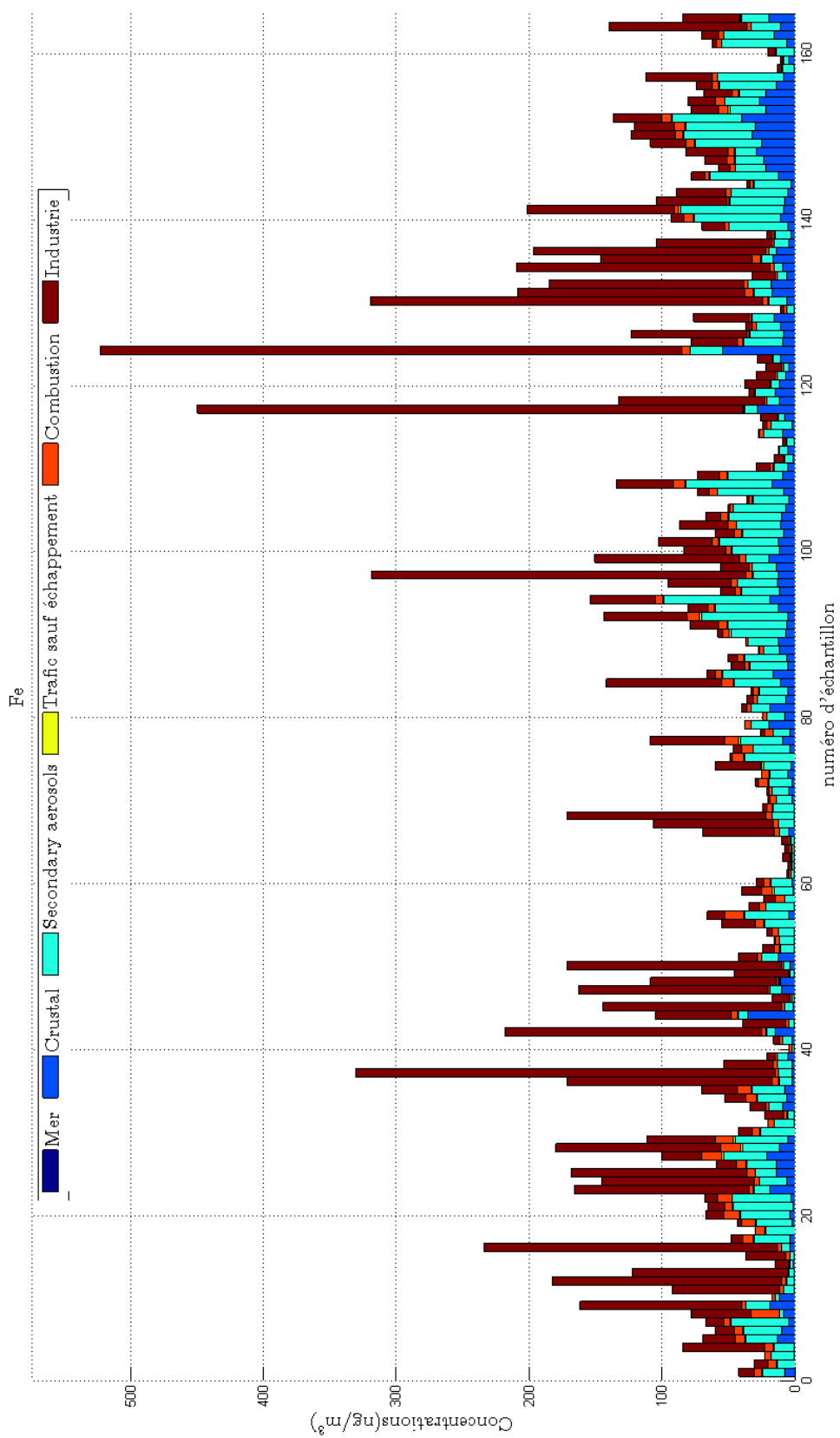


FIGURE 5.22 – Estimation de l'espèce Fe dans les données

Chapitre 6

Conclusion générale

Arrivé au terme de cette étude, nous pouvons en tirer les conclusions et examiner dans quelle mesure nous avons répondu aux questions soulevées dans les chapitres introductifs.

6.1 Bilan

Dans la première partie de ce document, nous avons discuté des différents modèles de mélanges linéaires rencontrés classiquement dans la littérature et nous avons formulé ces mélanges comme des problèmes de factorisation matricielles. Nous avons aussi abordé les informations complémentaires à cette factorisation. Les contraintes additionnelles usuelles se déclinent en l'orthogonalité, l'indépendance, la parcimonie, la non-négativité, et ou la somme à 1 des facteurs. Nous nous sommes orientés vers les méthodes à base de non-négativité comme connaissance principale de la problématique abordée.

Le second chapitre s'intéresse aux différentes classes de méthodes de résolution du problème de NMF Euclidien, en particulier, les méthodes multiplicatives et les méthodes à gradients projetés. Il indique aussi les conditions de stationnarité, qui représentent les conditions nécessaires d'un minimum local. Puis, nous avons étendu la notion d'écart quadratique à la notion de divergences paramétriques. Ces dernières permettent de tolérer certains points aberrants dans les données, rendant robuste leur usage dans la NMF. La notion de poids a aussi été introduite dans les critères de NMF afin de tenir compte des mesures dans des gammes de valeurs très différentes. Nous avons donc retenu une fonction de coût appelée divergence $\alpha\beta$ pondérée, comme la fonction à minimiser dans notre problématique. Les méthodes multiplicatives se sont imposées dans nos choix pour leur simplicité d'implémentation et la faculté de préservation de structure.

Afin de limiter le nombre potentiel de points stationnaires, nous avons orienté nos travaux vers les NMF informées. L'information que nous avons introduite est d'abord la connaissance

partielle de certains profils. Nous avons pour cela établi une paramétrisation qui intègre cette information de manière explicite. La stratégie de Majoration Minimisation a permis finalement de développer des règles de mise à jour pour arriver à la solution du problème de NMF avec fonction de coût de type divergence $\alpha\beta$ pondérée. Ces règles dépendant de ces paramètres permettent d'englober les divergences usuellement étudiées. Des variantes de ces règles ont pu aussi être établies en appliquant la divergence aux résidus de cette paramétrisation. Les points limites fournis par ces méthodes sont compatibles avec les conditions de KKT énoncées dans ce chapitre.

Une autre information concernant la normalisation des profils a été prise aussi en compte. Nous avons considéré cette information consécutivement à celle de la connaissance partielle des profils. Ces règles peuvent être condensées en une seule étape et donnent lieu à un ensemble de méthodes associées. Enfin la notion de bornes minimales et maximales a été introduite dans les algorithmes sous forme de projection dans l'espace admissible. Nous avons développé un ensemble de règles appropriées pour résoudre le problème posé en fonction de :

- l'ordre des contraintes de bornitude et de normalisation,
- le choix de la normalisation,
- le choix d'une divergence sur les données estimées ou sur les résidus de notre paramétrisation.

Des expérimentations ont été conduites sur un jeu de données synthétiques de taille réduite. Des comparaisons ont été conduites sur une gamme de SNR des mesures variant de 15 à 60 dB. Le gain en performances pour les méthodes à base de normalisation, bornitude et forçage de profils est très bon sur les SNR élevées mais reste modeste pour les SNR faibles. Ceci est en partie dû au fait que l'information apportée jusque là porte sur la matrice de profil tandis que l'indice de qualité s'applique à la matrice de contribution. L'erreur d'estimation est donc essentiellement due à l'erreur sur les mesures.

Nous avons proposé aussi d'apporter une information sur la matrice de contribution. Nous avons en particulier utilisé un modèle physique de propagation alimenté par des mesures de vent afin de déterminer l'activité de la source perçue au niveau du capteur. Cela a permis de structurer, d'une part la recherche de l'initialisation de la contribution et d'autre part, les différentes variantes de NMF informées. Ces méthodes s'appuyant sur un modèle ont été testées sur des données synthétiques et ont montré une amélioration sensible dans la qualité des performances sur toute la plage de SNR. Les méthodes avec modèle ont été expérimentées sur un jeu de données réelles provenant d'un site industriel et urbain, sous l'influence de sources multiples. Nous avons observé que la méthode avec modèle $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF était susceptible de fournir des profils très satisfaisants pour un choix de paramètres α , β adéquats et supérieurs aux méthodes de la littérature. Celle-ci a par ailleurs montré une concordance entre espèces chimiques

au moins équivalente aux autres méthodes.

6.2 Perspectives

Néanmoins, malgré ces constats encourageants, nous pouvons cependant mettre l'accent sur les points qui peuvent encore être améliorés et qui mériteraient une étude approfondie :

- Les paramètres actuels α , β de la fonction de coût sont choisis de telle sorte à respecter les espèces majeures. Dès lors, les espèces mineures ont été un peu délaissées. Il pourrait ainsi être envisagé d'établir des règles de mise à jour avec des paramètres α , β différents pour chaque espèce chimique. Cela permettrait peut être d'améliorer encore les résultats de concordance des espèces chimiques mineures.
- Les méthodes multiplicatives sont très pratiques pour l'implémentation des règles de mise à jour, on peut cependant leur reprocher une non garantie de convergence vers un point stationnaire et une lenteur de convergence vers le point limite. Dans ce sens, des méthodes modernes comme les méthodes HALS informées seraient aussi intéressantes à développer dans le cadre des fonctions de coût de type divergences paramétriques.
- La prise en compte des 3 informations majeures sur les profils, à savoir le forçage de certains éléments du profil, la somme à 1 et l'application de bornes minimales et maximales, est, pour le moment, finalement séquentielle, dans le sens où chaque contrainte est traitée individuellement. Une paramétrisation qui respecterait conjointement deux d'entre elles, par exemple la normalisation à 1 et les contraintes de forçage serait envisageable et permettrait sans doute une amélioration dans les performances des méthodes.
- L'intégration des informations sur la matrice de contribution est actuellement assez réduite dans le sens où les sources industrielles ponctuelles sont peu nombreuses dans un cas réel. Ainsi, la structuration de la matrice de contribution étendue aux autres sources pourrait favoriser une meilleure restauration.

Annexe A

Une approche géométrique de l'ACP

Cette annexe est largement inspirée du chapitre 2 du livre [166]. Elle vise à expliquer les fondements géométriques de l'ACP.

L'ACP peut être vue comme la recherche d'un sous espace affine de faible dimension pour un ensemble de n points appartenant à \mathbb{R}^m issus de la matrice de données X . Soit \underline{x}_i l'un de ces points, i allant de 1 à n . Nous recherchons un sous espace de dimension p qui respecte au mieux les données. Nous pouvons donc écrire un point x_i sous la forme (A.1),

$$\underline{x}_i = \underline{x}_0 + U_p \underline{y}_i \quad \forall i = 1 \dots n, \quad (\text{A.1})$$

où U_p est une matrice de taille $m \times p$, constituée des vecteurs de base du sous espace, $\underline{y}_i \in \mathbb{R}^p$ représente les coordonnées du point dans la nouvelle base du sous espace. Le vecteur \underline{x}_0 peut représenter n'importe quel vecteur de \mathbb{R}^m .

Puisque la représentation (A.1) est indéterminée par rapport aux éléments recherchés \underline{x}_0 , U_p et \underline{y}_i , nous pouvons par exemple imposer que \underline{y}_i soit une variable centrée, dénotée \underline{y}'_i , qui vérifie

$$\underline{y}_0 \triangleq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \underline{y}_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \underline{y}'_i = \underline{0}. \quad (\text{A.2})$$

Dans l'optique de l'existence de bruit ou d'erreurs sur les points, le sous-espace affine optimal est recherché au sens des moindres carrés, à savoir en minimisant l'erreur de projection sur le sous espace, c.-à-d.,

$$\min_{U_p, \underline{x}_0, \underline{y}_i} \sum_{i=1}^n \left\| \underline{x}_i - \underline{x}_0 - U_p \underline{y}_i \right\|^2 \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I \quad \underline{y}_0 = \underline{0} \quad (\text{A.3})$$

La différentiation de ce critère par rapport à \underline{x}_0 et \underline{y}_i , en supposant que U_p est figé, conduit aux

relations suivantes :

$$\hat{\underline{x}}_0 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \underline{x}_i, \quad \hat{\underline{y}}_i = U_p^T (\underline{x}_i - \hat{\underline{x}}_0). \quad (\text{A.4})$$

Les vecteurs $\hat{\underline{y}}_i$ correspondent aux coordonnées des points projetés dans le sous-espace. Ils sont aussi appelées les composantes principales géométriques. De la relation (A.4), il en découle le critère à minimiser en fonction de la matrice orthogonale U_p ,

$$\min_{U_p} \sum_{i=1}^n \left\| \underline{x}'_i - U_p U_p^T \underline{x}'_i \right\|^2 \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p, \quad (\text{A.5})$$

où $\underline{x}'_i \triangleq \underline{x}_i - \hat{\underline{x}}_0$. La minimisation précédente peut se reformuler en fonction de la somme de traces de matrices, c.-à-d.,

$$\min_{U_p} \sum_{i=1}^n \text{Tr} \left[\left(\underline{x}'_i - U_p U_p^T \underline{x}'_i \right) \left(\underline{x}'_i - U_p U_p^T \underline{x}'_i \right)^T \right] \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p, \quad (\text{A.6})$$

ou bien, sous la forme de la trace d'une matrice unique en définissant la matrice X' de taille $n \times m$ par $X' \triangleq [\underline{x}'_1, \underline{x}'_2, \dots, \underline{x}'_n]$

$$\min_{U_p} \text{Tr} \left[(I_m - U_p \cdot U_p^T) X'^T \left((I_m - U_p \cdot U_p^T) X'^T \right)^T \right] \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p, \quad (\text{A.7})$$

En utilisant les propriétés sur les transposés, cette minimisation se réécrit

$$\min_{U_p} \text{Tr} \left[(I_m - U_p \cdot U_p^T) \cdot X'^T \cdot X' \cdot (I_m - U_p \cdot U_p^T)^T \right] \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p. \quad (\text{A.8})$$

La propriété sur les traces $\text{Tr}(A \cdot B) = \text{Tr}(B \cdot A)$ ainsi que l'expression associée à une matrice orthogonale $U_p U_p^T U_p U_p^T = U_p U_p^T$ permet de simplifier la minimisation en :

$$\min_{U_p} \text{Tr} \left[(I_m - U_p \cdot U_p^T) \cdot X'^T \cdot X' \right] \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p. \quad (\text{A.9})$$

Le problème peut de manière équivalente être réécrit sous la forme d'une maximisation, à savoir,

$$\max_{U_p} \text{Tr} \left[U_p^T \cdot X'^T \cdot X' \cdot U_p \right] \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p. \quad (\text{A.10})$$

La décomposition en valeurs singulières de la matrice X' permet de faire apparaître les valeurs singulières de cette dernière,

$$X' = U \cdot \Sigma \cdot V^T, \quad (\text{A.11})$$

avec U et V matrices unitaires de dimensions respectives $n \times n$ et $m \times m$. La matrice des valeurs

singulières est définie par $\Sigma \triangleq \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_m)$ de dimension $n \times m$. Il apparaît que le produit $X'^T \cdot X'$ se formule sous la forme $X'^T \cdot X' = V \cdot \Sigma^2 \cdot V^T$. La maximisation (A.10) se réduit ainsi à,

$$\max_{U_p} \text{Tr} [V^T \cdot U_p \cdot U_p^T \cdot V \cdot \Sigma^2] \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p. \quad (\text{A.12})$$

Si on considère que les valeurs singulières de Σ sont ordonnées dans le sens décroissant, cette maximisation peut se reformuler en écrivant que $\Sigma^2 = \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 e_i \cdot e_i^T$ sous la forme d'une somme de normes, c.-à-d.,

$$\max_{U_p} \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 \|V^T U_p \cdot U_p^T \cdot V e_i\|^2 \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p. \quad (\text{A.13})$$

Cette somme est maximale [166] quand U_p résulte des p premiers vecteurs colonnes de V correspondant aux p valeurs propres les plus élevées de Σ . Le maximum précédent vaut donc $\sum_{i=1}^p \sigma_i^2$, résultat connu en Analyse en Composantes Principales. En reprenant par exemple la relation (A.8), la factorisation matricielle correspondant à une ACP s'écrit donc :

$$X' \approx X' \cdot U_p \cdot U_p^T \quad \text{s.c.} \quad U_p^T \cdot U_p = I_p \quad (\text{A.14})$$

Elle s'obtient généralement en procédant à une décomposition en valeurs singulières tronquée aux p premières valeurs singulières de la matrice X' .

Annexe B

Conditions de Karush-Kuhn-Tucker pour la NMF de Frobenius sous contraintes égalité

Les conditions de Karush-Kuhn Tucker sont proposées pour le cas $\Phi = 0$. La démonstration peut aisément être étendue au cas général.

La minimisation du critère (3.15) nous amène à considérer l'équation $\mathcal{H}(\cdot)$, définie par,

$$\mathcal{H}(\Delta F) = \text{Tr}\left((X - G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^T((X - G(\Delta F \circ \bar{\Omega})) \circ W)\right) = \mathcal{H}_1 - 2\mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3, \quad (\text{B.1})$$

où

$$\begin{cases} \mathcal{H}_1 &= \text{Tr}\left(X^T(X \circ W)\right) \\ \mathcal{H}_2 &= \text{Tr}\left((X \circ W)^T G(\Delta F \circ \bar{\Omega})\right) \\ \mathcal{H}_3 &= \text{Tr}\left((\Delta F \circ \bar{\Omega})^T G^T((G(\Delta F \circ \bar{\Omega})) \circ W)\right). \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Notons tout d'abord les propriétés suivantes :

$$\text{Tr}(U^T(V \circ W)) = \text{Tr}((U \circ W)^T V), \quad (\text{B.3})$$

et

$$\text{Tr}(V \circ W) = \text{Tr}(V^T W). \quad (\text{B.4})$$

La différentiation de \mathcal{H}_2 peut être écrite en utilisant la propriété (B.3),

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_2 &= \partial\text{Tr}\left((X \circ W)^T G(\Delta F \circ \bar{\Omega})\right) = \text{Tr}\left((X \circ W)^T \partial(G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))\right) \\ &= \text{Tr}\left((X \circ W)^T G \cdot \partial(\bar{\Omega} \circ \Delta F)\right) = \text{Tr}\left(\left(\left((X \circ W)^T G\right) \circ \bar{\Omega}^T\right) \partial\Delta F\right).\end{aligned}\quad (\text{B.5})$$

La différentiation de \mathcal{H}_2 par rapport à F donne,

$$\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\Delta F} = \bar{\Omega} \circ (G^T(X \circ W)). \quad (\text{B.6})$$

La différentielle de \mathcal{H}_3 s'exprime sous la forme,

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_3 &= \partial\text{Tr}\left((\Delta F \circ \bar{\Omega})^T G^T[(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}) \circ W)]\right) \\ &= 2 \cdot \text{Tr}\left((W \circ G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^T \cdot G \cdot (\bar{\Omega} \circ \partial\Delta F)\right).\end{aligned}\quad (\text{B.7})$$

En utilisant la propriété (B.3), celle-ci devient,

$$\partial\mathcal{H}_3 = 2 \cdot \text{Tr}\left(\left(\left((W \circ G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^T \cdot G\right) \circ \bar{\Omega}^T\right) \partial\Delta F\right). \quad (\text{B.8})$$

La différentiation de \mathcal{H}_3 par rapport à F donne

$$\frac{\partial\mathcal{H}_3}{\partial\Delta F} = 2[G^T(W \circ (G(\bar{\Omega} \circ \Delta F)))] \circ \bar{\Omega}. \quad (\text{B.9})$$

En utilisant les équations (B.6) et (B.9), il est possible d'exprimer la différentiation de la fonction $\mathcal{H}(\cdot)$

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\Delta F} = 2\bar{\Omega} \circ \left(G^T((G[\bar{\Omega} \circ \Delta F] - X) \circ W)\right). \quad (\text{B.10})$$

Le Lagrangien s'exprime :

$$\mathcal{L}(G, F) = \frac{1}{2}\mathcal{H}(\Delta F) - \text{Tr}(\Gamma_G \circ G) - \text{Tr}(\Gamma_F \circ \Delta F). \quad (\text{B.11})$$

En annulant la dérivée de ce Lagrangien par rapport à ΔF , cela donne les relations suivantes

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Delta F} = \bar{\Omega} \circ \left(G^T((G[\bar{\Omega} \circ \Delta F] - X) \circ W)\right) - \Gamma_F = 0. \quad (\text{B.12})$$

On obtient ainsi directement l'expression de Γ_F . Les conditions de KKT pour la minimisation du critère (3.15) sont de la forme,

$$\begin{aligned}
\Delta F \succeq 0, & & G \succeq 0, \\
\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Delta F} \succeq 0, & & \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial G} \succeq 0, \\
\Delta F \circ \Gamma_F = 0, & & G \circ \Gamma_G = 0.
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Pour plus de clarté, soit $F^* \triangleq \bar{\Omega} \circ \Delta F$. En remplaçant la relation (B.12) dans l'équation (B.13) et par analogie avec la matrice G , il est possible de déduire les conditions de KKT pour le problème pondéré et contraint.

$$\begin{aligned}
\Delta F \succeq 0, & & G \succeq 0, \\
\bar{\Omega} \circ \left(G^T ((GF^* - X) \circ W) \right) \succeq 0, & & (W \circ (GF^* - X)) F^{*T} \succeq 0, \\
\Delta F \circ \bar{\Omega} \circ \left(G^T ((GF^* - X) \circ W) \right) = 0, & & G \circ \left((W \circ (GF^* - X)) F^{*T} \right) = 0.
\end{aligned} \tag{B.14}$$

Si maintenant, on considère $F^* \triangleq \bar{\Omega} \circ \Delta F + \Phi$, les conditions de (KKT) ne changent pas par translation, et on trouve exactement la même relation (B.14) pour le cas général. La relation (B.14) résume les conditions de (KKT) pour le problème de NMF de Frobenius sous contraintes égalité.

Annexe C

Conditions de KKT pour la NMF contrainte à base divergence $\alpha\beta$

Les conditions de Karush-Kuhn Tucker sont développées pour le cas $\Phi = 0$. La démonstration peut être aisément étendue au cas général.

La minimisation du critère (3.106) nous amène à considérer l'équation $\mathcal{H}(\cdot)$, définie par,

$$\mathcal{H}(\cdot) = -\frac{1}{\alpha\beta} \left[-\frac{\alpha}{\alpha+\beta} \text{Tr}(((X - G\Phi)^\alpha)^T((X - G\Phi)^\beta \circ W)) + \text{Tr}(((X - G\Phi)^\alpha)^T((G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^\beta \circ W)) \right] + \frac{1}{\alpha\beta} \left[\frac{\beta}{\alpha+\beta} \text{tr}((G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^T(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1} \circ W) \right]. \quad (\text{C.1})$$

Soit :

$$\begin{cases} \mathcal{H}_1 &= \text{Tr}(((X - G\Phi)^\alpha)^T((X - G\Phi)^\beta \circ W)), \\ \mathcal{H}_2 &= \text{Tr}(((X - G\Phi)^\alpha)^T((G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^\beta \circ W)), \\ \mathcal{H}_3 &= \text{Tr}((G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^T(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1} \circ W). \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

Nous allons donner le développement des KKT pour la méthode de NMF contrainte à base de divergence $\alpha\beta$.

C.1 Différentiation du critère par rapport aux inconnus

Dans ce paragraphe, on aborde la dérivation matricielle, basée sur quelques propriétés décrites dans l'annexe précédente. En utilisant la propriété (B.3), il est possible d'écrire :

$$\mathcal{H}_1 = \text{Tr}(((X - G\Phi)^\alpha)^T((X - G\Phi)^\beta \circ W)) = \text{Tr}((X - G\Phi)^{\alpha+\beta} \circ W). \quad (\text{C.3})$$

Notons que \mathcal{H}_1 ne dépend pas de ΔF conduisant ainsi à une dérivée nulle par rapport à cette dernière

$$\frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial (\Delta F)} = 0. \quad (\text{C.4})$$

La différentielle de \mathcal{H}_1 par rapport à G peut s'écrire par arrangements successifs,

$$\begin{aligned} \partial \mathcal{H}_1 &= \partial \text{Tr}((X - G\Phi)^{\alpha+\beta} \circ W) = \text{Tr}(\partial(X - G\Phi)^{\alpha+\beta} \circ W), \\ &= (\alpha + \beta) \text{Tr}(W \circ (X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1} \circ \partial(X - G\Phi)), \\ &= -(\alpha + \beta) \text{Tr}(W \circ (X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1} \circ \partial(G\Phi)). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Les propriétés (B.3, B.4) et la propriété de commutation des traces induisent

$$\begin{aligned} \partial \mathcal{H}_1 &= -(\alpha + \beta) \text{Tr}[(W \circ (X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1})^T \partial(G)\Phi] \\ &= -(\alpha + \beta) \text{Tr}[\Phi(W \circ (X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1})^T \partial G] \\ &= -(\alpha + \beta) \text{Tr}[(W \circ (X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1})\Phi^T]^T \partial G. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

La différentiation de \mathcal{H}_1 par rapport à G aboutit à

$$\frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial G} = -(\alpha + \beta)(W \circ (X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1})\Phi^T. \quad (\text{C.7})$$

De même, la différentielle de \mathcal{H}_2 s'écrit de la façon suivante,

$$\begin{aligned} \partial \mathcal{H}_2 &= \partial \text{Tr} \left(((X - G\Phi)^\alpha \circ W)^T (G(\overline{\Omega} \circ \Delta F))^\beta \right) = \text{Tr} \left(((X - G\Phi)^\alpha \circ W)^T \partial[(G(\overline{\Omega} \circ \Delta F))^\beta] \right), \\ &= \beta \text{Tr} \left(((X - G\Phi)^\alpha \circ W)^T \left((G(\overline{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1} \circ \partial(G(\overline{\Omega} \circ \Delta F)) \right) \right), \\ &= \beta \text{Tr} \left[[(X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (G(\overline{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1}]^T \partial(G(\overline{\Omega} \circ \Delta F)) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

En utilisant les propriétés de la transposée, nous pouvons introduire G dans la transposée, c.-à-d.,

$$\begin{aligned} \partial \mathcal{H}_2 &= \beta \text{Tr} \left[[(X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (G(\overline{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1}]^T G \partial(\overline{\Omega} \circ (\Delta F)) \right], \\ &= \beta \text{Tr} \left[[(X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (G(\overline{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1}]^T G(\overline{\Omega} \circ (\partial \Delta F)) \right], \\ &= \beta \text{Tr} \left[[G^T ((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (G(\overline{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1})]^T (\overline{\Omega} \circ \partial \Delta F) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

En utilisant la propriété (B.3), il est possible d'écrire

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_2 &= \beta \operatorname{Tr} \left[\left[(G^T ((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1})) \right]^T (\bar{\Omega} \circ (\partial\Delta F)) \right], \\ &= \beta \operatorname{Tr} \left[\left[(G^T ((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1})) \circ \bar{\Omega} \right]^T (\partial\Delta F) \right].\end{aligned}\quad (\text{C.10})$$

La différentiation de \mathcal{H}_2 par rapport à ΔF donne

$$\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial\Delta F} = \beta \bar{\Omega} \circ \left[G^T \left((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1} \right) \right]^T. \quad (\text{C.11})$$

Nous nous intéressons maintenant à la différentiation de \mathcal{H}_2 par rapport à G . Soit $F^\star = \bar{\Omega} \circ \Delta F$. L'expression de \mathcal{H}_2 est donnée dans l'équation (C.2). La différentielle de \mathcal{H}_2 s'écrit

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_2 &= \operatorname{Tr} \left(\partial(X - G\Phi)^\alpha \circ (GF^\star)^\beta \circ W \right) + \operatorname{Tr} \left((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ \partial(GF^\star)^\beta \right), \\ \partial\mathcal{H}_2 &= \alpha \operatorname{Tr} \left((X - G\Phi)^{\alpha-1} \circ \partial(X - G\Phi) \circ (GF^\star)^\beta \circ W \right) \\ &\quad + \beta \operatorname{Tr} \left((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (GF^\star)^{\beta-1} \circ \partial(GF^\star) \right), \\ \partial\mathcal{H}_2 &= -\alpha \operatorname{Tr} \left((X - G\Phi)^{\alpha-1} \circ \partial(G\Phi) \circ (GF^\star)^\beta \circ W \right) \\ &\quad + \beta \operatorname{Tr} \left((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (GF^\star)^{\beta-1} \circ ((\partial G)(F^\star)) \right).\end{aligned}\quad (\text{C.12})$$

De manière similaire à \mathcal{H}_1 par rapport à G , nous pouvons réarranger les expressions ci-dessus,

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_2 &= -\alpha \operatorname{Tr} \left((X - G\Phi)^{\alpha-1} \circ ((\partial G)(\Phi)) \circ (GF^\star)^\beta \circ W \right) \\ &\quad + \beta \operatorname{Tr} \left((X - G\Phi)^\alpha \circ W \circ (GF^\star)^{\beta-1} \circ ((\partial G)(F^\star)) \right), \\ \partial\mathcal{H}_2 &= -\alpha \operatorname{Tr} \left(\left[(W \circ (GF^\star)^\beta \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1}) \Phi^T \right]^T \partial G \right) \\ &\quad + \beta \operatorname{Tr} \left(\left[(W \circ (GF^\star)^{\beta-1} \circ (X - G\Phi)^\alpha) F^{\star T} \right]^T \partial G \right).\end{aligned}\quad (\text{C.13})$$

La différentiation de \mathcal{H}_2 par rapport à G se résume à,

$$\frac{\partial\mathcal{H}_2}{\partial G} = -\alpha \left(W \circ (GF^\star)^\beta \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1} \right) \Phi^T + \beta \left(W \circ (GF^\star)^{\beta-1} \circ (X - G\Phi)^\alpha \right) F^{\star T}. \quad (\text{C.14})$$

La fonction \mathcal{H}_3 peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{H}_3 = \operatorname{Tr} \left(((GF)^{\alpha+\beta} \circ W) \right). \quad (\text{C.15})$$

De manière similaire, la différentielle de \mathcal{H}_3 s'exprime sous la forme :

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_3 &= \partial\text{Tr}\left((G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^T(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1} \circ W\right), \\ &= (\alpha + \beta)\text{Tr}\left(W^T(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1} \circ \partial(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))\right), \\ &= (\alpha + \beta)\text{Tr}\left(W \circ (G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1}\right)^T \partial[G(\Delta F \circ \bar{\Omega})].\end{aligned}\tag{C.16}$$

L'usage des propriétés (B.3, B.4) permet de simplifier l'écriture

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_3 &= (\alpha + \beta)\text{Tr}\left(G^T(W \circ (G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1})\right)^T \partial[(\Delta F \circ \bar{\Omega})], \\ &= (\alpha + \beta)\text{Tr}\left(\left[G^T(W \circ (G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1})\right]^T (\bar{\Omega} \circ \partial(\Delta F))\right), \\ &= (\alpha + \beta)\text{Tr}\left(\left[\bar{\Omega} \circ (G^T(W \circ (G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1}))\right]^T \partial(\Delta F)\right).\end{aligned}\tag{C.17}$$

La différentiation de \mathcal{H}_3 par rapport à F donne alors

$$\frac{\partial\mathcal{H}_3}{\partial(\Delta F)} = (\alpha + \beta) \left[\bar{\Omega} \circ (G^T(W \circ (G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1}))\right]^T.\tag{C.18}$$

De même par rapport à G et en utilisant les propriétés (B.3) et (B.4), il est possible d'écrire

$$\begin{aligned}\partial\mathcal{H}_3 &= (\alpha + \beta) \text{Tr}(W \circ (GF^\star)^{\alpha+\beta-1} \circ \partial(GF^\star)), \\ \partial\mathcal{H}_3 &= (\alpha + \beta) \text{Tr}(W \circ (GF^\star)^{\alpha+\beta-1} \circ (\partial(G)(F^\star))), \\ \partial\mathcal{H}_3 &= (\alpha + \beta) \text{Tr}\left(\left[(W \circ (GF^\star)^{\alpha+\beta-1}) F^{\star T}\right]^T \partial G\right).\end{aligned}\tag{C.19}$$

La différentiation de \mathcal{H}_3 par rapport à G s'exprime immédiatement par,

$$\frac{\partial\mathcal{H}_3}{\partial G} = (\alpha + \beta) \left(W \circ (GF^\star)^{\alpha+\beta-1}\right) F^{\star T}.\tag{C.20}$$

En utilisant les équations (C.11) et (C.18), il est possible d'exprimer la différentiation de la fonction $\mathcal{H}(\cdot)$ par rapport à ΔF ,

$$\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\Delta F} = \frac{1}{\alpha}\bar{\Omega} \circ \left(G^T(W \circ [(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1} - ((X - G\Phi)^\alpha \circ (G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1})])\right).\tag{C.21}$$

C.2 Lagrangien et KKT

Avec les dérivations précédentes, nous pouvons déterminer les conditions de KKT. Le Lagrangien s'exprime :

$$\mathcal{L}(G, F) = \frac{1}{2} \mathcal{H}(G, \Delta F) - \text{Tr}(\Gamma_G \circ G) - \text{Tr}(\Gamma_F \circ \Delta F). \quad (\text{C.22})$$

En annulant la dérivée de ce Lagrangien par rapport à ΔF et en utilisant la relation (C.21), on obtient l'expression suivante :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Delta F} = \frac{1}{2\alpha} \bar{\Omega} \circ \left(G^T (W \circ [(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1} - (X - G\Phi)^\alpha \circ (G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1}]) \right) - \Gamma_F = 0. \quad (\text{C.23})$$

On obtient l'expression de Γ_F

$$\Gamma_F = \left(\frac{G^T}{2\alpha} (W \circ [(G(\Delta F \circ \bar{\Omega}))^{\alpha+\beta-1} - ((X - G\Phi)^\alpha \circ (G(\bar{\Omega} \circ \Delta F))^{\beta-1})]) \right) \circ \bar{\Omega}. \quad (\text{C.24})$$

En utilisant les équations (C.14), (C.6) et (C.20), il est possible d'exprimer la différentiation de la fonction $\mathcal{H}(\cdot)$ par rapport à G

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial G} = \frac{-1}{\alpha\beta} \left(-\frac{\alpha}{\alpha+\beta} \frac{\partial \mathcal{H}_1}{\partial G} + \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial G} - \frac{\beta}{\alpha+\beta} \frac{\partial \mathcal{H}_3}{\partial G} \right) = \mathcal{H}_{g1} + \mathcal{H}_{g2}, \quad (\text{C.25})$$

où les fonctions \mathcal{H}_{g1} et \mathcal{H}_{g2} sont définies par

$$\begin{cases} \mathcal{H}_{g1} &= \frac{1}{\beta} \left[W \circ ((GF)^\beta \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1} - \alpha(X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1}) \Phi^T \right], \\ \mathcal{H}_{g2} &= \frac{1}{\alpha} \left[W \circ ((GF)^{\alpha+\beta-1} - (X - G\Phi)^\alpha \circ (GF)^{\beta-1}) \right] F^T. \end{cases} \quad (\text{C.26})$$

L'annulation de la dérivée de ce Lagrangien (C.22) par rapport à G donne les relations suivantes :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial G} = \frac{1}{2} (\mathcal{H}_{g1} + \mathcal{H}_{g2}) - \Gamma_G = 0. \quad (\text{C.27})$$

Ceci nous procure l'expression de Γ_G obtenu en F^\star

$$\begin{aligned} \Gamma_G &= \frac{1}{2\beta} \left[W \circ ((GF^\star)^\beta \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1} - (X - G\Phi)^{\alpha+\beta-1}) \right] \Phi^T \\ &+ \frac{1}{2\alpha} \left[W \circ ((GF^\star)^{\alpha+\beta-1} - (X - G\Phi)^\alpha \circ (GF^\star)^{\beta-1}) \right] F^{\star T}. \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

Les conditions de KKT pour la minimisation du critère (3.106) sont :

– Par rapport à ΔF

$$\begin{cases} \Delta F \succeq 0, \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Delta F} \succeq 0, \\ \Delta F \circ \Gamma_F = 0. \end{cases} \quad (\text{C.29})$$

– Par rapport à G

$$\begin{cases} G \succeq 0, \\ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial G} \succeq 0, \\ G \circ \Gamma_G = 0. \end{cases} \quad (\text{C.30})$$

Les expressions de Γ_F et Γ_G sont déduites de (C.24) et (C.28). Considérons de nouveau pour plus de concision $F^\star \triangleq \bar{\Omega} \circ \Delta F$. Une fois remise en forme et ignorant le facteur 2, les conditions de KKT pour le problème pondéré et contraint avec des divergences $\alpha\beta$ sont donc les suivantes :

– Par rapport à ΔF

$$\begin{cases} \Delta F \succeq 0, \\ \frac{1}{\alpha} \bar{\Omega} \circ \left(G^T \left(W \circ \left[(GF^\star)^{\alpha+\beta-1} - ((X - G\Phi)^\alpha \circ (GF^\star)^{\beta-1}) \right] \right) \right) \succeq 0, \\ \frac{1}{\alpha} \Delta F \circ \bar{\Omega} \circ \left(G^T \left(W \circ \left[(GF^\star)^{\alpha+\beta-1} - ((X - G\Phi)^\alpha \circ (GF^\star)^{\beta-1}) \right] \right) \right) = 0. \end{cases} \quad (\text{C.31})$$

– Par rapport à G

$$\begin{cases} G \succeq 0, \\ \frac{1}{\beta} \left[W \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1} \left((GF^\star)^\beta - (X - G\Phi)^\beta \right) \right] \Phi^T + \\ \frac{1}{\alpha} \left[W \circ (GF^\star)^{\beta-1} \circ \left((GF^\star)^\alpha - (X - G\Phi)^\alpha \right) \right] F^{\star T} \succeq 0, \\ G \circ \frac{1}{\beta} \left[W \circ (X - G\Phi)^{\alpha-1} \left((GF^\star)^\beta - (X - G\Phi)^\beta \right) \right] \Phi^T \\ + G \circ \frac{1}{\alpha} \left[W \circ (GF^\star)^{\beta-1} \circ \left((GF^\star)^\alpha - (X - G\Phi)^\alpha \right) \right] F^{\star T} = 0. \end{cases} \quad (\text{C.32})$$

Ces expressions (C.31, C.32) restent valides même si l'on considère la relation étendue $F^\star \triangleq \bar{\Omega} \circ \Delta F + \Phi$. Ces expressions représentent donc les conditions de KKT dans le cas général pour la NMF contrainte à base de divergence $\alpha\beta$.

Annexe D

Autres profils estimés sur les jeux de données réelles

En complément des tests sur les données réelles données, nous détaillons les profils qui n'ont pas été présentés dans le chapitre 5.

La source *Marine secondaire* a pour espèce majeure le nitrate NO_3^- , suivi des espèces Na, SO_4^{2-} , Cl^- , Mg, les autres espèces étant soit absentes ou présentes en petite quantité. Les méthodes $\alpha\beta\text{-BN}_2\text{-CWNMF}$ et $\alpha\beta\text{-BN}_2\text{-MCWNMF}$ trouvent un profil très satisfaisant. En effet, ces méthodes donnent un profil très satisfaisants jusqu'à la 5^e espèce comme nous pouvons le voir sur la figure D.1.

La source *Crustale* a pour espèce majeure l'aluminium Al, puis les espèces Ca, Fe, K, TC, Mg, SO_4^{2-} . Les autres espèces sont soit absentes ou présentes en infimes quantités. Nous pouvons remarquer sur la figure D.2 que les méthodes $\alpha\beta\text{-BN}_2\text{-CWNMF}$ et $\alpha\beta\text{-BN}_2\text{-MCWNMF}$ obtiennent un profil quasi parfait jusqu'à la 9^e espèce, à l'inverse de la méthode $\alpha\beta\text{-N}_2\text{-MCWNMF}$ qui trouve beaucoup de TC alors que cette espèce ne devrait pas être aussi importante.

La source Sulfates secondaires a pour espèce majeure le sulfate SO_4^{2-} , puis les espèces NH_4^+ , TC, NO_3^- , Ca, K. Les autres espèces sont soit absentes ou présentes en infime quantité. Nous remarquons une nouvelle fois sur la figure D.3 que la méthode $\alpha\beta\text{-BN}_2\text{-MCWNMF}$ trouve un profil quasi parfait puisqu'elle respecte vraiment le profil supposé de la source au contraire des méthodes WNMF , $\alpha\beta\text{-N}_2\text{-CWNMF}$ et $\alpha\beta\text{-N}_2\text{-MCWNMF}$.

La source Nitrates secondaires a pour espèce majeure le nitrate NO_3^- , puis les espèces TC, NH_4^+ , Ca, Fe, Zn, Cu. Comme nous pouvons le voir sur la figure D.4, les méthodes trouvent

toutes un profil respectable, néanmoins les méthodes [80], $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF et $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF ont un profil particulièrement satisfaisant, en effet les proportions des différentes espèces respectent l'ordre établi préalablement.

La source Trafic échappement a pour espèce majeure le carbone total TC, puis les espèces SO₄²⁻, Zn, NO₃⁻, Fe, Ba, Al. Les autres espèces sont soit absentes ou présentes en infime quantité. Comme nous pouvons le constater sur la figure D.5, les méthodes $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF et $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF obtiennent un profil satisfaisant, bien que nous constatons un meilleur résultat pour la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-CWNMF puisqu'elle obtient un profil satisfaisant jusqu'à la 4^e espèce.

La source Combustion biomasse a pour espèce majeure le carbone totale TC, puis les espèces K, Cl⁻, NO₃⁻, SO₄²⁻, Ca, NH₄⁺. Les autres espèces sont soit absentes ou présentes en infime quantité. Comme nous pouvons le voir sur la figure D.6, toutes les méthodes n'arrivent pas à bien estimer cette source. A défaut d'obtenir un profil satisfaisant, nous pouvons noter que la méthode $\alpha\beta$ -BN₂-MCWNMF arrive à retrouver les espèces caractéristiques de cette source.

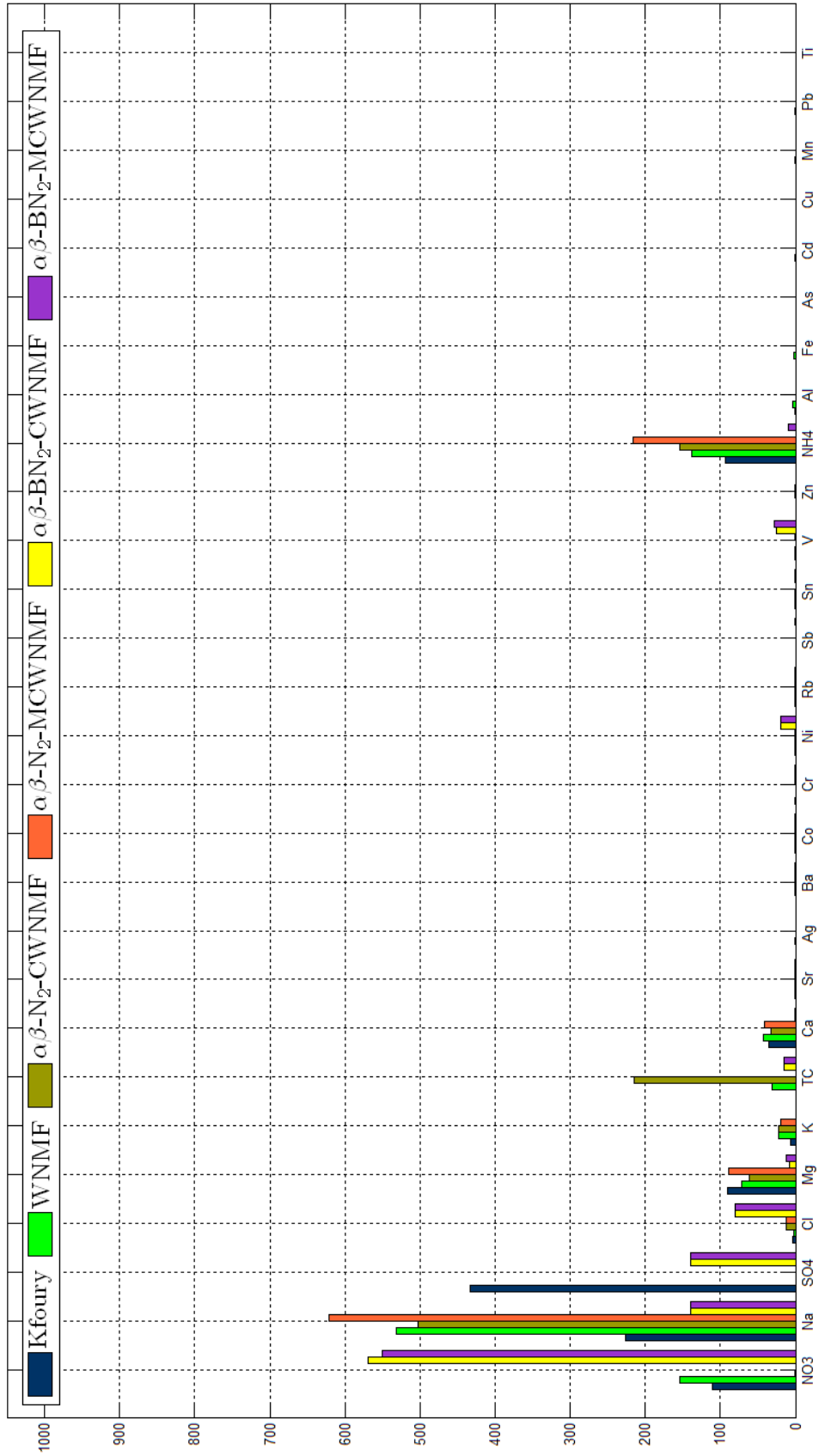


FIGURE D.1 – Profil de la source *Marine secondaire*.

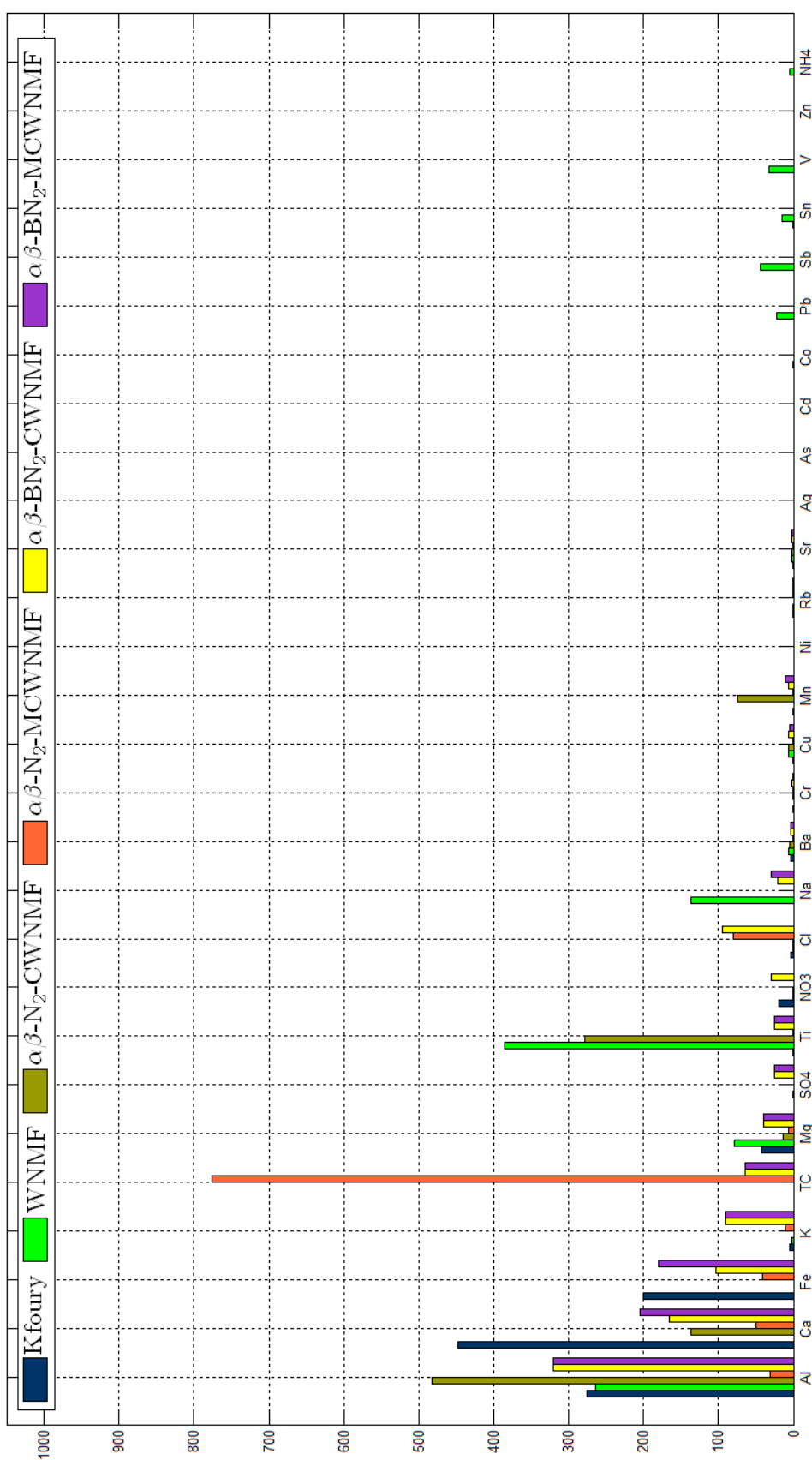


FIGURE D.2 – Profil de la source *crustale*.

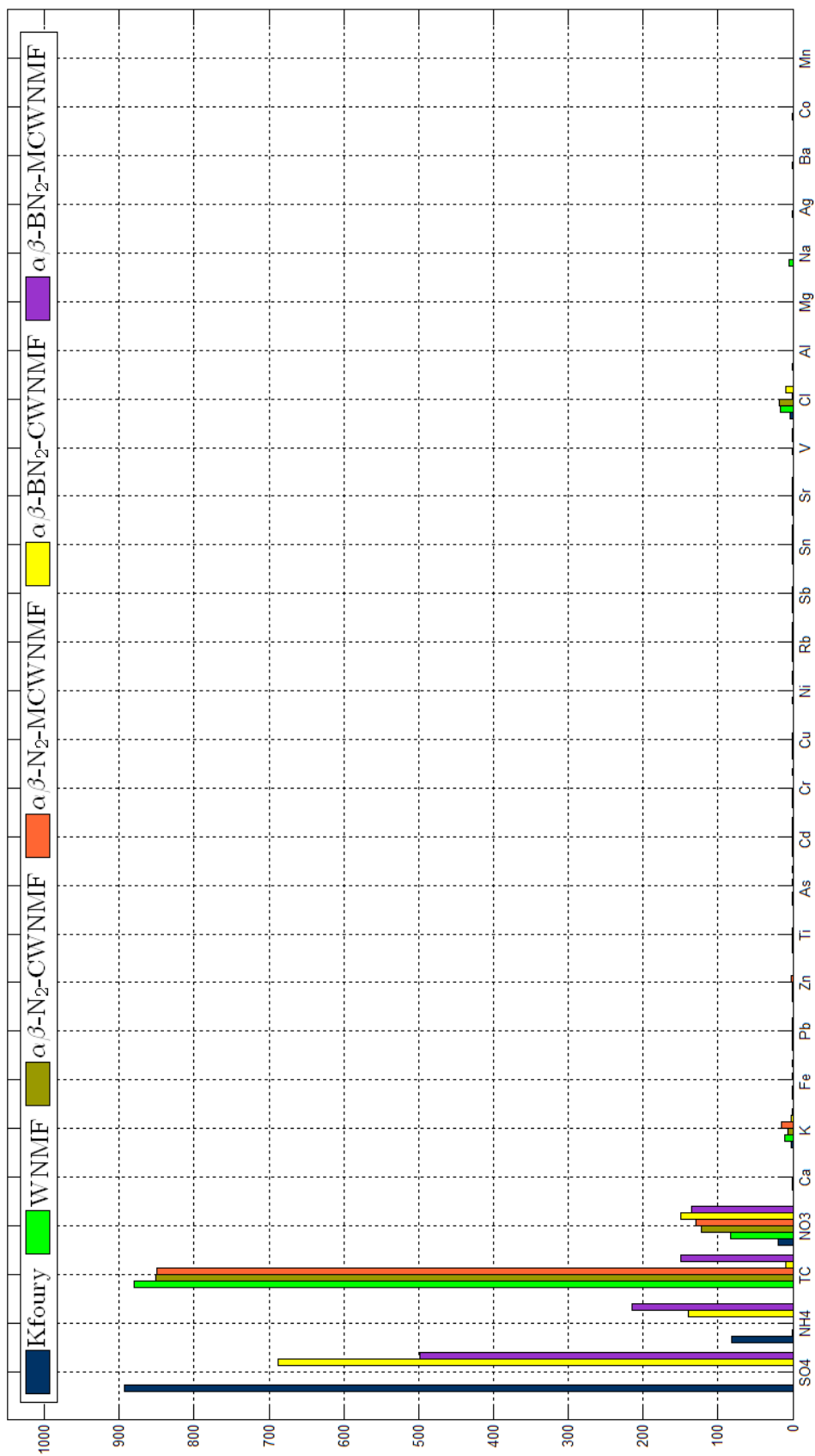


FIGURE D.3 – Profil de la source *Sulfates secondaires*.

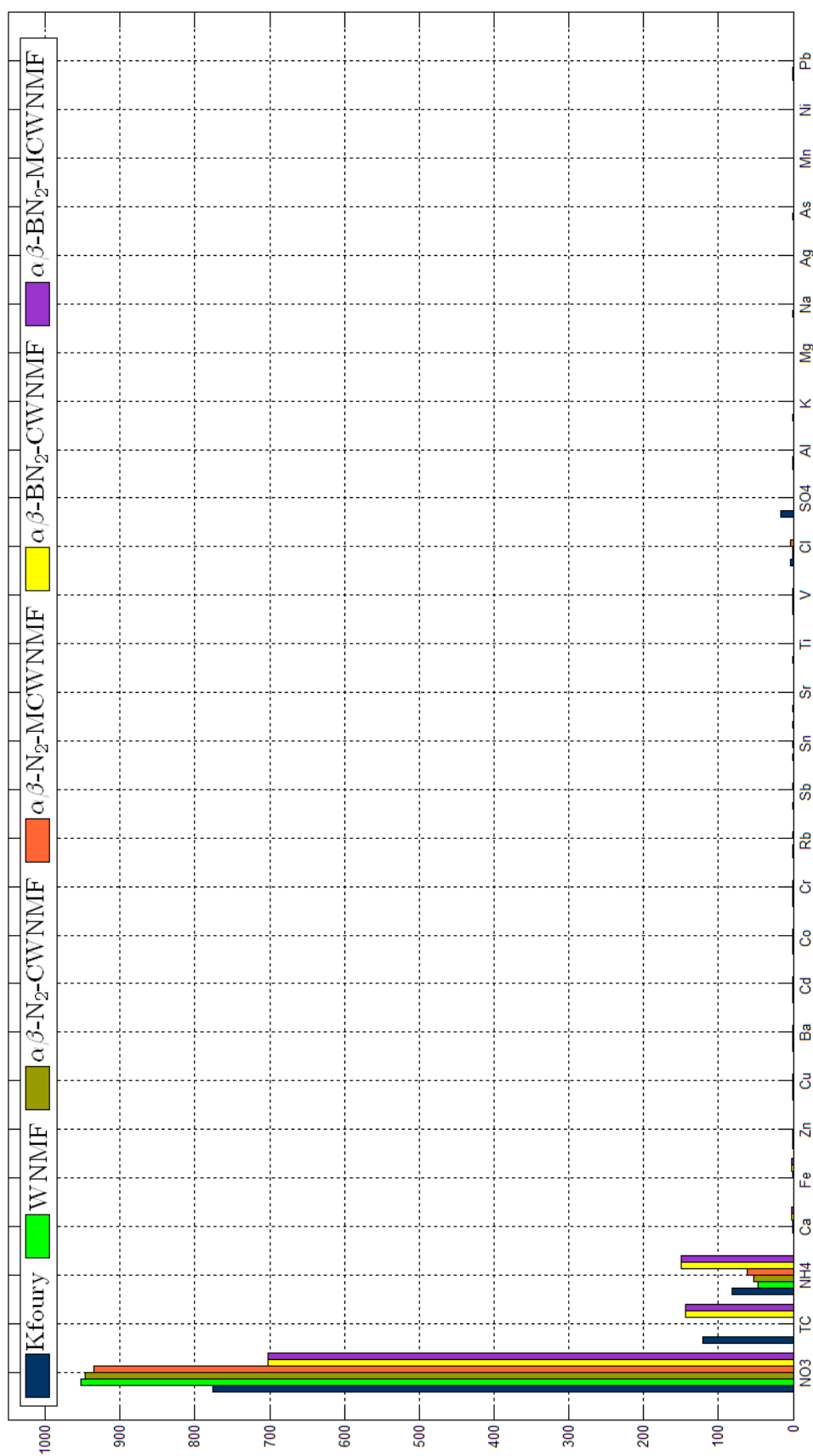


FIGURE D.4 – Profil de la source *Nitrates secondaires*.

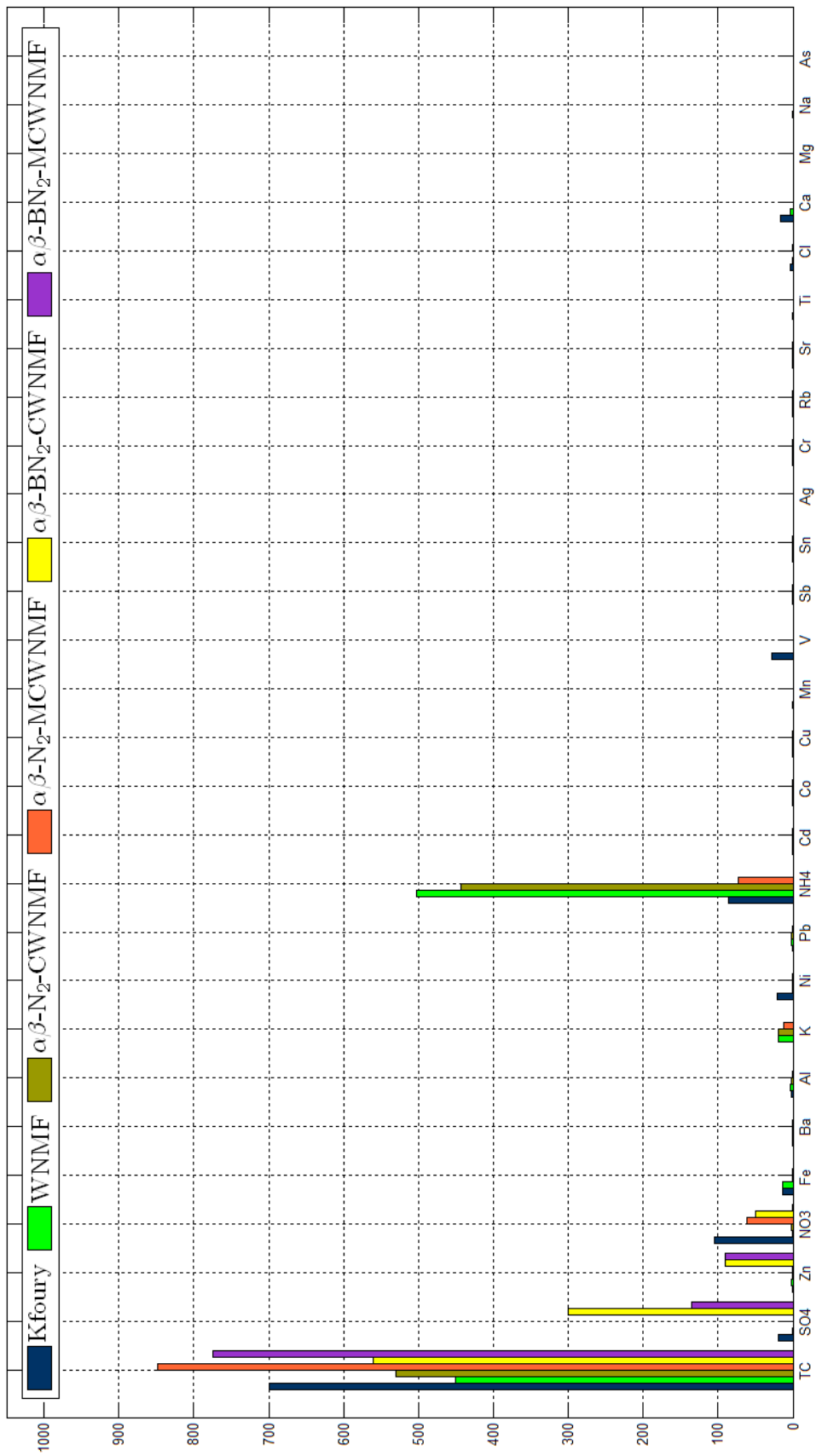


FIGURE D.5 – Profil de la source *Trafic échappement*.

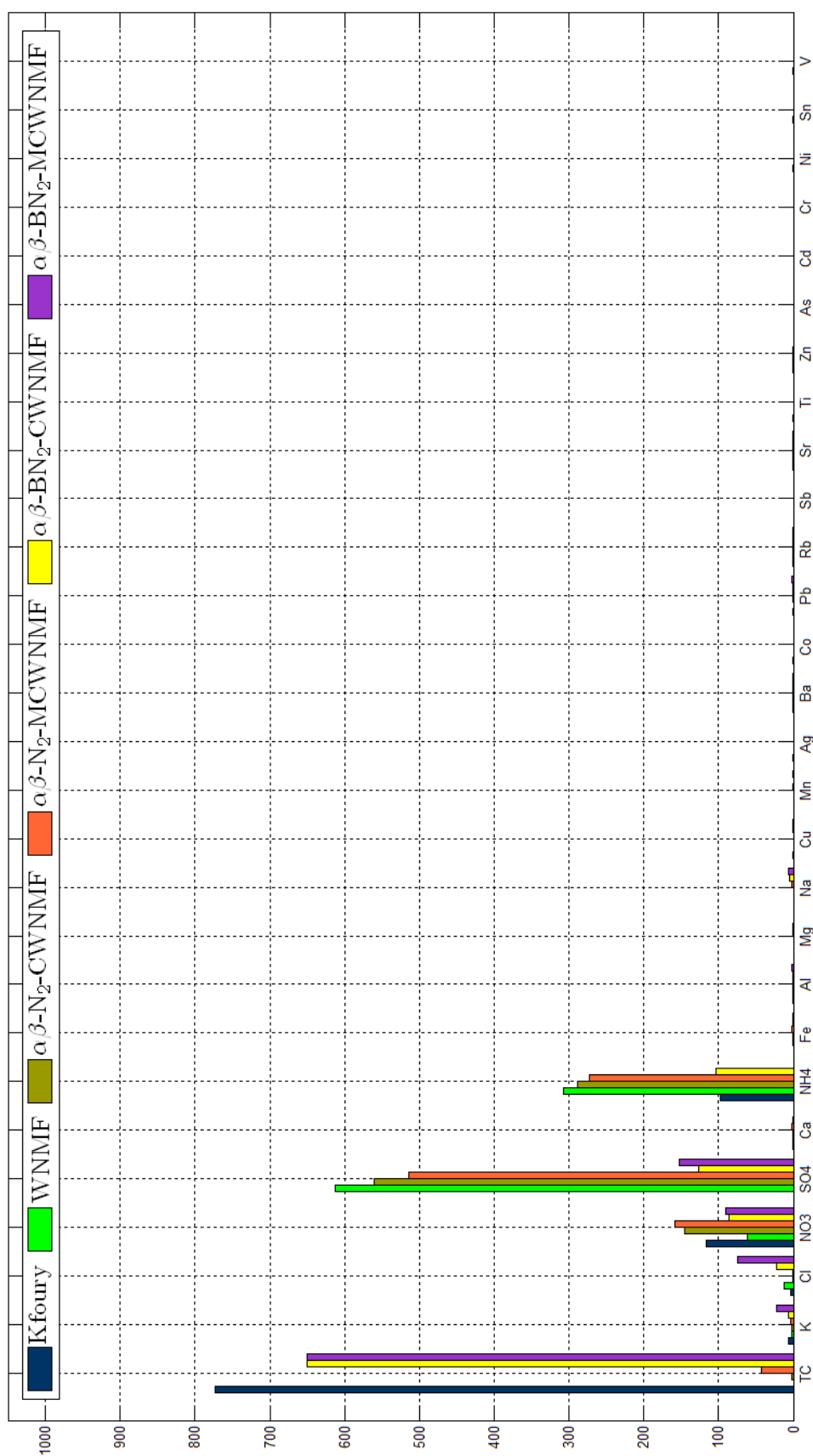


FIGURE D.6 – Profil de la source *Combustion biomasse*.

Bibliographie

- [1] F. Abrard and Y. Deville. A time-frequency blind signal separation method applicable to underdetermined mixtures of dependent sources. *Signal Processing*, 85(7) :1389–1403, July 2005.
- [2] M. Aharon, M. Elad, and A. M. Bruckstein. K-SVD : an algorithm for designing over-complete dictionaries for sparse representation. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 54(11) :4311–4322, 2006.
- [3] S. Amari. Alpha divergence is unique, belonging to both f divergence and bregman divergence classes. *Information Theory, IEEE Transactions on*, 55(11) :4925–4931, 2009.
- [4] P. Anttila, P. Paatero, U. Tapper, and O. Järvinen. Source identification of bulk wet deposition in finland by positive matrix factorization. *Atmospheric Environment*, 29(14) :1705–1718, 1995.
- [5] S. Arberet, R. Gribonval, and F. Bimbot. A robust method to count and locate audio sources in a multichannel underdetermined mixture. *Signal Processing, IEEE Transactions on*, 58(1) :121 –133, January 2010.
- [6] S. Arora, R. Ge, R. Kannan, and A. Moitra. Computing a nonnegative matrix factorization – provably. In *Proceedings of the 44th symposium on Theory of Computing*, pages 145–162, 2012.
- [7] S. M. Aziz Sbai, A. Aissa El Bey, and D. Pastor. Underdetermined Source Separation of Finite Alphabet Signals Via L1 Minimization. In *ISSPA 2012 : 11th IEEE International Conference on Information Sciences, Signal Processing and their Applications*, pages 625–628, 2012.
- [8] M. Babaie-Zadeh, C. Jutten, and A. Mansour. Sparse ICA via cluster-wise PCA. *Neurocomputing*, 69(13–15) :1458–1466, August 2006.
- [9] A. Basu, I. R. Harris, N. L. Hjort, and M. C. Jones. Robust and efficient estimation by minimising a density power divergence. *Biometrika*, 85(3) :549–559, 1998.
- [10] E. Be’ery and A. Yeredor. Blind separation of reflections with relative spatial shifts. In *Proceedings of the 2006 IEEE International Conference on Acoustics, Sound and Signal*

- Processing (ICASSP 2006)*, volume 5, pages 625–628, Toulouse, France, May 14–19, 2006.
- [11] A. J. Bell and T. J. Sejnowski. An information-maximisation approach to blind separation and blind deconvolution. *Neural Computation*, 7 :1129–1159, 1995.
- [12] A. Belouchrani, K. Abed-Meraim, J.-F. Cardoso, and E. Moulines. A blind source separation technique using second-order statistics. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 45(2) :434–444, February 1997.
- [13] A. Belouchrani and M. G. Amin. Blind source separation based on time-frequency signal representations. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 46(11) :2888–2897, November 1998.
- [14] D. Benachir, Y. Deville, S. Hosseini, M. S. Karoui, and A. Hameurlain. Hyperspectral image unmixing by non-negative matrix factorization initialized with modified independent component analysis. In *Proceedings of the 5th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing (WHISPERS 2013)*, Gainesville, Florida, USA, June 2013.
- [15] O. Bermond and J.-F. Cardoso. Méthodes de séparation de sources dans le cas sous-déterminé. in *Proc. GRETSI*, September 1999.
- [16] O. Berné, C. Joblin, Y. Deville, J. D. Smith, M. Rapaccioli, J. P. Bernard, J. Thomas, W. Reach, and A. Abergel. Analysis of the emission of very small dust particles from spitzer spectro-imagery data using blind signal separation methods. *Astronomy & Astrophysics*, 469(2) :575–586, July 2007.
- [17] O. Berné, C. Joblin, M. Rapacioli, J. Thomas, J.-C. Cuillandre, and Y. Deville. Extended red emission and the evolution of carbonaceous nanograins in NGC 7023. *Astronomy & Astrophysics*, 479 :L41–L44, 2008.
- [18] N. Bertin, R. Badeau, and E. Vincent. Enforcing harmonicity and smoothness in bayesian non-negative matrix factorization applied to polyphonic music transcription. *IEEE Transactions on Audio, Speech & Language Processing*, 18(3) :538–549, 2010.
- [19] D. P. Bertsekas. *Nonlinear Programming*. Athena Scientific, 2nd edition, 1999.
- [20] V. Bittorf, C. Ré, B. Recht, and J.A. Tropp. Factoring nonnegative matrices with linear programs. In *Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS)*, pages 1223–1231, 2012.
- [21] C. Blandin, A. Ozerov, and E. Vincent. Multi-source TDOA estimation in reverberant audio using angular spectra and clustering. *Signal Processing*, 92 :1950–1960, 2012.
- [22] J. Bobin, J.-L. Starck, M.J. Fadili, and Y. Moudden. Sparsity, morphological diversity and blind source separation. *IEEE Transactions on Image Processing*, 16(11) :2662–2674, 2007.

-
- [23] R. Bro and S. De Jong. A fast non-negativity-constrained least squares algorithm. *Journal of Chemometrics*, 11 :393–401, 1997.
- [24] E. J. Candès, X. Li, Y. Ma, and J. Wright. Robust principal component analysis ? *Journal of ACM*, 58(1) :1–37, 2009.
- [25] J.-F. Cardoso. Super-symmetric decomposition of the fourth-order cumulant tensor. blind identification of more sources than sensors. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP'91)*, pages 3109—3112, 1991.
- [26] J. Chen, C. Richard, and P. Honeine. Nonlinear unmixing of hyperspectral data based on a linear-mixture/nonlinear-fluctuation model. *IEEE Transactions on signal processing*, 61(2) :480–492, January 2013.
- [27] J. Chen, C. Richard, and P. Honeine. Nonlinear abundance estimation of hyperspectral images with l_1 -norm spatial regularization. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 52(5) :2654–2655, May 2014.
- [28] J. C. Chen. Non-negative rank factorization of non-negative matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 62 :207–217, 1984.
- [29] S. S. Chen, D. L. Donoho, and M. A. Saunders. Atomic decomposition by basis pursuit. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20 :33–61, 1998.
- [30] Z. Chen, A. Cichocki, and T. M. Rutkowski. Constrained non-negative matrix factorization method for eeg analysis in early detection of alzheimer’s disease. In *IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing,, ICASSP2006*, pages 893–896, 2006.
- [31] H. Chernoff. A measure of asymptotic efficiency for tests of a hypothesis based on a sum of observations. *Annals of Mathematical Statistics*, 23(4) :493–507, 1952.
- [32] S. Choi. Algorithms for orthogonal nonnegative matrix factorization. In *Neural Networks, 2008. IJCNN 2008. (IEEE World Congress on Computational Intelligence). IEEE International Joint Conference on*, pages 1828–1832, June 2008.
- [33] E. Chouzenoux. *Recherche de pas par Majoration-Minoration. Application à la résolution de problèmes inverses*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Nantes, 2010.
- [34] A. Cichocki and S. Amari. Families of Alpha- Beta- and Gamma- divergences : Flexible and robust measures of similarities. *Entropy*, 12(6) :1532–1568, 2010.
- [35] A. Cichocki, S. Cruces, and S. Amari. Generalized alpha-beta divergences and their application to robust nonnegative matrix factorization. *Entropy*, 13 :134–170, 2011.

- [36] A. Cichocki, H. Lee, Y. Kim, and S. Choi. Nonnegative matrix factorization with alpha-divergence. *Pattern Recognition Letters*, 29(9) :1433–1440, 2008.
- [37] A. Cichocki, R. Zdunek, and S. Amari. Csiszar’s divergences for non-negative matrix factorization : Family of new algorithms. In *LNCS*, pages 32–39. Springer, 2006.
- [38] A. Cichocki, R. Zdunek, A. H. Phan, and S. Amari. Introduction- problem statements and models. In *Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations : Applications to Exploratory Multi-Way Data Analysis and Blind Source Separation*. John Wiley & Sons, 2009.
- [39] A. Cichocki, R. Zdunek, A. H. Phan, and S. Amari. *Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations - Applications to Exploratory Multi-way Data Analysis and Blind Source Separation*. Wiley, 2009.
- [40] P. Comon. Independent component analysis, a new concept? *Signal Processing*, 36(3) :287–314, April 1994.
- [41] P. Comon and C. Jutten. *Handbook of blind source separation. Independent component analysis and applications*. Academic Press, 2010.
- [42] L. De Lathauwer and J. Castaing. Blind identification of underdetermined mixtures by simultaneous matrix diagonalization. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 56(3) :1096–1105, March 2008.
- [43] G. Delmaire and G. Roussel. Joint estimation decision methods for source localization and restoration in parametric convolution processes. Application to accidental pollutant release. *Digital Signal Processing*, 22(1) :34–46, 2012.
- [44] Y. Deville, M. Benali, and F. Abrard. Differential source separation for underdetermined instantaneous or convolutive mixtures : concept and algorithms. *Signal Processing*, 84(10) :1759–1776, October 2004.
- [45] Y. Deville, J. Damour, and N. Charkani. Multi-tag radio-frequency identification systems based on new blind source separation neural networks. *Neurocomputing*, 49 :369–388, 2002.
- [46] Y. Deville and M. Puigt. Temporal and time-frequency correlation-based blind source separation methods. part I : linear instantaneous mixtures. *Signal Processing*, 87(3) :374–407, March 2007.
- [47] Y. Deville and M. Puigt. Temporal and time-frequency correlation-based blind source separation methods. part I : linear instantaneous mixtures. *Signal Processing*, 87(3) :374–407, March 2007.
- [48] C. Ding, T. Li, W. Peng, and H. Park. Orthogonal nonnegative matrix tri-factorizations for clustering. In *Proc. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining*. Proc Int’l Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD 2006), August 2006.

-
- [49] N. Dobigeon, J.-Y. Tourneret, C. Richard, J.-C. Bermudez, S. McLaughlin, and A. O. Hero. Nonlinear unmixing of hyperspectral images : Models and algorithms. *IEEE Signal Processing Magazine*, 31(1) :82–94, 2014.
- [50] D. Donoho and V. Stodden. When does non-negative matrix factorization give a correct decomposition into parts ? In Sebastian Thrun, Lawrence Saul, and Bernhard Schölkopf, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 16*, page None. MIT Press, Cambridge, MA, 2003.
- [51] D.Pham. Mutual information approach to blind separation of stationary sources. *Proceedings of ICA'99*, pages 215–220, 1999.
- [52] S. Eguchi and S. Kato. Entropy and divergence associated with power function and the statistical application. *Entropy*, 12(2) :262–274, 2010.
- [53] A. Escrig, E. Monfort, I. Celades, X. Querol, F. Amato, M.C. Minguillón, and P.K. Hopke. Application of optimally scaled target factor analysis for assessing source contribution of ambient pm10. *Journal of the Air Waste Management Association*, 59(29) :1296–1307, 2009.
- [54] C. Févotte and C. Doncarli. Two contributions to blind source separation using time-frequency distributions. *IEEE Signal Processing Letters*, 11(3) :386–389, March 2004.
- [55] C. Févotte and J. Idier. Algorithms for nonnegative matrix factorization with the beta-divergence. *Neural computation*, 23(9) :2421–2456, September 2011.
- [56] N. Gillis. Sparse and unique nonnegative matrix factorization through data preprocessing. *Journal of Machine Learning Research*, 13 :3349–3386, November 2012.
- [57] N. Gillis and F. Glineur. Accelerated multiplicative updates and hierarchical als algorithms for nonnegative matrix factorization. *Neural Computation*, 24(4) :1085–1105, 2012.
- [58] N. Gillis and S.A. Vavasis. Fast and robust recursive algorithms for separable nonnegative matrix factorization. *IEEE Trans. on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 36(4) :698–714, 2014.
- [59] C. Gobinet. *Application de techniques de séparation de sources à la spectroscopie Raman et à la spectroscopie de fluorescence*. Thèse de doctorat, Université de Reims Champagne-Ardenne, 2006.
- [60] E. F. Gonzales and Y. Zhang. Accelerating the Lee-Seung algorithm for nonnegative matrix factorization. Technical report, Dept. of Computational and Applied Mathematics, Rice University, 2005.

- [61] A. Gorokhov and P. Loubaton. Subspace-based techniques for blind separation of convolutive mixtures with temporally correlated sources. *IEEE Transactions on Circuits and Systems I : Fundamental Theory and Applications*, 44(9) :813–820, September 1997.
- [62] D. Grillière. Séparation de sources mutuellement corrélées. application aux signaux astrophysiques, 2009.
- [63] D. Guillamet, J. Vitria, and B. Schiele. Introducing a weighted non-negative matrix factorization for image classification. *Pattern Recognition Letters*, 24(14) :2447–2454, 2003.
- [64] Z. He, A. Cichocki, Y. Li, S. Xie, and S. Sanei. K-hyperline clustering learning for sparse component analysis. *Signal Processing*, 89 :1011–1022, 2009.
- [65] D. C. Heinz and C Chang. Fully constrained least squares linear mixture analysis for material quantification in hyperspectral imagery. *IEEE Trans. on Geoscience and Remote Sensing*, 39 :529–545, 2001.
- [66] R. Hennequin, B. David, and R. Badeau. Beta-divergence as a subclass of Bregman divergence. *IEEE Signal Processing Letters*, 18(2) :83–86, February 2011.
- [67] D. Hleis. *Evaluation de la contribution d'émissions sidérurgiques à la teneur en particules en suspension dans l'atmosphère a une échelle locale*. Thèse de doctorat, Université du Littoral Côte d'Opale, 2010.
- [68] N.-D. Ho. *Non negative matrix factorizations algorithms and applications*. Ph.d. thesis, Université Catholique de Louvain, 2008.
- [69] H. Hotelling. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. *Journal of Educational Psychology*, 24(7) :498–520, 1933.
- [70] P. O. Hoyer. Non-negative matrix factorization with sparseness constraint. *Journal of Machine Learning Research*, 5 :1457–1469, November 2004.
- [71] J. Hérault, C. Jutten, and B. Ans. Détection de grandeurs primitives dans un message composite par une architecture de calcul neuromimétique en apprentissage non-supervisé. In *Actes du 10^{ème} colloque GRESTI*, pages 1017–1022, Nice, France, mai 1985.
- [72] D. R. Hunter and K. Lange. A tutorial on MM algorithms. *Amer. Statist*, pages 30–37, 2004.
- [73] A. Hyvärinen. Fast and Robust Fixed-Point Algorithms for Independent Component Analysis. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 10(3) :626–634, May 1999.
- [74] A. Hyvärinen, J. Karhunen, and E. Oja. *Independent Component Analysis*. Wiley-Interscience, New York, 2001.

-
- [75] A. Hyvärinen and E. Oja. A fast fixed-point algorithm for independent component analysis. *Neural Computation*, 9(7) :1483–1492, October 1997.
- [76] B. Johansson, T. Elfving, V. Kozlov, Y. Censor, P.-E. Forssén, and G. Granlund. The application of an oblique-projected landweber method to a model of supervised learning. *Mathematical and Computer Modelling*, 43 :892–909, April 2006.
- [77] C. Jutten and J. Héroult. Blind separation of sources, part 1 : an adaptive algorithm based on neuromimetic architecture. *Signal Processing*, 24 :1–10, 1991.
- [78] M. S. Karoui, Y. Deville, S. Hosseini, and A. Ouamri. Blind spatial unmixing of multispectral images : New methods combining sparse component analysis, clustering and non-negativity constraints. *Pattern Recognition*, pages 4263–4278, 2012.
- [79] A. Keats, M.-T. Cheng, E. Yee, and F.-S. Lien. Bayesian treatment of a chemical mass balance receptor model with multiplicative error structure. *Atmospheric Environment*, 43 :510–519, 2009.
- [80] A. Kfoury. *Origin and physicochemical behaviour of atmospheric PM_{2.5} in cities located in the littoral area of the Nord-Pas-de-Calais region, France*. Phd thesis, Université du Littoral Côte d’Opale, 2013.
- [81] H. Kim and H. Park. Nonnegative matrix factorization based on alternating nonnegativity constrained least squares and active set method. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 30(2) :713–730, 2008.
- [82] H. Kim and H. Park. Algorithms for nonnegative matrix and tensor factorizations : A unified view based on block coordinate descent framework. *Journal of Global Optimization*, 28(2) :285–319, February 2014.
- [83] J. Kim, Y. He, and H. Park. Algorithms for nonnegative matrix and tensor factorizations : a unified view based on block coordinate descent framework. *Journal of Global Optimization*, pages 1–35, March 2013.
- [84] C. H. Knapp and G. C. Carter. The generalized correlation method for estimation of time delay. *IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, 24(4), August 1976.
- [85] R. Kompass. A generalized divergence measure for nonnegative matrix factorization. *Neural Comput.*, 19(3) :780–791, 2007.
- [86] S. Kullback. *Information Theory and Statistics*. John Wiley & Sons, 1959.
- [87] H. Lantéri, C. Theys, C. Richard, and C. Févotte. Split gradient method for nonnegative matrix factorization. In *Proc. of EUSIPCO Conference*, Aalborg, Denmark, 2010.

- [88] L. De Lathauwer, B. De Moor, and J. Vandewalle. Fetal electrocardiogram extraction by blind source subspace separation. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 47(5) :567–572, May 2000.
- [89] C. L. Lawson and R. J. Hanson. *Solving least squares problems*. Englewood Cliffs : Prentice-Hall, 1974, 3 edition, 1995.
- [90] D. D. Lee and H. S. Seung. Learning the parts of objects by non negative matrix factorization. *Nature*, 401(6755) :788–791, 1999.
- [91] D. D. Lee and H. S. Seung. Algorithms for non-negative matrix factorization. In *In NIPS*, pages 556–562. MIT Press, 2001.
- [92] A. Limem, G. Delmaire, M. Puigt, G. Roussel, and D. Courcot. Non-negative matrix factorization using weighted beta divergence and equality constraints for industrial source apportionment. In *Proc. of MLSP*, 2013.
- [93] A. Limem, G. Delmaire, M. Puigt, G. Roussel, and D. Courcot. Non-negative matrix factorization under equality constraints—a study of industrial source identification. *Applied Numerical Mathematics*, 85(0) :1 – 15, 2014.
- [94] A. Limem, G. Delmaire, G. Roussel, and D. Courcot. Kullback-leibler nmf under linear equality constraints. application to pollution source apportionment. *International Conference on Information Science, Signal Processing and their Applications*, pages 752 – 757, July 2012.
- [95] A. Limem, M. Puigt, G. Delmaire, G. Roussel, and D. Courcot. Bound constrained weighted nmf for industrial source apportionment. In *Proc. of MLSP*, 2014.
- [96] C.-J. Lin. Projected gradients methods for non-negative matrix factorization. *Neural Computation*, 19 :2756–2779, 2007.
- [97] C.-J. Lin and J. J. Moré. Newton’s method for large bound-constrained optimization problems. *SIAM JOURNAL ON OPTIMIZATION*, 9 :1100–1127, 1998.
- [98] J. W. Lingwall and W. F. Christensen. Pollution source apportionment using a priori information and positive matrix factorization. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 87(2) :281 – 294, 2007.
- [99] H. Liu and Z. Wu. Non-negative matrix factorization with constraints. In *AAAI*, Atlanta, Georgia, USA, 2010. Proceedings of the Twenty-Fourth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI-10).
- [100] D.G. Luenberger and Yinyu Ye. *Linear and nonlinear programming*. Springer, New York, 3rd edition edition, 2008.

-
- [101] S. D. Macheemer. Characterization of airborne and bulk particulate from iron and steel manufacturing facilities. *Environ. Sci. Techn.*, 38(2) :381–389, 2004.
- [102] A. Mansour. A mutually referenced blind multiuser separation of convolutive mixture algorithm. *Signal Processing*, 81(11) :2253 – 2266, 2001.
- [103] A. Mansour, M. Kawamoto, and N. Ohnishi. A survey of the performance indexes of ica algorithms. In *21st IASTED International Conference on Modelling, Identification and Control (MIC 2002)*, pages 660 – 666, Innsbruck, Austria, 2002.
- [104] M. Martinez-Camara, I. Dokmanic, J. Ranieri, R. Scheibler, and M. Vetterli. The Fukushima Inverse Problem. In *38th International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, 2013.
- [105] I. Meganem, Y. Deville, S. Hosseini, P. Déliot, and X. Briottet. Linear-quadratic blind source separation using NMF to unmix urban hyperspectral images. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 62(7) :1822–1833, 2014.
- [106] I. Meganem, P. Déliot, X. Briottet, Y. Deville, and S. Hosseini. Linear-quadratic mixing model for reflectances in urban environments. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 52(1) :544–558, 2014.
- [107] S. Mehrotra. On the implementation of a primal-dual interior point method. *Journal on Optimization*, 2(1) :575–601, 1992.
- [108] M. Merritt and Y. Zhang. An interior-point gradient method for large-scale totally non-negative least squares problems. *J. Optimization Theory and Applications*, 126(1) :191–202, 2005.
- [109] L. Miao and H. Qi. Endmember extraction from highly mixed data using minimum volume constrained nonnegative matrix factorization. *IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing*, 45(3) :765–777, 2007.
- [110] M. Minami and S. Eguchi. Robust blind source separation by beta divergence. *Neural Comput.*, 14(8) :1859–1886, 2002.
- [111] T. Minka. Divergence measures and message passing. Technical report, Microsoft Research Technical Report (MSR-TR-2005), 2005.
- [112] N. Mohammadiha and A. Leijon. Nonnegative matrix factorization using projected gradient algorithms with sparseness constraints. In *Signal Processing and Information Technology (ISSPIT), 2009 IEEE International Symposium on*, pages 418–423, 2009.
- [113] Md. N. H. Mollah, M. Minami, and S. Eguchi. Exploring latent structure of mixture ICA models by the minimum β -divergence method. *Neural Comput.*, 18(1) :166–190, January 2006.

- [114] Md. N. H. Mollah, N. Sultana, M. Minami, and S. Eguchi. Robust extraction of local structures by the minimum beta-divergence method. *Neural Networks*, 23(2) :226–238, 2010.
- [115] S. Moussaoui. *Séparation de sources non-négatives. Application au traitement des signaux de spectroscopie*. Thèse de doctorat, Université Henri Poincaré, Nancy 1, 2005.
- [116] 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. *Signal Processing, IEEE Transactions on*, 54(11) :4133–4145, 2006.
- [117] S. Moussaoui, H. Hauksdóttir, F. Schmidt, C. Jutten, J. Chanussot, D. Brie, S. Douté, and J.A. Benediksson. On the decomposition of mars hyperspectral data by ICA and Bayesian positive source separation. *Neurocomputing*, 71 :2194–2208, 2008.
- [118] E. Z. Nadalin, R. Suyama, and R. Attux. An ica-based method for blind source separation in sparse domains. In *Independent Component Analysis and Signal Separation*, volume 5441 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 597–604, 2009.
- [119] F. M. Naeini, H. Mohimani, M. Babaie-Zadeh, and C. Jutten. Estimating the mixing matrix in sparse component analysis (SCA) based on partial k-dimensional subspace clustering. *Neurocomputing (Elsevier)*, 71 :2330–2343, June 2008.
- [120] S. Nam, M. E. Davies, M. Elad, and R. Gribonval. The cospase analysis model and algorithms. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 34(1) :30–56, 2013.
- [121] Nathan Srebro Nati and Tommi Jaakkola. Weighted low-rank approximations. In *In 20th International Conference on Machine Learning*, pages 720–727. AAAI Press, 2003.
- [122] A. Nemirovski. Orth-method for smooth convex optimization. *Izvestia AN SSSR, Transl. : Eng. Cybern. Soviet J. Comput. Syst. Sci.*, 2 :937–947, 1982.
- [123] K. Oravisjarvi, K.L. Timonen, T. Wiikinkoski, A.R. Ruuskanen, K. Heinanen, and J. Ruuskanen. Source contributions to pm2.5 particles in the urban air of a town situated close to a steel works. *Atmospheric Environment*, 37(2) :1013–1022, 2003.
- [124] W. S. B. Ouedraogo, A. Souloumiac, and C. Jutten. Non-negative independent component analysis algorithm based on 2D givens rotations and a newton optimization. In *Proceedings of the 9th International Conference on Latent Variable Analysis and Signal Separation (LVA/ICA 2010)*, volume 6365 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 522–529, 2010.
- [125] P. Paatero. Least squares formulation of robust non-negative factor analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 37(1) :23–35, 1997.

-
- [126] P. Paatero and U. Tapper. Positive matrix factorization : a non negative factor model with optimal utilization of error estimates of data values. *Environmetrics*, 5(2) :111–126, 1994.
- [127] N. Pandya. *Analyse de sensibilité paramétrique d'un outil de modélisation des conséquences de scénarios d'accidents. Application à la dispersion atmosphérique de rejets avec le logiciel Phast*. Phd thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.
- [128] M. Parvaix. *Séparation de sources audio informée par tatouage pour mélanges linéaires instantanés stationnaires*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2010.
- [129] D. Pavlidi, A. Griffin, M. Puigt, and A. Mouchtaris. Real-time multiple sound source localization and counting using a circular microphone array. *IEEE Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, 21(10) :2193–2206, October 2013.
- [130] K. Pearson. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine*, 2(6) :559–572, 1901.
- [131] M. S. Pedersen, J. Larsen, U. Kjems, and L. C. Parra. A survey of convolutive blind source separation methods. In *Springer Handbook of Speech*. Springer Press, September 2007.
- [132] K. B. Petersen and M. S. Pedersen. *The Matrix Cookbook*. Technical University of Denmark, 2012.
- [133] D.-T. Pham and J.F. Cardoso. Blind separation of instantaneous mixtures of nonstationary sources. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 49(9) :1837–1848, September 2001.
- [134] J. Plaza, R. Perez, P. Martinez, and A. Plaza. Joint linear/nonlinear spectral unmixing of hyperspectral image data. In *Proc. of IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS'07)*, Barcelona, Spain, 2007.
- [135] M. Plouvin. Développement d'une plateforme de simulation directe et inverse d'épisodes de pollution atmosphérique, 2013.
- [136] M. Plouvin, A. Limem, M. Puigt, G. Delmaire, G. Roussel, and D. Courcot. Enhanced NMF initialization using a physical model for pollution source apportionment. In *in Proc. of the 22nd European Symposium on Artificial Neural Networks, Computational Intelligence and Machine Learning*, pages 261–266, April 2014.
- [137] M. D. Plumbley. Conditions for nonnegative independent component analysis. *Signal Processing Letters, IEEE*, 9(6) :177–180, 2002.
- [138] M. D. Plumbley. Algorithms for nonnegative independent component analysis. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 14(3) :534–543, 2003.

- [139] M. D. Plumbley and E. Oja. A "nonnegative PCA" algorithm for independent component analysis. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 15(1) :66–76, 2004.
- [140] M. Puigt. *Méthodes de séparation aveugle de sources fondées sur des transformées temps-fréquence. Application à des signaux de parole*. Thèse de doctorat, Université de Toulouse, 2007.
- [141] M. Puigt and Y. Deville. Time-frequency ratio-based blind separation methods for attenuated and time-delayed sources. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 19 :1348–1379, 2005.
- [142] M. Puigt and Y. Deville. Iterative-shift cluster-based time-frequency bss for fractional-time-delay mixtures. In Springer-Verlag Berlin Heidelberg, editor, *Proceedings of the 8th International Conference on Independent Component Analysis and Blind Source Separation (ICA 2009)*, volume LNCS 5441, pages 306–313, Paraty, Brazil, March 15–18, 2009.
- [143] Z. Ramadan, X. H. Song, and P. K. Hopke. Identification of sources of phoenix aerosol by positive matrix factorization. *Journal of Air and Waste Management Association*, 50(8) :1308–1320, 2000.
- [144] J. Ranieri, Y. Lu, A. Chebira, and M. Vetterli. Sampling and reconstructing diffusion fields with localized sources. In *2011 Ieee International Conference On Acoustics, Speech, And Signal Processing*, Prague, Czech Republic, 2011.
- [145] V. G. Reju, S. N. Koh, and I. Y. Soon. An algorithm for mixing matrix estimation in instantaneous blind source separation. *Signal Processing*, 89(9) :1762–1773, 2009.
- [146] J. J. Rieta, F. Castells, C. Sánchez, V. Zarzoso, and J. Millet. Atrial activity extraction for atrial fibrillation analysis using blind source separation. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 51(7) :1176–1186, 2004.
- [147] B. Rivet. Blind non-stationary sources separation by sparsity in a linear instantaneous mixture. In Springer-Verlag, editor, *Proceedings of the 8th International Conference on Independent Component Analysis and Blind Source Separation (ICA 2009)*, volume LNCS 5441, pages 314–321, Paraty, RJ, Brazil, March 15–18, 2009.
- [148] S. Di Sabatino, R. Buccolieria, B. Pulvirentib, and R. Britterc. Simulations of pollutant dispersion within idealised urban-type geometries with cfd and integral models. *Atmospheric Environment*, 41(5) :8316–8329, 2007.
- [149] M. Sadeghi, M. Babaie-Zadeh, and C. Jutten. Dictionary learning for sparse representation : A novel approach. *IEEE Signal Processing Letters*, 20(12) :1195–1198, December 2013.

-
- [150] M. Sadeghi, M. Babaie-Zadeh, and C. Jutten. Learning overcomplete dictionaries based on atom-by-atom updating. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 62(4) :883–891, February 2014.
- [151] H. Saylani, S. Hosseini, Y. Deville, and M. Habibi. A multi-tag radio-frequency identification system using new blind source separation methods based on spectral decorrelation / système d’identification radio-fréquence multi-badge utilisant de nouvelles méthodes de séparation aveugle de sources à décorrélation spectrale. *Physical and Chemical News*, 35 :31–42, May 2007.
- [152] R. Schachtner, G. Pöppel, A.-M. Tomé, and E. W. Lang. Minimum determinant constraint for non-negative matrix factorization. In *Independent Component Analysis and Signal Separation*, volume LNCS 5441, pages 106–113, 2009.
- [153] J.J. Schauer and Health Effects Institute. *Characterization of Metals Emitted from Motor Vehicles*. Research report (Health Effects Institute). Health Effects Institute, 2006.
- [154] M. Schuermans. *Weighted Low Rank Approximation : Algorithms and applications*. Phd thesis, Faculty of Engineering, K.U.Leuven (Leuven, Belgium), 2006.
- [155] J. J. Settle and N. A. Drake. Linear mixing and the estimation of ground cover proportions. *International Journal of Remote Sensing*, 14 :1159–1177, 1993.
- [156] A. P. Singh and G. J. Gordon. A unified view of matrix factorization models. In *Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases, European Conference (ECML/PKDD)*, 2008. ECML/PKDD-2008.
- [157] J P Snyder. Map projections - a working manual. *USGS Paper*, 1935,1987.
- [158] A. Souloumiac. Blind source detection and separation using second-order non-stationarity. In *Proceedings of the IEEE 1995 International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP 1995)*, volume 3, pages 1912–1915, Detroit, Michigan, USA, May 9–12, 1995.
- [159] N. Srebro and T. Jaakkola. Weighted low-rank approximations. In *ICML*, pages 720–727, 2003.
- [160] J. M. Stockie. The mathematics of atmospheric dispersion modeling. *SIAM Rev.*, 53(2) :349–372, May 2011.
- [161] J. Thomas, Y. Deville, and S. Hosseini. Time-domain fast fixed-point algorithms for convolutive ICA. *IEEE Signal Processing Letters*, 13(4) :228–231, April 2006.
- [162] L. Tong, R. W. Liu, V. C. Soon, and Y. F. Huang. Indeterminacy and identifiability of blind identification. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 38(5) :499–509, May 1991.

- [163] B. Turner. *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates : An Introduction to Dispersion Modeling, Second Edition*, chapter Estimates of atmospheric dispersion. Lewis Publishers, 1994.
- [164] S.A. Vavasis. On the complexity of nonnegative matrix factorization. *SIAM J. on Optimization*, 20(3) :1364–1377, 2009.
- [165] M. Viana, T. A. J. Kuhlbusch, X. Querol, and A. Alastuey. The effects of particle-size distribution and chloride depletion of sea-salt aerosols on estimating atmospheric deposition at a coastal site. *Journal of Aerosol Science*, 39(10) :827–849, 2008.
- [166] R. Vidal, Y. Ma, and S. Sastry. Generalized principal component analysis (GPCA), December 2005.
- [167] E. Vincent, S. Araki, and P. Bofill. The 2008 signal separation evaluation campaign : A community-based approach to large-scale evaluation. In *Proc. of ICA*, pages 734–741, Paraty, Brazil, 2009.
- [168] E. Vincent, H. Sawada, P. Bofill, S. Makino, and J.P. Rosca. First stereo audio source separation evaluation campaign : data, algorithms and results. In *Proc. of Int. Conf. on Independent Component Analysis and Signal Separation (ICA)*, pages 552–559, 2007.
- [169] T. Virtanen. Monaural sound source separation by nonnegative matrix factorization with temporal continuity and sparseness criteria. *Trans. Audio, Speech and Lang. Proc.*, 15(3) :1066–1074, March 2007.
- [170] WHO. *Air quality guidelines for Europe, 2nd edition*. Number 91 in WHO regional publications. European series. WHO Regional Office for Europe, 2000.
- [171] S. Wild. Seeding non-negative matrix factorization with the spherical k-means clustering. Technical report, University of Colorado, 2003.
- [172] J. Wright. Robust principal component analysis : Exact recovery of corrupted low-rank matrices via convex optimization. In *Advances in Neural Information Processing Systems* 22, 2009.
- [173] A. Yeredor. Blind source separation with pure delays mixture. In *Proc. of ICA*, pages 522–527, 2001.
- [174] Ö. Yilmaz and S. Rickard. Blind separation of speech mixtures via time-frequency masking. *IEEE TSP*, 52(7) :1830–1847, 2004.
- [175] J. Yoo and S. Choi. Nonnegative matrix factorization with orthogonality constraints. *Journal of computing science and engineering*, 4(2) :97–109, June 2010.
- [176] Z. Yuan and E. Oja. A FastICA algorithm for non-negative independent component analysis. In *Proceedings of the Fifth International Symposium on Independent Component*

Analysis and Blind Signal Separation (ICA 2004), volume 3195 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 1–8, Granada, Spain, 2004.

- [177] Z. Yuan and E. Oja. Projective nonnegative matrix factorization for image compression and feature extraction. In *In Proc. of Scandinavian Conference on Image Analysis*, pages 333–342, 2005.
- [178] A. Zandifar, M. Babaie-Zadeh, and C. Jutten. A projected gradient-based algorithm to unmix hyperspectral data. In *Proc. of the 20th European Signal Processing Conference (EUSIPCO 2012)*, pages 2482–2486, 2012.
- [179] R. Zass and A. Shashua. Nonnegative sparse PCA. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2006.

Résumé

Les méthodes de NMF permettent la factorisation aveugle d'une matrice non-négative X en le produit $X = G \cdot F$ de deux matrices non-négatives G et F . Bien que ces approches sont étudiées avec grand intérêt par la communauté scientifique, elles souffrent bien souvent d'un manque de robustesse vis à vis des données et des conditions initiales et peuvent présenter des solutions multiples. Dans cette optique et afin de réduire l'espace des solutions admissibles, les travaux de cette thèse ont pour objectif d'informer la NMF, positionnant ainsi nos travaux entre la régression et les factorisations aveugles classiques. Par ailleurs, des fonctions de coûts paramétriques appelées divergences $\alpha\beta$ sont utilisées, permettant de tolérer la présence d'aberrations dans les données.

Nous introduisons trois types de contraintes recherchées sur la matrice F à savoir (i) la connaissance *exacte* ou *bornée* de certains de ses éléments et (ii) la somme à 1 de chacune de ses lignes. Des règles de mise à jour permettant de faire cohabiter l'ensemble de ces contraintes par des méthodes multiplicatives mixées à des projections sont proposées. D'autre part, nous proposons de contraindre la structure de la matrice G par l'usage d'un modèle physique susceptible de distinguer les sources présentes au niveau du récepteur.

Une application d'identification de sources de particules en suspension dans l'air, autour d'une région industrielle du littoral nord de la France, a permis de tester l'intérêt de l'approche. A travers une série de tests sur des données synthétiques et réelles, nous montrons l'apport des différentes informations pour rendre les résultats de la factorisation plus cohérents du point de vue de l'interprétation physique et moins dépendants de l'initialisation.

Mots-clés: séparation informée de sources, factorisation matricielle non-négative, contraintes expertes, divergence $\alpha\beta$, identification de particules dans l'air

Abstract

NMF methods aim to factorize a non-negative observation matrix X as the product $X = G \cdot F$ between two non-negative matrices G and F . Although these approaches have been studied with great interest in the scientific community, they often suffer from a lack of robustness to data and to initial conditions, and provide multiple solutions. To this end and in order to reduce the space of admissible solutions, the work proposed in this thesis aims to inform NMF, thus placing our work in between regression and classic blind factorization. In addition, some cost functions called parametric $\alpha\beta$ -divergences are used, so that the resulting NMF methods are robust to outliers in the data.

Three types of constraints are introduced on the matrix F , *i.e.*, (i) the *exact* or *bounded* knowledge on some components, and (ii) the sum to 1 of each line of F . Update rules are proposed so that all these constraints are taken into account by mixing multiplicative methods with projection. Moreover, we propose to constrain the structure of the matrix G by the use of a physical model, in order to discern sources which are influent at the receiver.

The considered application—consisting of source identification of particulate matter in the air around an industrial area on the French northern coast—showed the interest of the proposed methods. Through a series of experiments on both synthetic and real data, we show the contribution of different informations to make the factorization results more consistent in terms of physical interpretation and less dependent of the initialization.

Keywords: Informed source separation, Non-negative Matrix Factorization, expert constraints, $\alpha\beta$ -divergence, air particulate matter identification

