
Estimation de l'arrière-plan de spectres par différentes méthodes dérivées des moindres carrés

Vincent Mazet*, Jérôme Idier**, David Brie*, Bernard Humbert***, Cédric Carteret***

* CRAN, CNRS UMR 7039, Université Henri Poincaré, BP 239, 54506 Vandoeuvre-lès-Nancy Cedex, France. vincent.mazet@cran.uhp-nancy.fr.

** IRCCyN, CNRS UMR 6597, École Centrale de Nantes, 1 rue de la Noë, BP 92101, 44321 Nantes Cedex 3.

*** LCPME, CNRS UMR 7564, Université Henri Poincaré, 405 rue de Vandoeuvre, 54600 Villers-lès-Nancy.

RÉSUMÉ. Cet article présente des méthodes d'estimation de l'arrière-plan — appelé fond par les spectroscopistes — d'un spectre (diffusion inélastique Raman, absorption infrarouge, etc). Comme l'estimateur des moindres carrés ne restitue pas correctement l'arrière-plan, on propose d'autres méthodes dérivées de cet estimateur. Les moindres carrés repondérés minimisent une fonction coût non quadratique (par exemple la fonction hyperbolique, la fonction de Cauchy ou une parabole tronquée) pour ne pas être trop influencé par les pics. Les moindres carrés tamisés donnent une estimation des moindres carrés calculée sur un sous-ensemble de points, en l'occurrence les points que l'on considère appartenir à l'arrière-plan, ce qui permet de ne pas du tout prendre en compte les pics. Les performances de ces différentes méthodes sont comparées sur des signaux simulés.

MOTS-CLÉS : spectroscopie, estimation de l'arrière-plan, moindres carrés, moindres carrés repondérés, moindres carrés tamisés.

1. Introduction

L'existence d'un arrière-plan dans les spectres (tels que des spectres de diffusion inélastique Raman, ou absorption infrarouge, ...) peut être gênante pour leur interprétation. Cet article propose plusieurs méthodes permettant d'estimer l'arrière-plan sous la forme d'un polynôme d'ordre réduit par rapport au nombre de points. La soustraction de l'arrière-plan au spectre permet d'obtenir un signal plus facilement interprétable.

Les spectres peuvent être modélisés par une somme de motifs (gaussiens, lorentziens, ...) de position, largeur et amplitude différentes, à laquelle se superpose un arrière-plan (par exemple, dans le cas d'un spectre Raman, des signaux de la diffusion Rayleigh ou des phénomènes de fluorescence), noté par le vecteur f . Un bruit supposé gaussien et additif permet de prendre en compte les erreurs de mesures et les imprécisions du modèle. Les données mesurées sont notées $y = f + b$ ou b représente la somme des motifs plus le bruit : b est ici considéré comme des perturbations. L'arrière-plan est modélisé par un polynôme d'ordre p , de coefficients $a = (a_0 \dots a_p)^T$, et est calculé sur le vecteur $t = (t_1 \dots t_N)^T$, N étant le nombre de points du signal. Ainsi,

$$f = Ta \quad \text{avec} \quad T = \begin{pmatrix} 1 & \dots & t_1^p \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \dots & t_N^p \end{pmatrix}.$$

Certains auteurs ont proposés d'autres méthodes, comme le filtrage non-linéaire [KNE 96], ou l'estimation de l'arrière-plan sous forme de splines cubiques via l'approche bayésienne [FIS 00] [LIN 99] [RAZ 03].

2. Estimation des moindres carrés (MC)

La méthode des MC est très simple mais ne donne pas de résultats exploitables, puisqu'elle est construite pour minimiser l'erreur quadratique entre tous les points, y compris ceux correspondant à des pics. Elle est présentée ici car elle sert de base aux méthodes suivantes. L'estimateur des MC minimise donc le critère :

$$J(a) = \|y - Ta\|^2 = (y - Ta)^T (y - Ta),$$

d'où l'estimation : $\hat{f} = T\hat{a}$ avec $\hat{a} = (T^T T)^{-1} T^T y$.

3. Estimation des moindres carrés repondérés (MCR)

Les MCR minimisent une fonction coût qui n'est pas quadratique comme les MC. Nous proposons trois fonctions similaires à une parabole au voisinage de zéro mais croissant moins vite vers l'infini afin de donner un coût moindre aux points éloignés de l'arrière-plan :

- La fonction hyperbolique : $g(x) = 2(\sqrt{s^2 + x^2} - s)$;
- La fonction de Cauchy : $g(x) = \ln(s^2 + x^2) - \ln(s^2)$;
- La parabole tronquée : $g(x) = x^2$ si $|x| < s$, $g(x) = s^2$ sinon.

Le critère à minimiser est donc :

$$J(a) = \sum_i g(y(i) - (Ta)_i)$$

où $(Ta)_i$ représente le $i^{\text{ème}}$ élément du vecteur Ta . Cependant, leur minimisation n'est pas aussi immédiate que la méthode des MC. Le cas des fonctions hyperbolique et de Cauchy et celui de la parabole tronquée sont traités séparément.

3.1. Cas des fonctions hyperbolique et de Cauchy

Nous proposons d'utiliser la régularisation semi-quadratique [IDI 01]. Ainsi, une variable auxiliaire $d = (d_1, \dots, d_N)^T$ est introduite pour rendre la minimisation du critère J plus facile. On obtient alors un critère du type Geman & Reynolds [GEM 92], qui a le même minimum global que J . Les fonctions hyperbolique et de Cauchy vérifiant certaines conditions [IDI 01], on peut utiliser l'algorithme itératif ARTUR [CHA 97] pour minimiser J ; c'est une méthode itérative qui consiste à estimer alternativement a et d selon :

$$\hat{a} = (T^T \hat{D} T)^{-1} T^T \hat{D} y,$$

$$\hat{d}_k = g'(\varepsilon_k) / 2\varepsilon_k,$$

où $\varepsilon_k = y(k) - (T\hat{a})_k$, et $\hat{D} = \text{diag}(\hat{d})$. La convergence est atteinte lorsque le gradient du critère devient inférieur à un certain seuil.

3.2. Cas de la parabole tronquée

Comme la parabole tronquée ne vérifie pas la condition sur la concavité nécessaire à l'utilisation d'ARTUR, nous proposons d'utiliser l'algorithme de non-conconvexité graduée (GNC : *graduated non convexity* [BLA 87]) couplé à ARTUR. C'est un algorithme de relaxation déterministe qui ne garantit pas la convergence vers le minimum global, cependant, dans la majorité des applications pratiques, il fournit des solutions proches de l'optimum. Cet algorithme approche la fonction g par une suite de fonction g_c , telles que :

- pour $c = 0$, g_0 est convexe et une première estimation \hat{a}_0 est calculée ;
- pour $c = 1$, $g_1 = g$;
- pour $c \in]0, 1[$, une estimation \hat{a}_c est calculée en minimisant localement g_c dans le voisinage de l'estimation précédente \hat{a}_{c-1} . Comme dans le voisinage de \hat{a}_{c-1} la fonction g_c vérifie les conditions permettant l'utilisation d'ARTUR, cet algorithme est utilisé pour la minimisation.

Nous proposons la famille suivante de fonctions g_c :

$$g_c(x) = \begin{cases} x^2 & \text{si } |x| < s \\ 2(1-c)(s|x| - s^2) + s^2 & \text{sinon} \end{cases}$$

4. Estimation des moindres carrés tamisés (MCT)

La méthode des MCT est une méthode itérative qui, à partir d'un sous-ensemble H de h points ($\frac{1}{2}(N + p + 1) \leq h \leq N$), calcule une approximation de l'arrière-plan par MC, puis redéfinit H pour éliminer les points trop éloignés de l'arrière-plan. h correspond en fait au nombre de points du signal appartenant à l'arrière-plan ; dans notre cas, on choisit $h = (N + p + 1) / 2$, car on considère qu'il y a au moins $(N + p + 1) / 2$ points qui ne sont que de l'arrière-plan dans le spectre. Les MCT peuvent s'apparenter à des MCR où la fonction coût serait une parabole pour les points appartenant à H et une fonction constante pour les autres points. La différence principale entre les deux approches est la façon dont sont déterminés les points appartenant à H .

Deux algorithmes de MCT sont présentés : l'algorithme FAST-LTS [ROU 91] [ROU 99], et une nouvelle méthode, plus simple et plus rapide pour notre application.

4.1. Algorithme FAST-LTS [ROU 91] [ROU 99]

L'une des clés de cet algorithme est le calcul d'une meilleure estimation au sens d'un critère Q à partir d'une estimation précédente. Q est fonction des résidus $r(i) = y(i) - \hat{f}(i)$:

$$Q = \sum_{i \in H} r(i)^2 .$$

Cette étape, appelée *C-step*, propose un nouveau sous-ensemble H_2 donnant une meilleure estimation que le sous-ensemble initial H_1 . Cette étape de concentration fonctionne de la manière suivante :

- Calculer les MC sur le sous-ensemble initial H_1 ,
- Calculer les résidus $r = y - \hat{f}$,
- Définir le sous-ensemble H_2 comme l'ensemble des h points de plus faibles résidus.

L'algorithme FAST-LTS crée à l'initialisation un grand nombre de sous-ensembles H pour lesquels deux *C-steps* sont effectués. Parmi les résultats obtenus, les dix meilleurs sont sélectionnés (c'est à dire ceux de plus faible critère Q), puis, pour ces résultats, des *C-steps* sont effectués jusqu'à convergence. Le meilleur résultat est ensuite sélectionné.

4.2. Un autre algorithme de MCT

Ce nouvel algorithme est plus rapide que FAST-LTS car plus adapté au problème. H est d'abord initialisé à l'ensemble des points tout entier ($h = N$). À chaque itération, l'estimateur des MC est calculé sur H , qui est ensuite redéfini comme l'ensemble des $h - 1$ points les plus proches de l'estimation (c'est à dire ceux de plus faibles résidus), puis $h = h - 1$, jusqu'à $h = (N + p + 1) / 2$. Cette méthode a l'avantage d'être extrêmement rapide, puisqu'elle ne nécessite que $(N - p - 1) / 2$ calculs de MC.

5. Comparaison entre les méthodes

Pour comparer les méthodes, nous avons simulé un spectre (figure 1) sur lequel ont été testées les méthodes.

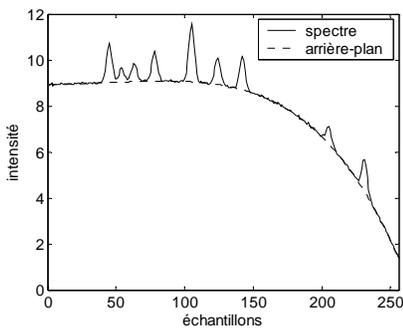


Figure 1 : spectre et arrière-plan.

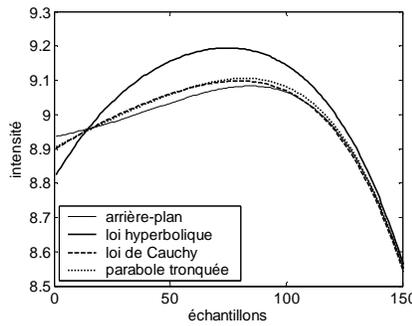


Figure 2 : MCR (zoom).

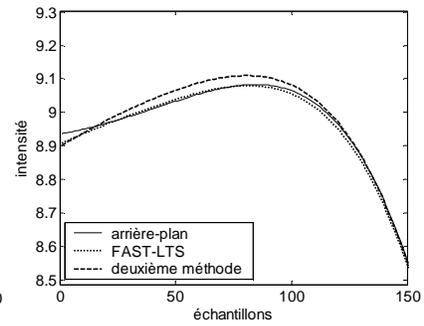


Figure 3 : MCT (zoom).

L'estimation des MC n'est pas représentée ici car elle donne un résultat inexploitable. Par contre, les méthodes par MCR (figure 2) estiment correctement l'arrière-plan, mais ce sont les deux méthodes de MCT (figure 3) qui donnent généralement les meilleurs résultats. Les statistiques suivantes ont été obtenues à partir de 20 spectres simulés de 256 échantillons. Elles confirment la supériorité des MCT. D'un point de vue du temps de calcul, les MCR avec les lois hyperbolique et de Cauchy sont très rapides, de même que la deuxième méthode des MCT. Par contre, l'algorithme FAST-LTS est la méthode la plus complexe et la plus lente.

	MCR (hyper.)	MCR (Cauchy)	MCR (P.T.)	MCT1 (FAST-LTS)	MCT 2
$EQM = \ f - \hat{f}\ ^2$	0.580	0.209	0.232	0.191	0.185
Temps moyen (s)	0.24	0.33	0.57	2.47	0.80

6. Conclusion

Nous avons présenté dans cet article différentes méthodes pour estimer l'arrière-plan d'un spectre. Certaines de ces méthodes donnent des résultats satisfaisants, et pour certaines, avec une simplicité et une vitesse très appréciables. Les travaux futurs s'intéresseront à l'estimation par splines cubiques par approche bayésienne [LIN 99] [RAZ 03]. Ces algorithmes pourront enfin être couplés avec une méthode de déconvolution pour obtenir un spectre de raies. Enfin, la prise en compte de la positivité des pics par l'intermédiaire d'un critère asymétrique donne des résultats très encourageants [MAZ 03].

Remerciements : Ce travail est soutenu par la région Lorraine, ainsi que le CNRS.

Bibliographie

- [BLA 87] BLAKE A., ZISSERMAN A., " Visual Reconstruction ", MIT Press, 1987.
- [CHA 97] CHARBONNIER P., BLANC-FÉRAUD L., AUBERT G., BARLAUD M., " Deterministic Edge-Preserving Regularization in Computed Imaging ", *IEEE Transaction on Image Processing*, 1997, vol. 6, n°2.
- [FIS 00] FISCHER R., HANSON K.M., DOSE V., VON DER LINDEN W., " Background estimation in experimental spectra ", *Physical Review E*, 2000, vol.61, p.1152-1161.
- [GEM 92] GEMAN D., REYNOLDS G., " Constrained restoration and the recovery of discontinuities ", *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1992, vol.14, n°3, p.367-383.
- [IDI 01] IDIER J., " Convex Half-Quadratic Criteria and Interacting Auxiliary Variables for Image Restoration ", *IEEE Transaction on Image Processing*, 2001, vol.10, n°7.
- [KNE 96] KNEEN M.A., ANNAGARN H.J., " Algorithm for fitting XRF, SEM and PIXE X-ray spectra backgrounds ", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 1996, vol.109/110, p.209-213.
- [LIN 99] VON DER LINDEN W., DOSE V., PADAYACHEE J., PROZESKY V., " Signal and background separation ", *Physical Review E*, 1999, vol.59, n°6.
- [MAZ 03] MAZET V., BRIE D., IDIER J., " Background spectrum estimation using half-quadratic minimization ", soumis à IEEE ICCASP 2004.
- [RAZ 03] GULAM RAZUL S., FITZGERALD W.J., ANDRIEU C., " Bayesian model selection and parameter estimation of nuclear emission spectra using RJMCMC ", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2003, vol.497, p.492-510.
- [ROU 91] ROUSSEEUW P.J., BASSETT JR. G.W., " Robustness of the p -subset algorithm for regression with high breakdown point ", *Directions in Robust Statistics and Diagnostics*, Springer-Verlag, 1991, vol.2, p.185-194.
- [ROU 99] ROUSSEEUW P.J., VAN DRIESSEN K., *Computing LTS Regression for Large Data Sets*, rapport technique de l'université d'Anvers, Belgique, 1999.