

# Analyse de mélanges : problèmes 2D et nD

David BRIE

Centre de Recherche en Automatique, Université nancy 1  
david.brie@cran.uhp-nancy.fr

## Résumé

L'analyse de mélange est un problème important en chimiométrie car elle permet de fournir une représentation efficace et physiquement interprétable de données spectroscopiques multidimensionnelles. Dans un premier temps, on considère le cas des mélanges bilinéaires et on montre le caractère mal-posé du cas bilinéaire positif ainsi que différentes approches permettant de régulariser le problème. Différents exemples de traitements de données spectroscopiques (analyse de l'hydratation d'une silice par spectroscopie PIR, spectroscopie Raman polarisée d'un cristal de rutile) sont présentés à titre d'illustration. On montre également comment ce problème peut s'étendre à l'analyse d'images hyperspectrales. Pour ce type de données, la principale difficulté est d'ordre algorithmique et résulte du nombre important de données à traiter. Une approche permettant de réduire la dimension du problème en procédant à une sélection des pixels pertinents est présentée et appliquée à l'analyse d'images de bactéries par microscopie confocale de fluorescence. Dans un second temps, on s'intéresse au cas des mélanges multilinéaires. Le modèle PARAFAC est particulièrement intéressant car il est identifiable sous des conditions relativement peu contraignantes mais, en revanche, il impose que les données satisfassent des contraintes structurelles fortes. Quelques résultats récents relatifs à l'identifiabilité de ce type de modèles sont présentés ainsi que quelques problèmes ouverts liés à la possibilité d'effectuer une décomposition PARAFAC récursive sur l'ordre. Un exemple d'analyse de données 4D par PARAFAC concerne l'étude de la réponse de bactéries à un facteur environnemental par spectroscopie de fluorescence.