

# Détection conjointe de discontinuités d'ordres différents dans un signal par minimisation de critère $L2-L0$

Junbo DUAN<sup>1</sup>, Charles SOUSSEN<sup>1</sup>, David BRIE<sup>1</sup>, Jérôme IDIER<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centre de Recherche en Automatique de Nancy (CRAN, UMR 7039, Nancy-Université, CNRS)  
Boulevard des Aiguillettes, B.P. 70239, 54506 Vandœuvre-lès-Nancy Cedex.  
Tél. : 03 83 68 44 95/71/74 — Fax : 03 83 68 44 62

<sup>2</sup>Institut de Recherche en Communication et Cybernétique de Nantes (IRCCyN, UMR CNRS 6597)  
1 rue de la Noë, B.P. 92101, 44321 Nantes Cedex 3.  
Tél. : 02 40 37 69 09 — Fax : 02 40 37 69 30

Junbo.Duan@cran.uhp-nancy.fr, Charles.Soussen@cran.uhp-nancy.fr,  
David.Brie@cran.uhp-nancy.fr, Jerome.Idier@irccyn.ec-nantes.fr

**Résumé** – Le problème traité est la détection conjointe des discontinuités à différents ordres dans un signal et son approximation par un signal polynômial par morceaux. Il est formulé comme un problème d'optimisation discrète qui repose sur la détection des points de discontinuité, à savoir la minimisation d'un critère des moindres carrés sous une contrainte de type  $L0$ . Nos contributions sont triples: le choix d'un dictionnaire adapté à la détection conjointe de discontinuités, un nouvel algorithme traitant de la minimisation d'un critère des moindres carrés sous une contrainte de type  $L0$ , et l'application de la méthode à des signaux réels (courbes de force) mesurés par un microscope de force atomique.

**Abstract** – We address the joint detection of discontinuities at several orders in a given signal, leading to an approximation of the signal by a piecewise polynomial signal. The problem is stated as a discrete optimization problem, relying on the detection of the points of discontinuity: minimization of a least-squares criterion under an  $L0$  constraint. Our contribution is threefold: the choice of a « dictionary » that is appropriate to the joint detection of the discontinuities, a new algorithm dedicated to the minimization of an  $L0$ -constrained least-squares cost function, and the application of the method to real signals (force curves) acquired in atomic force microscopy.

## 1 Introduction

Le problème posé est celui de l'approximation d'un signal par un signal polynômial par morceaux. Dans ce type de problème, la principale difficulté est de déterminer les points de discontinuité. En effet, dès lors qu'ils sont connus, l'approximation peut se faire de façon efficace sur chacun des intervalles. Ce travail s'apparente à une approche de type lissage par splines polynômiales [1] dans laquelle les points de contrôle ne seraient pas choisis arbitrairement mais de façon automatique. Il s'apparente également à la reconstruction d'un signal polynômial par morceaux à partir de données échantillonnées [2]. A la différence de l'approche présentée dans [2], notre approche prend en compte explicitement la présence de bruit et fournit une estimation du chemin de régularisation. Elle repose sur la minimisation d'un critère mixte composé d'un terme d'adéquation aux données quadratique et d'un terme de régularisation permettant la détection conjointe des discontinuités d'ordres 0 et/ou 1, 2, ...,  $P - 1$ , où une discontinuité d'ordre  $p$  est définie comme un saut dans la dérivée  $p$ -ième du signal. Un grand nombre de travaux se sont intéressés à la détection des discontinuités d'ordre fixe, en particulier d'ordre 0 [3, 4]. La détection conjointe de discontinuités d'ordres différents est en re-

vanche moins fréquemment abordée. Le *fused lasso* [5] permet la restauration d'un signal parcimonieux et dont la dérivée première est parcimonieuse en introduisant, outre un terme de régularisation  $L1$  portant sur le signal à restaurer, une régularisation  $L1$  portant sur sa dérivée. Il est également envisageable de s'inspirer de l'idée de [6] en modélisant le signal à reconstruire comme la superposition de signaux lisses par morceaux à des ordres différents. Cependant, ces approches imposent le choix de plusieurs paramètres de régularisation.

L'approche envisagée consiste à poser le problème en terme de sélection de variables choisies dans un dictionnaire incluant les structures recherchées [7]. Cette idée a déjà été développée pour la détection des discontinuités d'ordre fixe, mais ici, nous proposons de l'étendre au cas de la détection conjointe de discontinuités d'ordres 0 et/ou 1, 2, ...

## 2 Détection conjointe de discontinuités formulée comme un problème $L2-L0$

Nous posons le problème de la détection conjointe des discontinuités d'ordres  $p = 0, 1, \dots, P - 1$  dans un signal comme un problème de sélection de variables, où une variable est as-

sociée à une discontinuité (position et amplitude). Nous optons pour une approche de type optimisation de critère mixte  $L2-L0$ , car il s'agit d'approcher au mieux un signal donné par un signal lisse par morceaux sous la contrainte que le nombre de discontinuités (ou de morceaux) soit limité.

**Construction du dictionnaire.** Le dictionnaire est construit de façon à ce que tous les types de discontinuités recherchés puissent être présents à un instant donné. Ainsi, pour les discontinuités d'ordre  $p$ , nous considérons la matrice  $\mathbf{A}_p$  dont les colonnes résultent de l'échantillonnage sur une grille régulière d'un signal polynômial d'ordre  $p$ , en envisageant tous les points de discontinuité possibles :

$$\mathbf{A}_p = \begin{bmatrix} 1^p & 0 & \dots & 0 \\ 2^p & 1^p & & \vdots \\ 3^p & 2^p & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & 1^p \\ n^p & (n-1)^p & \dots & 2^p \end{bmatrix}.$$

Le dictionnaire permettant la détection conjointe des discontinuités d'ordres  $p = 0, 1, \dots, P-1$  est alors obtenu en concaténant l'ensemble des dictionnaires :

$$\mathbf{A} = [\mathbf{A}_0 | \mathbf{A}_1 | \dots | \mathbf{A}_{P-1}].$$

Dans les deux paragraphes suivants, nous proposons deux formulations de l'approximation d'un signal  $\mathbf{y}$  par le biais du dictionnaire  $\mathbf{A}$ , vue comme un problème de sélection de variables.

**Sélection de variables scalaires.** Le dictionnaire étant choisi, la sélection de variables dans le dictionnaire est formulée comme la minimisation d'une fonction de coût quadratique sous la contrainte que le nombre de variables sélectionnées soit limité :

$$\min_{\|\mathbf{x}\|_0 \leq k} \{\mathcal{E}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2\}, \quad (1)$$

où  $\mathbf{x}$  représente l'amplitude des discontinuités et  $\|\mathbf{x}\|_0$  est le coût  $L0$  de  $\mathbf{x}$ , défini comme le nombre d'éléments non nuls de  $\mathbf{x}$ , c'est-à-dire le nombre total de discontinuités. L'entier  $k$  contrôle le nombre maximal de discontinuités.

Compte tenu de la forme binaire du coût  $L0$ , le problème (1) est un problème d'optimisation combinatoire. Sa solution optimale ne peut souvent être obtenue qu'en effectuant une recherche exhaustive dont le coût de calcul est exponentiel par rapport à la taille du signal  $\mathbf{x}$  [8]. En revanche, dès lors que l'on dispose de la position des discontinuités, le problème se réduit à un problème de moindres carrés :

$$\min_{\sigma(\mathbf{x}) \subseteq \mathcal{D}} \mathcal{E}(\mathbf{x}),$$

où  $\sigma(\mathbf{x})$  représente le support de  $\mathbf{x}$  et  $\mathcal{D}$  est « l'ensemble des variables actives » dans lequel les discontinuités doivent forcément se trouver.

**Sélection de variables vectorielles.** Dans l'approche précédente, le terme  $\|\mathbf{x}\|_0$  compte le nombre de discontinuités pour chaque ordre et pour chaque position. La détection de discontinuités à des ordres différents et pour une même position (par exemple, un saut et un changement de dérivée dans le signal au même moment) nécessite plusieurs variables, puisqu'il faut sélectionner plusieurs colonnes de la matrice  $\mathbf{A}$ . Lorsque l'on désire reconstruire un signal polynômial par morceaux avec un nombre minimal de morceaux, il est avantageux d'autoriser l'apparition de discontinuités à tous les ordres  $p = 0, 1, \dots, P-1$  en une même position, en comptant 1 (soit une position de discontinuité) au lieu de  $P$  ( $P$  variables). Ainsi, une discontinuité en une position  $i$  est associée à une « variable vectorielle »  $\mathbf{x}_i$ , qui regroupe les amplitudes des  $P$  discontinuités relatives à la position  $i$ , pour un coût unitaire.

Pour formuler mathématiquement la sélection de variables vectorielles, on réordonne le vecteur  $\mathbf{x}$  comme la concaténation des vecteurs  $\mathbf{x}_i$  de taille  $P$  :  $\mathbf{x}^t = [\mathbf{x}_1^t, \dots, \mathbf{x}_n^t]$ . Le décompte du nombre de positions  $i$  sélectionnées s'écrit

$$\delta_P(\mathbf{x}) \triangleq \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_P(\mathbf{x}_i),$$

où  $\mathbb{1}_P(\mathbf{x}_i)$  vaut 1 si  $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{0}$ , et 0 sinon. La sélection de variables vectorielles se réduit au problème d'optimisation :

$$\min_{\delta_P(\mathbf{x}) \leq k} \{\mathcal{E}(\mathbf{x})\}, \quad (2)$$

où  $k$  contrôle le nombre maximal de points de discontinuité autorisés. Il s'agit d'autoriser la sélection d'au plus  $k$  variables vectorielles, soit  $kP$  variables scalaires.

### 3 Algorithme d'optimisation

Nous commençons par décrire l'algorithme employé pour optimiser le critère (1). Puis, nous l'adapterons aisément au problème (2). L'entier  $k$  désigne, suivant les cas, le nombre de variables scalaires ou vectorielles choisies.

**Sélection de variables scalaires.** L'algorithme employé a été proposé très récemment [9] et permet de fournir une estimation du chemin de régularisation, *i.e.*, de l'ensemble  $\hat{\mathbf{x}}_k$  des solutions correspondant aux valeurs possibles de  $k$ . Nous rappelons ici brièvement son principe : plutôt que de partir de la forme contrainte (1), nous utilisons la forme pénalisée :

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathcal{J}(\mathbf{x}; \lambda) = \mathcal{E}(\mathbf{x}) + \lambda \|\mathbf{x}\|_0\}, \quad (3)$$

qui, contrairement à la forme contrainte, permet d'envisager non seulement l'ajout mais aussi le retrait de variables actives. L'hyperparamètre  $\lambda$  étant fixé, le problème (3) est résolu de façon heuristique (dans le sens où la convergence vers la solution optimale n'est pas garantie) par l'algorithme *Single Best Replacement* (SBR) inspiré de l'algorithme *Single Most Likely Replacement* (SMLR), initialement proposé pour résoudre des problèmes de déconvolution de signaux impulsionnels [9].

SBR est un algorithme de descente déterministe, qui consiste, à partir d'une solution initiale, à faire décroître le plus possible le critère  $\mathcal{J}(\mathbf{x}; \lambda)$  en ajoutant ou retirant une seule variable à la fois dans le support  $\mathcal{D}$ . L'algorithme *Continuation SBR* (CSBR) est une version étendue de SBR, qui permet d'estimer le chemin de régularisation du problème pénalisé (pour tout  $\lambda \geq 0$ ) mais également, au prix d'une modification mineure, celui du problème contraint (pour tout  $k$ ). Son principal intérêt est que le chemin de régularisation est estimé en calculant les solutions SBR pour un nombre fini de valeurs de  $\lambda$  [9].

**Sélection de variables vectorielles.** L'algorithme utilisé pour optimiser (2) est une simple adaptation de l'algorithme SBR. La forme pénalisée du problème (2) prend la forme :

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathcal{E}(\mathbf{x}) + \lambda \delta_P(\mathbf{x})\}. \quad (4)$$

A chaque itération, il s'agit toujours de tester chaque ajout et chaque retrait d'une variable (vectorielle), c'est-à-dire l'ajout de discontinuités en une position  $i$  ( $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{0}$ ) ou, si la position  $i$  est active, le retrait des discontinuités présentes ( $\mathbf{x}_i = \mathbf{0}$ ). De même, l'algorithme de continuation CSBR s'adapte sans problème à la sélection de variables vectorielles.

**Choix du degré de parcimonie.** Le choix du degré de parcimonie  $k$  n'est pas un problème simple. L'avantage de l'approche par continuation (CSBR) est que l'utilisateur ne prend pas nécessairement de décision *a priori* quant au choix de  $k$  mais peut arrêter l'algorithme lorsqu'il décide que les principales discontinuités ont été trouvées ou que l'approximation des données  $\mathbf{y}$  par  $\mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}_k$  devient suffisamment bonne. C'est le choix que nous faisons ci-dessous.

## 4 Segmentation de courbes de force

**Courbes de force.** Nous appliquons l'algorithme de détection de discontinuités à la segmentation de courbes de force mesurées en microscopie de force atomique (AFM) [10], qui permettent de caractériser les propriétés physico-chimiques de nano-matériaux. Une courbe représente la force d'interaction  $y(z)$  entre deux nano-objets en fonction de leur distance relative  $z$ . La détection des discontinuités et leurs amplitudes  $x(z)$  sont directement liées à des propriétés physiques telles que la topographie des nano-objets, leurs coefficients de déformation élastique et/ou inélastique, leur énergie d'adhésion, *etc.* [10].

La courbe de force expérimentale présentée dans la figure 1 est relative à une bactérie en interaction avec une pointe nanométrique. Cette courbe est dite de retrait, au sens où au début de l'expérience (grandes valeurs de  $z$ ), la pointe et la bactérie sont en contact, et au fur et à mesure que l'on écarte la pointe de la bactérie (diminution de  $z$ ), on observe une poursuite du contact (partie linéaire à droite de la courbe), puis des sauts du signal qui indiquent que la pointe perd contact de façon similaire au détachement d'une bande auto-agrippante velcro, avec les protéines adhésives recouvrant le corps de la bactérie, jusqu'à une

perte totale du contact (force nulle sur la partie gauche de la courbe). Les positions pour lesquelles ces sauts se produisent, et les valeurs des sauts et des changements de pente sont des informations que l'on peut directement relier à la structure de la protéine recouvrant la bactérie, d'où l'intérêt de les estimer le plus précisément possible.

**Approximations polynômiales par morceaux.** Nous traitons les données par les deux approches scalaire et vectorielle. Dans les deux cas, nous recherchons simultanément les discontinuités d'ordre 0, 1 et 2 dans le signal, ce qui revient à l'approcher par un polynôme de degré 2 par morceaux. Le degré de parcimonie  $k$  est réglé de telle sorte que le résidu  $\|\mathbf{y} - \mathbf{A}\hat{\mathbf{x}}_k\|^2$  de l'approximation des données avec  $k$  variables soit inférieur à un seuil  $S$  fixé. La valeur du seuil est réglée empiriquement en fonction de la variance du bruit, elle-même estimée à partir des mesures obtenues pour les plus faibles valeurs de  $z$  (force nulle, mesures constituées de bruit uniquement). La valeur de  $k$  trouvée est d'autant plus importante que le seuil  $S$  est faible.

L'approche par sélection de variables scalaires a tendance à détecter un grand nombre de discontinuités à des positions différentes plutôt que des discontinuités à plusieurs ordres et à des positions identiques (voir les figures 1 (b,c)). En microscopie AFM, on s'attend à trouver des discontinuités aux mêmes positions de part les modèles physiques disponibles. Sur les données de la figure 1, le signal présente à la fois un saut et un changement de pente aux positions  $z = 260$  nm et  $z = 320$  nm, par exemple. Or, l'algorithme détecte des discontinuités à d'autres positions proches plutôt que de des discontinuités à plusieurs ordres en ces mêmes positions.

L'approche vectorielle conduit à seulement 4, 7 et 14 points de discontinuité suivant le seuil choisi. Les intervalles définis par les points de discontinuité sont davantage significatifs des changements de comportement de l'interaction pointe-bactérie. Ces résultats sont un premier pas prometteur vers une interprétation automatique des courbes de force expérimentales.

## 5 Conclusions

L'approche présentée permet de détecter simultanément les discontinuités à différents ordres dans un signal. Formulée comme un problème de sélection de variables, cette approche mène à l'optimisation de critères de type  $L2-L0$ . Dans ce but, nous avons développé un algorithme de continuation permettant une estimation (sous-optimale) d'un ensemble de solutions à différents niveaux de parcimonie. Si l'on désire faire un choix automatique pour l'ordre du modèle, l'estimation d'un chemin de régularisation approché rend possible la mise en œuvre, à moindre coût de calcul, de méthodes comme la courbe en L et l'optimisation de critères de sélection d'ordre comme le critère d'Akaike ou le critère *Minimum Description Length* (MDL).

Comme il est parfois souhaitable de favoriser l'apparition de discontinuités à plusieurs ordres en la même position, nous avons développé une variante vectorielle dans laquelle on au-

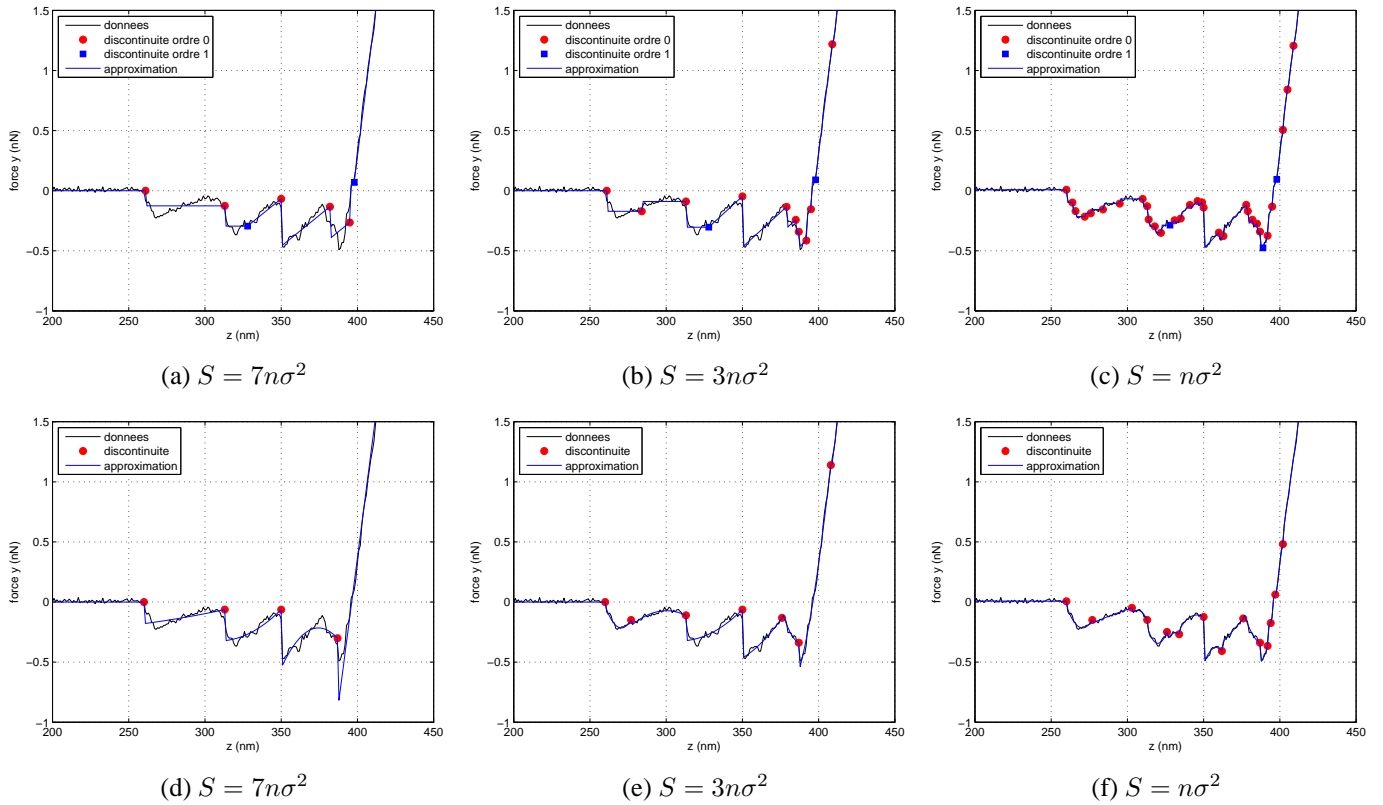


FIG. 1 – Traitement d’une courbe de force : estimation des discontinuités d’ordre 0, 1 et 2. La courbe mesurée  $y(z)$  est affichée en noir, et son approximation en bleu. Les valeurs négatives (positives) représentent des forces d’attraction (répulsion). (a-c) Approximations de la courbe de force par sélection de variables scalaires, obtenues avec différentes valeurs de seuil sur le résidu de l’approximation. Ces valeurs sont fixées à  $7n\sigma^2$ ,  $3n\sigma^2$ , et  $n\sigma^2$ , respectivement, où  $n$  désigne le nombre d’échantillons dans le signal mesuré, et  $\sigma^2$  est une estimation empirique de la variance du bruit. On représente par une couleur différente les discontinuités aux ordres 0 et 1. Aucune discontinuité à l’ordre 2 n’est trouvée. (d-f) Approximations de la courbe de force par sélection de variables vectorielles, avec les trois mêmes valeurs du seuil  $S$ . Les positions des discontinuités sont représentées d’une seule couleur, car des discontinuités à tous les ordres sont présentes simultanément.

torise des discontinuités à tous les ordres possibles et à une position donnée pour un coût unitaire. Nous avons montré la pertinence de cette approche pour le traitement des courbes de force, au sens où il est possible d’approcher finement les données avec un plus faible nombre de points de discontinuité.

## Références

- [1] P. Dierckx, *Curve and Surface Fitting with Splines*, Monographs on Numerical Analysis. Oxford University Press, Inc., New York, NY, USA, 2ème édition, mai 1995.
- [2] M. Vetterli, P. Marziliano et T. Blu, « Sampling signals with finite rate of innovation », *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 50, n°6, pp. 1417–1428, juin 2002.
- [3] A. Blake et A. Zisserman, *Visual Reconstruction*, The MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1987.
- [4] J. Idier et L. Blanc-Féraud, « Déconvolution en imagerie », in *Approche bayésienne pour les problèmes inverses*, J. Idier, Ed., Paris, nov. 2001, pp. 139–165, Traité IC2, Série traitement du signal et de l’image, Hermès.
- [5] R. Tibshirani, M. Saunders, S. Rosset, J. Zhu et K. Knight, « Sparsity and smoothness via the fused lasso », *J. R. Statist. Soc. B*, vol. 67, n°1, pp. 91–108, fév. 2005.
- [6] P. Ciuciu, J. Idier et J.-F. Giovannelli, « Regularized estimation of mixed spectra using a circular Gibbs-Markov model », *IEEE Trans. Signal Processing*, vol. 49, n°10, pp. 2201–2213, oct. 2001.
- [7] A. J. Miller, *Subset Selection in Regression*, Chapman and Hall, Londres, UK, 2ème édition, avr. 2002.
- [8] G. Davis, S. Mallat et M. Avellaneda, « Adaptive greedy approximations », *Constructive Approximation*, vol. 13, n°1, pp. 57–98, mars 1997.
- [9] J. Duan, C. Soussen, D. Brie et J. Idier, « A continuation approach to estimate a solution path of mixed L2-L0 minimization problems », in *Signal Processing with Adaptive Sparse Structured Representations (SPARS workshop)*, Saint-Malo, avr. 2009, pp. 1–6.
- [10] F. Gaboriaud et Y. F. Dufrène, « Atomic force microscopy of microbial cells : application to nanomechanical properties, surface forces and molecular recognition forces », *Colloids and Surfaces B : Biointerfaces*, vol. 54, pp. 10–19, 2007.