

DODACI 1 i 2

**OPISNOM IZVJEŠTAJU ZA PRVU GODINU PROJEKTA
9.01/232**

**"ANALIZA NELINEARNIH KOMPONENATA S
PRIMJENAMA U KEMOMETRIJI I PATOLOGIJI"**

Dr. sc. Ivica Kopriva

Dr. sc. Marko Filipović

20. 11. 2013.

SADRŽAJ

Popis prikmeta i simbola

Popis slika

Popis tablica

Uvod

Dodatak 1: Linearan pododređeni problem slijepog razdvajanja signala (SRS)

1.1. Mjere točnosti procjena matrica **A** i **S**

1.2. Simulacijski scenarij

1.3. Algoritmi za linearan pododređeni problem SRS

*1.3.1. Algoritmi za istovremenu faktorizaciju matrice **X** u matrice **A** i **S***

*1.3.2. Algoritmi za procjenu matrice **A** iz matrice **X***

1.3.3. Algoritmi za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi

1.4. Rezultati usporedne analize sa diskusijom

*1.4.1. Algoritmi za istovremenu faktorizaciju matrice **X** u matrice **A** i **S***

*1.4.2. Algoritmi za procjenu matrice **A** iz matrice **X***

1.4.3. Algoritmi za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi

Dodatak 2: Algoritmi za nelinearan pododređeni problem SRS

2.1 Pregled sa diskusijom algoritama za nelinearan bezmemorijski problem SRS

Literatura

Popis prikmeta i simbola

ANK - analiza nezavisnih komponenata

ARK - analiza rijetkih komponenata

FNM - faktorizacija nenegativnih matrica

LBM - linearni bezmemorijski model

NBM - nelinearan bezmemorijski model

RGB - slika u boji od engleskog *red-green-blue*

SRS - slijepo razdvajanje signala

NSRS - nenegativno slijepo razdvajanje signala

FNM - faktorizacija nenegativnih matrica

HPRJ - Hilbertov prostor s reprodukcijom jezgrom

NMR - nuklearna magnetska rezonancija

algoritmi za simultanu faktorizaciju u rješavanju NSRS problema:

L_q NMF - FNM algoritam minimizacijom najmanjih kvadata regulariziran L_q -normom $0 < q \leq 1$,
ref. 52

NMU - FNM algoritam metodom podaproksimacije, ref. 55

MVEX - FNM algoritam minimizacijom obujma simpleksa, ref. 57

NLCA - FNM preko najmanje koreliranih nenegativnih komponenata, ref. 59

nsNMF - FNM algoritam regulariziran neglatkoćom, ref. 63

NMF_L0 - FNM algoritam minimizacijom najmanjih kvadrata regulariziran L_0 - (pseudo)
normom, ref. 67

algoritmi za procjenu matrice miješanja:

detW - NSRS algoritam maksimizacijom determinante Gramove matrice, ref. 73

Brzi_FNM - brzi rekurzivni algoritam za estimaciju matrice miješanja maksimizacijom
volumena konveksne ljuske (*engl. convex hull*), ref. 74

C_MVES - robustan NSRS algoritam minimizacijom obujma simpleksa, ref. 75

LAM - NSRS lattice associate memory algoritam, ref. 78

NNK - nenegativni najmanji kvadrati

VCA - *engl. vertex component analysis*

algoritmi za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi:

ISL0 - poboljšana glatka aproksimacija L_0 pseudo-norme, ref. 86

MAP - maksimum a posteriorne vjerojatnosti, ref. 56

L_q IT - iterativna metoda tvrdog praga za l_q -regularizni problem najmanjih kvadrata, ref. 104

IRLS - iterativni otežani najmanji kvadrati, ref. 88

nIRLS - neseparabilni iterativni otežani najmanji kvadrati, ref. 90

BG_GAMP - aproksimativan "message passing" algoritam sa Bernoulli_Gauss modelom, ref. 100

GM_GAMP - aproksimativan "message passing" algoritam sa modelom Gaussovih mješavina, ref. 101

SBL - Bayesov algoritam učenja regulariziranog rijetkošću, ref. 99

SL0 - glatka aproksimacija L_0 pseudo-norme, ref. 85

FoBa - "forward-backward" algoritam, ref. 98

Fast_IST - brza iterativna metoda mekog praga, ref. 91

ISD - iterativni algoritam detekcije pozicija nenultih koeficijenata vektora, ref. 102

MP - *engl. matching pursuit*

OMP - ortogonalan MP, ref. 105

algoritmi nelinearni problem SRS

kTDSEP - kernel TDSEP algoritam, ref. 115

kTPRED - kernel temporal predictability algoritam, ref. 117

PNL - postnonlinear mixture algoritam, ref. 124

MISEP - ref. 119

GPNL - statistička linearizacija PNL modela gaussianizacijom, ref. 133/137

Popis slika

Slika 1.4.1.1. Točnost procjene matrice \mathbf{S} , (D1.4), matrice \mathbf{A} , (D1.3) i vrijeme računanja za NMU i NMF_L0 algoritme na problemu NSRS sa $N=100$, $M=250$ i $k=10$. SNR u dB je nezavisna varijabla.

Slika 1.4.1.2. Točnost procjene matrice \mathbf{S} , (D1.4), matrice \mathbf{A} , (D1.3) i vrijeme računanja za NMU i NMF_L0 algoritme na problemu NSRS sa $N=100$, $M=250$ i $k=20$. SNR u dB je nezavisna varijabla.

Slika 1.4.1.3. Točnost procjene matrice \mathbf{S} , (D1.4), matrice \mathbf{A} , (D1.3) i vrijeme računanja za NMU i NMF_L0 algoritme na problemu NSRS sa $N=100$, $M=250$ i $k=30$. SNR u dB je nezavisna varijabla.

Slika 1.4.2.1. Točnost procjene matrice \mathbf{A} , (D1.3) i točnost procjene broja izvornih signala za BrziFNM i LAM algoritme na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$ i $k=10$. SNR u dB je nezavisna varijabla.

Slika 1.4.2.2. Točnost procjene matrice \mathbf{A} , (D1.3) i točnost procjene broja izvornih signala za BrziFNM i LAM algoritme na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$ i $k=30$. SNR u dB je nezavisna varijabla.

Slika 1.4.2.3. Točnost procjene matrice \mathbf{A} , (D1.3) i točnost procjene broja izvornih signala za BrziFNM i LAM algoritme na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$ i $k=50$. SNR u dB je nezavisna varijabla.

Slika 1.4.2.4. Vrijeme računanja BrziFNM i LAM algoritam na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$. Vrijeme računanja je invarijantno u odnosu na k . SNR u dB je nezavisna varijabla.

Slika 1.4.3.1. Točnost procjene vektora \mathbf{s} , (D1.7), i vrijeme računanja za algoritme: SLO [85], ISL0 [86], IRLS [88], Fast_IST [91], SBL [99], BG_GAMP [100], OMP [105]. Problem NSRS: $N=350$, $M=1000$, $T=1000$ i $k=100$. Nema aditivnog šuma.

Slika 1.4.3.2. Točnost procjene vektora \mathbf{s} , (D1.7), i vrijeme računanja za algoritme: SLO [85], ISL0 [86], IRLS [88], Fast_IST [91], SBL [99], BG_GAMP [100], OMP [105]. Problem NSRS: $N=350$, $M=1000$, $T=1000$ i $k=100$. Aditivni šum sa SNR=10dB.

Popis tablica

Tablica 1.4.3.1. Točnost procjene vektora \mathbf{s} , SIR - (D.1.7) u dB, i vrijeme računanja u sekundama za algoritme SL0, NN_L1, BG_GAMP, IRLS. Problem NSRS karakteriziran je sa: $N=350$, $M=1000$, $T=1$, $k \in \{100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200\}$, $\text{SNR} \in \{10, 20, 30\}$ dB.

Tablica 1.4.3.2. Točnost procjene vektora \mathbf{s} , SIR - (D.1.7) u dB, i vrijeme računanja u sekundama za algoritme SL0, NN_L1, BG_GAMP, IRLS. Problem NSRS karakteriziran je sa: $N \in \{200, 250, 300, 350, 400, 450, 500\}$, $M=1000$, $T=1$, $k=100$, $\text{SNR} \in \{10, 20, 30\}$ dB.

Uvod

Teorija i algoritmi slijepog razdvajanja signala (SRS) razvijeni su posljednjih 25 godina, [1-4]. SRS je našlo brojne primjene u neuroznanosti, [5], komunikacijama, [6], financijama, [7], analizi višekanalne slike u daljinskim izviđanjima [8-12], medicini [13-22], analizi signala u kemometriji [22-29], bioinformatici [30-34], itd. Tipičan problem SRS opisan je linearnim bezmemorijskim modelom (LBM) bez šuma:

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{S} \quad (1)$$

gdje $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times T}$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times M}$, $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{M \times T}$ pri čemu N predstavlja broj mješavina ("senzora"), M predstavlja nepoznati broj izvornih signala (još se zovu skrivene varijable ili uzroci), a T predstavlja broj realizacija. Drugim riječima redci matrice podataka \mathbf{X} , $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$, predstavljaju smjese prikupljene na odgovarajućem senzoru, redci matrice \mathbf{S} , $\{\mathbf{s}_m\}_{m=1}^M$ predstavljaju izvorne signale, a stupci matrice \mathbf{A} , $\{\mathbf{a}_m\}_{m=1}^M$, predstavljaju vektore miješanja koji su pridruženi odgovarajućim izvornim signalima. Problem SRS podrazumijeva procjenu matrica \mathbf{A} i \mathbf{S} koristeći samo matricu podataka \mathbf{X} . Takav problem je loše uvjetovan i broj rješenja (\mathbf{A} , \mathbf{S}) je beskonačan. To je zato što se LBM (1) može napisati kao $\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{S}$ pri čemu je \mathbf{B} proizvoljna invertibilna matrica dimenzija $M \times M$. Praktično korisna rješenja problema SRS (1) dobiju se ako se neodređenosti faktorizacije (1) svedu na neodređenosti permutacije (redosljedja) i množenja sa konstantom, tj. $\mathbf{B} = \mathbf{P}\mathbf{A}$ gdje je \mathbf{P} permutacijska matrica (koja u svakom reduku i svakom stupcu ima samo jedan element jednak 1, a ostale elemente jednake 0), a \mathbf{A} dijagonalna matrica. Takvo rješenje se naziva suštinski jedinstvenim. Da bi se dobilo suštinski jedinstveno rješenje potrebno je uvesti ograničenja na \mathbf{A} i/ili \mathbf{S} pri rješavanju inverznog problema SRS (1). Izbor ograničenja zavisi od područja primjene i interpretacije faktora \mathbf{A} i \mathbf{S} . Algoritmi analize nezavisnih komponenata (ANK) podrazumijevaju da su izvorni signali $\{\mathbf{s}_m\}_{m=1}^M$ statistički nezavisni i ne-Gaussovi (osim možda jednoga), [2, 35]. Algoritmi analize rijetkih komponenata (ARK) podrazumijevaju da su izvorni signali rijetki, [poglavlje 10 u ref. 1, 15, 17, 23, 25, 36-38]. Vrlo često se s ograničenjem rijetkosti kombinira i ograničenje nenegativnosti što onda daje rijetkošću regulariziranu faktorizaciju nenegativnih matrica (FNM), [4, 22, 32, 33, 39].

Stvarno značenje varijabli bilinearnog faktorskog modela (1) zavisi od područja primjene. U višekanalnim slikovnim sustavima, gdje spada i analiza slike u boji (RGB) u

patologiji, $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$ predstavljaju vektorizirane slike snimljene u pojedinom kanalu. Na primjer, za RGB sliku sastavljenu od sivih slika na valnim duljinama koje odgovaraju crvenoj, zelenoj i plavoj boji važi $N=3$, pri čemu svaki redak $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^3$ predstavlja vektoriziranu sivu sliku snimljenu na odgovarajućoj valnoj duljini. U tom slučaju redci $\{\mathbf{s}_m\}_{m=1}^M$ predstavljaju površinsku/prostornu raspodjelu intenziteta objekata koji se nalaze u slici, a stupci $\{\mathbf{a}_m\}_{m=1}^M$ predstavljaju njihove spektralne profile, [13-16]. Dakle, rješenje problema SRS (1) primjenjenog na višekanalnu sliku zapravo rješava inverzni problem dekompozicije slike u prostorno homogenu regiju, pri čemu je kriterij grupiranja spektralni profil objekata koji se nalaze u slici¹. U području kemometrije $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$ predstavljaju spektre kemijskih spojeva (smjesa) koji se sastoje od spektara čistih komponenata predstavljenim redcima $\{\mathbf{s}_m\}_{m=1}^M$. Stupci $\{\mathbf{a}_m\}_{m=1}^M$ predstavljaju koncentracijske profile čistih komponenata. Kada se radi o analizi višekanalne slike (što uključuje RGB sliku u patologiji) i analizi spektara mase u kemometriji, na što se odnose primjene u ovom projektu, iz opisane interpretacije slijedi da su faktori \mathbf{A} i \mathbf{S} u (1) nenegativni, tj. $\mathbf{A} \geq \mathbf{0}$, $\mathbf{S} \geq \mathbf{0}$.

Problem SRS (1) je nadodređen kada je broj izvornih signala M manji od broja smjesa N , određen kada je $M=N$ i pododređen kada je $M>N$. Kada se radi o analizi RGB slike u patologiji važi $N=3$ i sa velikom vjerojatnosti važi $M \geq 3$, tj. očekivani broj različitih vrsta tkiva prisutnih u slici histopatološkog uzorka je veći od 3. Krajnji cilj primjene metoda SRS u kemometriji je izdvajanje čistih komponenata iz spektara mase bioloških uzoraka pri čemu su od posebnog interesa komponente koje korespondiraju sa stanjem bolesti (te komponente mogu biti kandidati za biomarkere). Međutim, problem analize bioloških uzoraka karakteriziran je malim brojem smjesa (uzorci su skupi ili nisu lako dostupni) i velikim brojem komponenata, tj. $M \gg N$, [40-42].² Pri tome je jedan značajan broj čistih komponenata

¹ Primjenom operatora praga na izvorne signale, $S_\tau(s_{mt}) = \begin{cases} 1 & s_{mt} \geq \tau \\ 0 & s_{mt} < \tau \end{cases}$, dobije se segmentirana slika.

² Na primjer, studija [41] identificirala je 497 jedinstvenih kemijskih komponenata u spektima mase lišća biljke *Arabidopsis thaliana*. Prema [42] složenost bioloških uzoraka ograničava identifikaciju čistih komponenata (malih bioloških molekula koje se još nazivaju analitima) što se smatra kao jedan od najizazovnijih problema u kemijskoj biologiji.

međusobno koreliran, tj. njihovi spektri se preklapaju³. Iz navedenih razloga u ovom projektu od interesa su metode za rješavanje problema pododređenog nenegativnog SRS sa statistički zavisnim izvornim signalima. Riješenje pododređenog problema SRS uz neodređenost $\mathbf{B}=\mathbf{P}\mathbf{A}$ moguće je samo ako je vektor izvornih signala u svakoj vrijednosti nezavisne varijable t dovoljno rijedak, tj. $\{\|\mathbf{s}_t\|_0 \leq K\}_{t=1}^T$ pri čemu $\|\mathbf{s}_t\|_0$ označava broj nenulatih elemenata vektora \mathbf{s}_t ,⁴ a K predstavlja maksimalan broj komponenata koje mogu biti prisutne u realizaciji $t=1, \dots, T$.

Uz uvjet da je matrica \mathbf{A} poznata te da ima elemente distribuirane po Gaussovoj ili Bernoulijevoj raspodjeli podproblemi SRS (1): $\mathbf{x}_t = \mathbf{A}\mathbf{s}_t$, $t=1, \dots, T$ imaju jedinstveno rješenje s vjerojatnosti blizu 1 kada je broj smjesa $N \approx K \log(M/K)$ i kada se pri rekonstrukciji izvornih signal koristi ograničenje temeljeno na ℓ_1 -normi: $\{\|\mathbf{s}_t\|_1\}_{t=1}^T$, [45]. U radu [46] je pokazano da se pri korištenju ograničenja temeljenih na ℓ_p -normi, pri čemu je $0 \leq p \leq 1$, jedinstveno rješenje postiže kad je $N \geq C_1(p)K + pC_2(p)K \log(M/K)$, gdje su C_1 i C_2 konstante koje zavise of izbora norme p . Značaj ovog rezultata je u činjenici: $\lim_{p \rightarrow 0} N \geq C_1(0)K$, tj. broj mjerenja potreban za rekonstrukciju jedinstvenog rješenja ne zavisi više od broja izvornih signala M ako se pri rekonstrukciji koristi ograničenje temeljeno na ℓ_0 kvazi-normi. To je razlog zašto se pri rješavanju pododređenog problema SRS (1) intenzivno radi na razvoju algoritama sa ograničenjima temeljenim na ℓ_p -normi, pri čemu je $0 < p \leq 1$. Pregled i komparativna analiza "state-of-the-art" algoritama za rješavanje pododređenog problema SRS (1) sa statistički zavisnim ("preklapajućim") signalima dana je u dodatku 1. Asimptotski rezultati iz [45, 46] važe za matricu \mathbf{A} čiji su elementi raspoređeni po Gaussovoj ili Bernoulijevoj slučajnoj raspodjeli. Na žalost, u praktičnim primjenama kao što su dekompozicija RGB slike u patologiji ili izdvajanje čistih komponenata iz spektara mase, matrica \mathbf{A} je deterministička. U [47] je pokazano za specijalnu klasu tzv. polinomskih matrica da je, ako se rješenje problema temelji na ograničenjima sa ℓ_1 -normom, broj mjerenja potreban za jedinstveno rješenje je: $N = O(K^2)$, gdje $O(K^2)$ znači reda K^2 . Ovaj uvjet je značajno lošiji od $N \approx K \log(M/K)$ za slučajnu matricu \mathbf{A} . U praksi, K i N su problemski zavisni. Na primjer, u slučaju višekanalne slike u

³ Statistička analiza u [43,44] je pokazala da će oko 20% čistih komponenata u spektrima mase ko-eluirati, tj. neće biti kromatografski razdvojeni nego će se pojaviti zajedno kao višekomponentna smjesa.

⁴ $\|\mathbf{s}_t\|_0$ se u literaturi vrlo često naziva ℓ_0 -normom od \mathbf{s}_t iako se zapravo radi o kvazi-normi (nije zadovoljena nejednakost trokuta).

medicini K predstavlja maksimalan broj organa ili tkiva koji su prisutni u jednom slikovnom elementu. U slučaju kada slika ima visoku prostornu rezoluciju, što je slučaj sa RGB slikom [13-15], u najvećem broju slučajeva važi da je $K \approx 1$. To znači da su izvorni signali ortogonalni i to značajno olakšava nenadziranu dekompoziciju RGB slike u patologiji. U slučaju spektara mase K predstavlja maksimalan broj čistih komponenata (analita) prisutnih u jednoj m/z koordinati. Kako je već diskutirano, taj broj može biti značajno veći od 1 što onda implicira potrebu za većim brojem smjesa N (na primjer spektara mase bioloških uzoraka). No broj smjesa N je ograničen pa je izdvajanje čistih komponenata (vrlo) zahtjevan problem.

Uz već opisane "poteškoće" u rješavanju pododređenog problema SRS (1) sa statistički zavisnim izvornim signalima dodatnu komplikaciju donosi činjenica da biološki procesi i reakcije vrlo često nisu linearni, [31]. Ista primjedba važi i za modeliranje višekanalne slike, [48,49]. Iz tih razloga linearni model (1) se poopćava na nelinearan bezmemorijski model (NBM):

$$\mathbf{X} = F(\mathbf{S}) \quad (2)$$

gdje je F nepoznata viševarijabilna funkcija (preslikavanje): $F: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^N$, koja djeluje na svaku realizaciju: $\{\mathbf{x}_t = F(\mathbf{s}_t)\}_{t=1}^T$. Pri tome je, $F(\mathbf{s}_t) = [f_1(\mathbf{s}_t) \dots f_N(\mathbf{s}_t)]^T$, tako da je $\{f_n: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}\}_{n=1}^N$ pri čemu i dalje važi $M > N$ i $K \geq 1$, tj. nelinearan problem SRS (2) je pododređen sa statistički zavisnim (preklapajućim) izvornim signalima. Za rješenje nelinearnog problema SRS (2) postoji bitno manji broj algoritama nego je to slučaj za linearni problem (1). Taj broj se dodatno značajno smanjuje ako je nelinearan problem SRS (2) pododređen. Dodatak 2 daje pregled i komparativnu analizu metoda za rješenje problema nelinearnog SRS (2).

Dodatak 1: Linearan pododređeni problem SRS

Problem SRS (1) definiran je sa:

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}\mathbf{S} + \mathbf{V} \quad (\text{D1.1})$$

pri čemu $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_{0+}^{N \times T}$ predstavlja matricu podataka, a $\mathbf{V} \in \mathbb{R}_{0+}^{N \times T}$ predstavlja aditivan bijeli (prostorno nekorelirani) šum (greška aproksimacije) koji ne mora biti Gaussov. $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_{0+}^{N \times M}$ i $\mathbf{S} \in \mathbb{R}_{0+}^{M \times T}$ su nepoznate faktorske matrice pri čemu N predstavlja broj mješavina ("senzora"), M predstavlja nepoznati broj izvornih signala (još se zovu skrivene varijable ili uzroci), a T predstavlja broj realizacija. Drugim riječima redci matrice podataka \mathbf{X} , $\{\mathbf{x}_n\}_{n=1}^N$, predstavljaju smjese prikupljene na odgovarajućem senzoru, redci matrice \mathbf{S} , $\{\mathbf{s}_m\}_{m=1}^M$ predstavljaju izvorne signale, a stupci matrice \mathbf{A} , $\{\mathbf{a}_m\}_{m=1}^M$, predstavljaju vektore miješanja koji su pridruženi odgovarajućim izvornim signalima.

Problem SRS (D1.1) podrazumijeva procjenu matrica \mathbf{A} i \mathbf{S} koristeći samo matricu podataka \mathbf{X} . Pododređeni problem nenegativnog SRS, što je od interesa za projekt, podrazumijeva da broj izvornih signala M može biti (značajno) veći od broja mjerenja N . Pod tim uvjetima nije moguće dobiti rješenje problema SRS (D1.1) koje je jedinstveno na razini permutacije (redoslijeda) i množenja sa konstantom ako se na matrice \mathbf{A} i/ili \mathbf{S} ne postave dodatni uvjeti. Kada se na \mathbf{X} , \mathbf{A} i \mathbf{S} postave ograničenja: (i) nenegativnosti; (ii) broj stupaca matrice \mathbf{A} jednak je nenegativnom rangu matrice \mathbf{X} ; (iii) vektori stupci $\{\|\mathbf{s}_t\|_0\}_{t=1}^T$ su k -rijetki, tj. $\{\|\mathbf{s}_t\|_0 \leq k\}_{t=1}^T$, tako da je $k \leq N$, rješenje problema (D1.1) svodi se na aproksimaciju niskog ranga odnosno na problem nenegativnog ranga nenegativne matrice, [50].⁵ Za nenegativan rang M nenegativne matrice \mathbf{X} važi, [50]:

⁵ Pri tome se nenegativni rang M nenegativne matrice \mathbf{X} definira kao najmanji broj matrica ranga jedan u koji se polazna matrica može aditivno rastaviti. Za matricu $\mathbf{X} \in \mathbb{R}_{0+}^{N \times T}$ nenegativan rang po stupcima, koga ćemo označiti sa $s_rang_+(\mathbf{X})$, je najmanji pozitivan cijeli broj M za koji postoje nenegativni vektori stupci $\{\mathbf{a}_m\}_{m=1}^M$ takvi da se svaki stupac od \mathbf{X} može predstaviti kao linearna kombinacija sa nenegativnim koeficijentima vektora stupaca $\{\mathbf{a}_m\}_{m=1}^M$, tj. $\mathbf{X} = \sum_{m=1}^M \mathbf{a}_m \mathbf{s}_m$. Za transponiranu matricu \mathbf{X}^T ekvivalentno se definira nenegativan rang po redcima, $r_rang_+(\mathbf{X})$. Pri tome važi $M = s_rang_+(\mathbf{X}) = r_rang_+(\mathbf{X}) = rang_+(\mathbf{X})$.

$$\text{rang}(\mathbf{X}) \leq \text{rang}_+(\mathbf{X}) \leq \min(N, T) \quad (\text{D1.2})$$

Nenegativan rang M se procjenjuje različitim algoritmima i taj postupak je poznat pod nazivom izbor reda modela (engl. *model order selection*). U praksi, kada je u podacima prisutan šum \mathbf{V} , algoritmi daju različite vrijednosti procjene M za istu matricu podataka \mathbf{X} . Kako M označava broj objekata prisutnih u matrici podataka \mathbf{X} moguće je koristiti *a priori* informaciju (prethodno znanje) u njegovoj procjeni. Kako je u modelu (D1.1) $N \ll T$, ograničenje na M postavljeno sa (D1.2) implicira $M \leq N$ što je u suprotnosti sa definicijom problema pododređenog SRS koji podrazumjeva: $M > N$. No, ograničenje rijetkosti vektora stupaca matrice \mathbf{S} reducira model (D1.1) na: $\mathbf{x}_t = \mathbf{A}_{(I_k)} \mathbf{s}_{t(I_k)}$ $t = 1, \dots, T$, gdje I_k označava skup od k -indekasa koji odgovaraju pozicijama nenulatih koeficijenata, a $\mathbf{A}_{(I_k)}$ i $\mathbf{s}_{t(I_k)}$ označavaju podmatrice sastavljane od stupaca matrice \mathbf{A} i koeficijente \mathbf{s}_t indeksirane sa I_k . Zbog $k \leq N$ uvjet (D1.2) je zadovoljen i rijetkošću regulariziran problem pododređenog SRS ima rješenje jedinstveno na razini redosljeda i množenja sa konstantom.

Riješenje nenegativnog pododređenog problema SRS (D1.1) moguće je dobiti kroz dva pristupa:

- a) istovremenom faktorizacijom matrice podataka \mathbf{X} u faktorske matrice \mathbf{A} i \mathbf{S} ,
- b.1) procjenom bazne matrice \mathbf{A} koristeći matricu podataka \mathbf{X} ,
- b.2) procjenom matrice \mathbf{S} koristeći matricu podataka \mathbf{X} i koristeći \mathbf{A} dobivenu iz b.1). Matrica \mathbf{S} se može procjeniti tako da se svaki stupac procjenjuje posebno, tj. da se riješi T pododređenih sustava linearnih jednažbi: $\mathbf{x}_t = \mathbf{A} \mathbf{s}_t + \mathbf{v}_t$, $t=1, \dots, T$. Alternativno se matrica \mathbf{S} može procijeniti istovremenim rješavanjem T sustava jednažbi.

Komparativna kvantitativna analiza algoritama za linearan pododređeni problem SRS (D1.1) sa koreliranim izvornim signalima provedena je vodeći računa o slijedećem: vrsti *a priori* informacija koje pojedini algoritam (ne)zahtjeva; točnosti algoritma; računskoj složenosti (vremenu izvođenja) algoritma.

1.1. Mjere točnosti procjena matrica \mathbf{A} i \mathbf{S}

Nenegativan pododređen problem SRS (D1.1) je slabo postavljen te je broj rješenja (\mathbf{A} , \mathbf{S}) koji ga zadovoljavaju beskonačan. To je zato što se linearan bezmemorijski model (LBM) (D1.1) može napisati kao $\mathbf{X}=\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{S}$ pri čemu je \mathbf{B} invertibilna matrica dimenzija $M \times M$ takva da su $\mathbf{A}\mathbf{B}$ i $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{S}$ nenegativne matrice. Uz ograničenje rijetkosti moguće je dobiti rješenje problema SRS (D1.1) koje je neodređeno na razini permutacije (redosljedaja) i množenja sa konstantnom, tj. $\mathbf{B}=\mathbf{P}\mathbf{A}$ gdje je \mathbf{P} permutacijska matrica (koja u svakom reduku i svakom stupcu ima samo jedan element jednak 1, a ostale elemente jednake 0), a \mathbf{A} dijagonalna nenegativna matrica. Nakon korekcije permutacijske neodređenosti greška procjene matrica \mathbf{A} i/ili \mathbf{S} računa se usporedbom autokovarijancnih matrica \mathbf{R}_{AA} i \mathbf{R}_{SS} sa, respektivno, kovarijancnim matricama $\mathbf{R}_{A\hat{A}}$ i $\mathbf{R}_{S\hat{S}}$.⁶ Treba napomenuti da se kovarijancne matrice \mathbf{R}_{AA} i $\mathbf{R}_{A\hat{A}}$ računaju po stupcima, tj. $[\mathbf{R}_{A\hat{A}}]_{mn} = E[\mathbf{a}_m \hat{\mathbf{a}}_n]$ $m, n=1, \dots, M$, dok se kovarijancne matrice \mathbf{R}_{SS} i $\mathbf{R}_{S\hat{S}}$ računaju po redcima, tj. $[\mathbf{R}_{S\hat{S}}]_{mn} = E[\mathbf{s}_m \hat{\mathbf{s}}_n]$ $m, n=1, \dots, M$. Elementi kovarijancnih matrica su normalizirane međukorelacije. Na primjer, $E[\mathbf{s}_m \hat{\mathbf{s}}_n] = \frac{\langle \mathbf{s}_m, \hat{\mathbf{s}}_n \rangle}{\|\mathbf{s}_m\| \|\hat{\mathbf{s}}_n\|}$.

Sada se pogreške u procjeni \mathbf{A} i \mathbf{S} , izražene u decibelima, dobiju iz:

$$\varepsilon(\mathbf{A}) = 10 \log_{10} \left(\frac{\|diag(\mathbf{R}_{AA})\|_2^2}{\|diag(\mathbf{R}_{AA} - \mathbf{R}_{A\hat{A}})\|_2^2} \right) \quad (\text{D1.3})$$

te:

$$\varepsilon(\mathbf{S}) = 10 \log_{10} \left(\frac{\|diag(\mathbf{R}_{SS})\|_2^2}{\|diag(\mathbf{R}_{SS} - \mathbf{R}_{S\hat{S}})\|_2^2} \right) \quad (\text{D1.4})$$

1.2. Simulacijski scenarij

Problem pododređenog SRS (D1.1) simuliran je pod slijedećim uvjetima. Elementi matrice \mathbf{A} generirani su prema uniformnoj raspodjeli uz normalizaciju po stupcima: $\{\|\mathbf{a}_m\| = 1\}_{m=1}^M$, gdje

⁶ Permutacijska neodređenost se korigira inspekcijom kovarijancne matrice $[\mathbf{R}_{S\hat{S}}]_{mn} = E[\mathbf{s}_m \hat{\mathbf{s}}_n]$, $m, n=1, \dots, M$.

Permutacija za izvorni signal (komponentu) m dobije se iz: $m^* = \arg \max_n E[\mathbf{s}_m \hat{\mathbf{s}}_n]$.

$\|\mathbf{a}_m\|$ označava ℓ_2 -normu od \mathbf{a}_m . Elementi matrice \mathbf{S} generirani su tako da važi $\{0 \leq s_{mt} \leq 1\}_{m,t=1}^{M,T}$, sukladno probabilističkom modelu, [51]:

$$p(s_{mt}) = \rho \delta(s_{mt}) + (1 - \rho) \delta^*(s_{mt}) f(s_{mt}) \quad \forall m = 1, \dots, M \quad \forall t = 1, \dots, T \quad (\text{D1.5})$$

gdje je $\delta(s_{mt})$ indikatorska funkcija, $\delta^*(s_{mt}) = 1 - \delta(s_{mt})$ je njezin komplement, a $\rho = \{P(\mathbf{s}_{mt} = 0)\}_{t=1}^T$. Dakle, $\{P(s_{mt} > 0) = 1 - \rho\}_{t=1}^T$. Nenulto stanje slučajne varijable s_{mt} je distribuirano prema zakonu $f(s_{mt})$, pri čemu je u izvedenim eksperimentima korištena uniformna raspodjela amplitude na intervalu (0, 1]. Također se definira odnos signal-šum u decibelima kao:

$$SNR_{dB}(\mathbf{x}_n) = 10 \log_{10} \frac{\sigma_{\mathbf{x}_n}^2}{\sigma_{\mathbf{v}_n}^2} \quad \forall n = 1, \dots, N \quad (\text{D1.6})$$

gdje $\sigma_{\mathbf{x}_n}^2$ i $\sigma_{\mathbf{v}_n}^2$ respektivno predstavljaju varijancu mjenog signala \mathbf{x}_n i aditivnog šuma \mathbf{v}_n . Aditivni šum je generiran kao prostorno nekoreliran Gaussov šum.

Izabrani algoritmi za svaku od tri kategorije (1a, 1b.1 i 1b.2) su uspoređeni pod sljedećim uvjetima:

- za algoritme iz kategorije 1a): $N=100$, $M=250$, $T=2500$, $k \in \{10, 30, 50\}$ i $SNR \in \{10, 20, 30, \text{inf}\}$ dB. Za svaku konstelaciju sustav (D1.1) je generiran 100 puta prema probabilističkom modelu (D1.5) sa $\rho=0.8$. Nakon toga je izračunata točnost/pogreška procjene \mathbf{A} i \mathbf{S} prema (D1.2) i (D1.3).
- za algoritme iz kategorije 1b.1): $N=250$, $M=250$, $T=1000$, $k \in \{10, 30, 50\}$ i $SNR \in \{10, 20, 30, \text{inf}\}$ dB. Za svaku konstelaciju sustav (D1.1) je generiran 100 puta prema probabilističkom modelu (D1.5) sa $\rho=0.8$. Nakon toga je izračunata točnost/pogreška procjene \mathbf{A} prema (D1.2).⁷

⁷ Iako se analizira pododređeni problem SRS (D1.1) u evaluaciji algoritama iz kategorije 1.b generiran je određeni problem SRS. To se opravdava činjenicom da se nelinearan problem pododređenog SRS, vidi dodatak

- algoritmi iz kategorije 1b.2.) ispitani su pod slijedećim uvjetima
 - algoritmi čiji odabir je obrazložen u sekciji 1.3.3. su ispitani na problemu $N=350$, $M=1000$, $k=100$, $T=1000$, $SNR=10dB$ i $SNR=inf$. Za svaku konstelaciju sustav (D1.1) je generiran 100 puta prema probabilističkom modelu (D1.5) sa $\rho=0.9$.
 - četiri algoritma sa najboljom kombinacijom točnosti i računске složenosti su dodatno ispitana na problemima:
 - $N=350$, $M=1000$, $T=1$, $k \in \{100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200\}$, $SNR \in \{10, 20, 30\}$ dB. Za svaku konstelaciju sustav (D1.1) je generiran 100 puta prema probabilističkom modelu (D1.5) sa $\rho=0.9$.
 - $N \in \{200, 250, 300, 350, 400, 450, 500\}$, $T=1$, $M=1000$, $k=100$, $SNR \in \{10, 20, 30\}$ dB. Za svaku konstelaciju sustav (D1.1) je generiran 100 puta prema probabilističkom modelu (D1.5) sa $\rho=0.9$.

Svi numerički eksperimenti su izvedeni u programskom okruženju MATLAB na računalu sa 64-bitnim operativnim sustavom Windows, procesorom Intel Core i7-3930K sa brzinom takta 3.2 GHz i radnom memorijom od 64 GB, odnosno na računalu sa 64-bitnim operativnim sustavom Windows, procesorom Intel Core i7-2600s sa brzinom takta 3.4 GHz i radnom memorijom od 12 GB.

1.3. Analiza algoritama za linearan problem nenegativnog SRS

Područja SRS, faktorizacije nenegativnih matrica (FNM) i rijetkih reprezentacija signala su posljednjih 15-ak godina doživjela intenzivan razvoj. Broj algoritama je velik i stalno se povećava. Ipak, postoji mali broj algoritama koji omogućava rješenje problema nenegativnog SRS sa koreliranim (preklapajućim) izvornim signalima. Ako je pri tome broj izvornih signala veći od broja mjerenja (mješavina) onda se broj algoritama drastično smanjuje. Sa druge strane takvi problemi se očekuju u praksi u dekompoziciji višekanalne

2, svodi na linearan problem u induciranom Hilbertovom prostoru sa reprodukcijским jezgrama. Time se omogućava uporaba kvalitetnih algoritama za procjenu matrice miješanja pri rješavanju problema nelinearnog SRS, što je i cilj projekta.

slike i posebno u dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. Prema najboljim saznanjima glavnog istraživača na projektu ovdje se analiziraju algoritmi koji imaju potencijal rješenja nenegativnog problema SRS (D1.1), sa posebnim naglaskom na pododređeni problem sa koreliranim izvornim signalima.

1.3.1. Algoritmi za istovremenu faktorizaciju matrice \mathbf{X} u matrice \mathbf{A} i \mathbf{S}

U [52] je prezentiran multiplikativan FNM algoritam regulariziran $\ell_{1/2}$ -normom kao mjerom rijetkosti matrice \mathbf{S} , (jednadžbe 11 i 12), odnosno ℓ_q -normom, $0 < q \leq 1$, (jednadžbe 25 i 26). Regularizacija temeljena na $\ell_{1/2}$ -normi daje najrijeđe rješenje za $0.5 < q \leq 1$, dok rijetkost ne varira značajno za $0 < q < 0.5$, vidi također [85]. No pri $q < 1$ predloženi FNM algoritam rezultira nekonveksnim optimizacijskim problemom. To zahtijeva heurističku inicijalizaciju sa velikim brojem početnih pokušaja i velikim brojem iteracija iz točke najboljeg pokušaja. Na problemu $N=100$, $M=250$ i $k=10$ algoritam za 1000 iteracija i 100 pokušaja (10 iteracija po pokušaju) treba 1000 sekundi. No rezultat nije točan. Za 5000 iteracija i 500 pokušaja (50 iteracija po pokušaju) algoritam nije došao do kraja u 12 sati!!! Za 2000 iteracija i 200 pokušaja (20 iteracija po pokušaju) algoritam nije došao do kraja za 1 sat!!! Na istom problemu NMU algoritam, referenca [55], završava za 34 sekunde!!! Na problemu $N=10$, $M=25$ i $k=3$, NMU algoritam završava za 0.6 sekundi i daje rezultat: $\epsilon(\mathbf{A})=6.93$ dB, $\epsilon(\mathbf{S})=5.88$ dB. L_q -ograničen FNM algoritam za 2000 iteracija i 200 pokušaja (20 iteracija po pokušaju) treba 115.8 sekundi i daje rezultat: $\epsilon(\mathbf{A})=25.0$ dB, $\epsilon(\mathbf{S})=5.8$ dB. Za 1000 iteracija i 100 pokušaja L_q -ograničen NMF algoritam treba 28.5 sekundi sa rezultatom: $\epsilon(\mathbf{A})=23.8$ dB, $\epsilon(\mathbf{S})=3.9$ dB. Iz ovih rezultata se vidi da L_q -NMF algoritam daje točnost u procjeni matrice \mathbf{S} usporedivu sa NMU uz puno veću (dva reda veličine) računsku složenost. Kako je već navedeno za velike probleme računaska složenost L_q -FNM algoritma [52] se mjeri satima. Iz toga razloga predlaže se da se L_q -FNM algoritam ne koristi u dekompoziciji spektara mase. Njegova uporaba se eventualno može opravdati u dekompoziciji RGB slike.

U [53] je predložen algoritam za procjenu matrice miješanja u nad-određenim i određenim problemima SRS. Ovaj algoritam nije primjenjiv na pododređeni problem SRS (D1.1), no moguća je njegova primjena na nelinearan problem SRS u induciranom Hilbertovom prostoru sa reprodukcijom jezgrama (HPRJ), vidi sekciju 2.0. Ipak, glavni nedostatak ovog algoritma je u tome da se procjena matrice miješanja temelji na pretpostavci

o postojanju uzoraka u višedimenzionalnom prostoru u kojima je dominantno prisutan samo jedan izvorni signal, pri čemu svaki izvorni signal mora biti dominantno prisutan u barem jednom uzorku. Ta pretpostavka je vrlo restriktivna i čini ovaj algoritam nepodesnim za primjene u dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka.

U [54] je predložen algoritam za nenadziranu dekompoziciju višespektralne slike. Algoritam koristi metode grupiranja podataka za procjenu matrice miješanja, pri čemu se podrazumjeva postojanje "čistih uzoraka" u kojima je prisutan samo jedan izvorni signal. Kako je već prethodno diskutirano ova pretpostavka je vrlo restriktivna za praktične primjene u kemometriji. Dodatni nedostatak ove metode je što algoritam predložen u [74] može procijeniti matricu razdvajanja (pseudoinverz matrice miješanja), preko maksimizacije determinante Grammove matrice \mathbf{XX}^T , bez da zahtjeva postojanje čistih uzoraka.

U [55] je predložena metoda FNM koja se temelji na kriteriju podaproximacije (NMU). U svakom koraku NMU algoritam izdvaja jednu matricu ranga 1, $\mathbf{a}_m \mathbf{s}_m^T$, $m=1, \dots, M$. Pri tome se zahtjeva da važi: $\mathbf{AS} \leq \mathbf{X}$. Teorem 1 u [55] dokazuje da ovo ograničenje daje faktorizaciju takvu da je rijetkost \mathbf{A} i \mathbf{S} veća od rijetkosti od \mathbf{X} . To ne znači da NMU algoritam daje najrijeđu moguću faktorizaciju no njegova velika prednost je da se rijetka faktorizacije osigurava ograničenjem podaproximacijom. To znači da NMU algoritam ne zavisi od regularizacijskih koeficijenata čiju optimalnu vrijednost je u praksi teško podesiti. Zbog toga se predlaže uporaba ovog algoritma na problemima dekompozicije RGB slike histopatološkog uzorka. Kako je pokazano u [108] NMU algoritam uz nelinearnu transformaciju originalnog problema (D1.1) u HPRJ daje dobre rezultate na pododređenom problemu SRS sa koreliranim komponentama. MATLAB kôd NMU algoritma raspoloživ je na: <https://sites.google.com/site/nicolasgillis/code>.

U [56] je formuliran probabilistički pristup pododređenom nenegativnom problemu SRS sa k -rijetkim izvornim signalima. Algoritam se temelji na probabilističkom modelu izvornih signala (D1.5) što u kombinaciji sa Bayes-ovim pristupom vodi do ciljne funkcije sa regularizacijom temeljenom na ℓ_0 -normi izvornih signala. Algoritam podrazumijeva da je rijetkost k unaprijed poznata (zadana) što predstavlja nedostatak za praktične primjene. Numerički eksperimenti sa ovim algoritmom pokazali su njegove dodatne nedostatke: predložene procedure za procjenu vjerojatnosti $\rho = P(s_m = 0)$, vidi model (D1.5), te procjenu varijance šuma se temelje na aproksimacijama koje su u ispitivanjima generirale

velike pogreške pri rješavanju pododređenog linearnog sustava jednačbi. To je dijelom posljedica i nerealne pretpostavke o tome kako je moguća (vrlo) točna procjene matrice miješanja \mathbf{A} , što u slučaju značajno koreliranih izvornih signala također nije točno. Iz navedenih razloga algoritam [56] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka.

U [57] je razvijen algoritam za procjenu matrice miješanja \mathbf{A} i matrice koeficijenata \mathbf{S} u kontekstu analize hiperspektralne slike, pri čemu se ne zahtjeva postojanje "čistih uzoraka". Algoritam postavlja ograničenje da broj izvornih signala bude manji ili jednak broju mješavina. Ovo ga čini ne podesnim za primjene u pododređenom problemu SRS. Moguća je njegova primjena na nelinearan pododređeni problem SRS nakon transformacije nelinearnog problema u HPRJ. No računaska složenost ovog algoritma, kao i svih algoritama koji se temelje na konveksnoj geometriji (analizi), u HPRJ izuzetno velika. Iz navedenih razloga algoritam [57] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. MATLAB kod algoritma [57] je raspoloživ na: <http://mx.nthu.edu.tw/~tsunghan/Source%20codes.html>.

U [58] je razvijen FNM algoritam za faktorizaciju u stvarnom vremenu. Budući da primjene predviđene u projektu nisu ograničene stvarnim vremenom algoritam [58] nije od interesa za projekt. U [59] je razvijen algoritam za određeni nenegativan problem SRS sa zavisnim izvornim signalima (NLCA - FNM algoritam). Algoritam maksimizira volumen konveksne ljuske razapete izvornim signalima pomoću linearnog programiranja. U testovima provedenim u [73] NLCA-FNM algoritam daje rezultat usporediv sa ANK algoritmom [73]. Međutim ANK algoritam [73] je primjenjiv i na određene i nad-određene probleme SRS. NLCA-FNM algoritam se, načelno govoreći, može primjeniti na određeni problem NSRS u induciranom HPRJ. No njegov glavni nedostatak je da se temelji na rješavanju linearnih programa sa ograničenjima čiji broj odgovara broju realizacija signala T (broj piksela u slici ili broj spektralnih linija u spektrima mase). To rezultira računski neizvedivom implementacijom. Taj problem se može ublažiti ako se T uzoraka zamjeni sa $L \ll T$ vrhova konveksne ljuske razapete uzorcima. Na žalost, algoritmi za pronalaženje vrhova konveksne ljuske, npr. *quickhull* algoritam, su računski neizvedivi kad dimenzija uzorka (to odgovara broju mješavina N) bude veća od 8. Dakle NLCA-FNM algoritam je neprimjenjiv na probleme faktorizacije u HPRJ predviđene projektom. MATLAB kôd NLCA-FNM algoritma je raspoloživ na: <http://mx.nthu.edu.tw/~tsunghan/Source%20codes.html>.

Algoritam [60] je FNM algoritam dobijen minimizacijom volumena konveksne ljuske razapete empirijskim uzorcima. Njegov glavni nedostatak je, što je komentirano i u [73], je da zavisi od regularizacijske konstante koja balansira kompromis između pogreške aproksimacije i ograničenja na rijetkost rješenja. Iz tog razloga algoritam [60] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. Algoritam [61] procjenjuje matricu miješanja \mathbf{A} iz rijetkih smjesa sa nepoznatim brojem izvornih signala. Ovaj algoritam zahtjeva postojanje *čistih uzoraka*. U definiciji 1 predložen je kriterij koji na temelju empirijskih uzoraka (podataka) procjenjuje da li je pretpostavka rijetkosti točna. Metoda koristi inovativan koncept nelinearne projekcije skupa podataka u procjeni broja izvornih signala. No, glavni nedostatak ovog algoritma je u pretpostavci postojanja *čistih uzoraka*. Ta pretpostavka sa velikom vjerojatnosti nije točna kada se radi o spektrima mase bioloških uzoraka. Iz tog razloga algoritam [61] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. Algoritam [62] procjenjuje matricu miješanja \mathbf{A} i matricu koeficijenata \mathbf{S} u dekompoziciji hiperspektralne slike minimizacijom volumena konveksne ljuske koja obujmljuje skup empirijskih uzoraka. Za ovaj algoritam važe isti komentari kao za algoritam [57], zbog čega nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. Algoritam [63] je modifikacija standardnih FNM algoritama kroz uvođenje pozitivne simetrične matrice u LBM (D1.1). Pri tome se parametar $0 \leq \theta \leq 1$ koristi da regulira stupanj rijetkosti rješenja. No za razliku od metoda koje koriste konstantu regularizacije pridruženu ograničenju rijetkosti, parametar θ u algoritmu [63] ima ulogu sličnu onoj koju p -norma ($0 < p \leq 1$) ima u [52]. U provedenim numeričkim eksperimentima pokazalo se da algoritam [63] nije pouzdan kada su izvorni signali ili vrlo rijetki ili međusobno slabo korelirani ($k \leq 3$). Ovaj algoritam bi se mogao primjeniti na rješavanje nelinearnih problema SRS nakon njihovog preslikavanja u HPRJ. No zbog očekivano visoke dimenzionalnosti linearnog problema SRS u HPRJ, $N \approx M \approx T$, računaska složenost algoritma [63] postaje vrlo velika tj. on postaje neizvediv. Iz tih razloga algoritam [63] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. MATLAB kôd algoritma [63] raspoloživ je na: <http://code.google.com/p/nmflib/downloads/list>. Algoritam [64] je razvijen za određeni i nadodređeni problem NSRS. Metoda se temelji na slijedećim pretpostavkama na izvorne signale: (i) $N-1$ izvorni signal se javlja samostalno u barem jednom uzorku; (ii) zadnji izvorni signal je pozitivan te postoji interval u kojem je dominantno prisutan u odnosu na prvih $N-1$

izvornih signala. Autori rada [64] tvrde da su ove pretpostavke točne za NMR spektre metabolita. No empirijske studije spektara mase lišća biljke *Arabidopsis thaliana* prezentirane u [41, 42] pokazuju da je očekivani broj izvornih signala (čistih komponenata ili analita) vrlo velik (i do nekoliko stotina). Iz tog razloga nije realno očekivati da su gore navedene pretpostavke ispunjene pa algoritam [64] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. U [65] je prezentiran FNM algoritam iz skupine metoda koje minimiziraju volumen konveksne ljuske koju razapinju izvorni signali. No za razliku od algoritma [73], algoritam [65] zavisi od regularizacijskog/balansnog parametra čija optimalna vrijednost se u praksi teško izabire. Iz tog razloga algoritam [65] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. Algoritam razvijen u [66] korigira postojeće FNM algoritme koji se koriste za segmentaciju izvornih signala iz spektrograma mješanih signala (apsolutna vrijednost Fourierove transformacije mješanih signala). No, ako se u LBM izvorni signali preklapaju ovaj algoritam nije primjenjiv. Iz tog razloga algoritam [66] nije primjenjiv na problem dekompozicije spektara mase bioloških uzoraka.

U radu [67] predložena su dva algoritma za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi kao dijela FNM algoritma, a temelje se na modifikacijama MP i OMP algoritama uvođenjem dodatnih ograničenja nenegativnosti, te modifikacijama metode NNK. To daje algoritme nazvane rijetki NNK i reverzno rijetki NNK što predstavlja NNK problem sa ograničenjem ℓ_0 -kvazi norme na izvorne signale. Matrica miješanja se procjenjuje nekim od standardnih algoritama. U usporednoj analizi algoritam [67] je pokazao poboljšanje u odnosu na ℓ_0 -ograničen FNM algoritam [72]. Posebice, reverzno rijetki NNK algoritam daje značajno poboljšani rezultat kad se povećava broj nenultih vrijednosti izvornih signala. Iz opisanih razloga algoritam [67] je ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. MATLAB kôd algoritma [67] raspoloživ je na: <http://www3.spsc.tugraz.at/people/robert-peharz>.

U radu [68] je prezentiran algoritam za faktorizaciju matrice s ograničenjem niskog ranga na problemu popunjavanja matrice kojoj nedostaju elementi. Pri tome je ciljna funkcija ℓ_1 -norma otežane pogreške aproksimacije. Performansa algoritma je diskutirana i analizirana na problemima relevantnim za područje računalnog vida. Nejasno je da li ovaj algoritam može biti upotrebljiv na pododređenom problemu NSRS. Iz tog razloga algoritam [68] nije ušao u

uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. U radu [69] prezentirana je metoda za procjenu matrice miješanja \mathbf{A} koristeći tehnike grupiranja podataka. Izvorni signali se modeliraju sa Bernoulli-Gausovim probabilističkim modelom uz dodatnu pretpostavku da je u svakom uzorku aktivan samo jedan izvorni signal. Metoda grupiranja podataka temelji se na parametrizaciji vektora miješanja pomoću kuteva u hipersferičnim koordinatama. Glavni nedostak ovog algoritma je pretpostavka o postojanju "čistih uzoraka". Iz opisanih razloga algoritam [69] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. U radu [70] predstavljena je modifikacija FNM algoritma dodavanjem ograničenja koje zahtjeva statističku nezavisnost izvornih signala. Na sintetičkim i eksperimentalnim hiperspektralnim podacima ovaj algoritam je uspoređen sa VCA algoritmom [77] što ne predstavlja *state-of-the-art*. Dodatni nedostatak algoritma [70], sa stanovišta projekta, je da ograničenje statističke nezavisnosti nema smisla za problem NSRS sa koreliranim signalima. Iz ovih razloga algoritam [70] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka.

U radu [71] je prezentiran ponderirani FNM algoritam temeljen na minimizaciji Euklidove udaljenosti između podataka \mathbf{X} i modela \mathbf{AS} , te je predložen za problem NSRS analizi spektara mase. Matrica težinskih koeficijenata se računa pomoću statističkog modela proizašlog iz spektrometrije mase. Ovaj algoritam može biti potencijalno važan za analizu spektara mase u HPRJ, tj. analizu spektara mase nelinearnih kemijskih reakcija. Ipak znanstveno utemeljeno očekivanje je da su u slučaju nelinearnih kemijskih reakcija učinci nelinearnosti puno dominantniji od učinaka šuma i da je važnost algoritma [71] za predloženi projekt mala. U radu [72] je prezentiran FNM algoritam regulariziran ℓ_0 -normom izvornih signala. No, u [67] je usporednom analizom pokazano da je algoritam [67] točniji od algoritma [72]. MATLAB kôd algoritma [72] raspoloživ je na:
http://www2.imm.dtu.dk/pubdb/views/edoc_download.php/5523/zip/imm5523.zip.

U radu [73] prezentiran je algoritam za problem NSRS. Algoritam se zasniva na mjeri združene "prostorno-vremenske" rijetkosti izvornih signala utemeljenoj na determinanti matrice razdvajanja signala (inverz matrice miješanja \mathbf{A}). Metod je implementiran kao serija kvadratičnih programa (MATLAB funkcija *quadprog*), tj. optimizaciji matrice razdvajanja redak-po-redak. U odnosu na većinu ANK algoritama nema balansnog (regularizacijskog) parametra za podešavanje. Također, u odnosu na većinu FNM/ANK algoritama predloženi

metod [73] ne zahtjeva postojanje "čistih uzoraka". No algoritam zahtjeva da je NSRS problem (nad)određen. Na sintetičkim i eksperimentalnim podacima u [73] je pokazano da algoritam daje bolje rezultate od algoritama [59, 60, 77]. Slično kao algoritam [59], algoritam [73] se temelji na rješavanju kvadratičnih programa sa ograničenjima tipa jednakosti čiji broj odgovara broju uzoraka T (broj piksela u slici ili broj linija u spektru mase). Kako T može biti vrlo velik to algoritam [73] čini računski neizvedivim. Slično kao u [59], u [73] je predloženo da se traži $L \ll T$ ekstremnih točaka (vrhova) konveksne ljuske razapete uzorcima. Na žalost, kako je već komentirano u slučaju algoritma [59], algoritmi za traženje ekstrema konveksne ljuske (*quickhull* algoritam) su računski neizvedivi kada je dimenzija uzorka N veća od 8. Iz ovog razloga algoritam [73] može biti koristan u analizi spektara mase i RGB slike histiopatološkog uzorka u HPRJ ako dimenzija induciranog HPRJ nije veća od 8.

1.3.2. Algoritmi za procjenu matrice \mathbf{A} iz matrice \mathbf{X}

U radu [74] prezentiran je FNM metod kao poopćenje nekoliko metoda za dekompoziciju (*engl. unmixing*) hiperspektralne slike temeljenih na pretpostavci "čistih piksela". Algoritam [74] također pretpostavlja postojanje "čistih piksela", no greška procjene matrice miješanja raste postupno kada pretpostavka postojanja "čistih piksela" nije u zadovoljena. Algoritam je rekurzivnog karaktera, tj. procjenjuje matricu miješanja stupac po stupac. Njegova značajna osobina je da nema slobodnih parametara koji zahtjevaju podešavanje ili *a priori*no znanje. Nedostatak algoritma je što zahtjeva da matrica miješanja bude punog ranga, tj. da je broj izvornih signala manji ili jednak broju mješavina. Iz perspektive projekta, algoritam (BrziFNM) može biti koristan kada se nelinearni problem NSRS transformira u HPRJ. MATLAB kôd algoritma [74] raspoloživ je na: <https://sites.google.com/site/nicolasgillis/code>.

U radu [75] prezentirana je poboljšanja verzija algoritma [57] za procjenu matrice miješanja u području analize hiperspektralne slike. Algoritam [75] također spada u skupinu algoritama temeljenih na konveksnoj analizi (geometriji) koji stupce matrice miješanja nastoje procjeniti kroz vrhove konveksne ljuske koja obujmljuje skup empirijskih uzoraka. Kao i druge metode iz ovog područja, algoritam [75] zahtjeva da je matrica miješanja punog ranga, tj. da broj izvornih signala (komponentata) nije veći od broja mješavina. Metoda [75] može biti potencijalno korisna pri rješavanju nelinearnog problema NSRS u HPRJ. No, za razliku od metode [74], računaska složenost algoritma [75] je tako velika da faktorizacija očekivano

velikih matrica (i do 10,000 x 10,000) u HPRJ nije izvediva. Iz tog razloga algoritam [75] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. MATLAB kôd algoritma [75] raspoloživ je na: <http://mx.nthu.edu.tw/~tsunghan/Source%20codes.html>. Algoritam prezentiran u [76] predstavlja FNM metodu za dekompoziciju hiperspektralne slike koja je ograničena po dijelovima glatkim spektralnim i prostornim profilima objekata. Usporedna analiza pokazuje da ovaj algoritam u najboljem slučaju doseže performansu algoritma [75]. Iz tog razloga algoritam [76] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. U radu [77] prezentiran je algoritam (*engl. vertex component analysis - VCA*) za procjenu matrice miješanja pri dekompoziciji hiperspektralne slike. Metoda pretpostavlja postojanje "čistih piksela" i zahtjeva da je matrica miješanja punog ranga, tj. da broj izvornih signala nije veći od broja smjesa. U kombinaciji sa metodom nenegativnih najmanjih kvadrata algoritam [77] na problemu dekompozicije hiperspektralne slike daje slabije rezultate od algoritama [57] i [73]. Iz tog razloga algoritam [77] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. MATLAB kôd algoritma [77] raspoloživ je na: <http://www.lx.it.pt/~bioucas/code.htm>.

U radu [78] prezentiran je algoritam za procjenu matrice miješanja u problemu dekompozicije hiperspektralne slike. Za razliku od mnogih algoritama u ovom području, algoritam [78] ne zahtjeva postojanje "čistih piksela" u postupku procjene matrice miješanja. Ummjesto toga, algoritam traži najmanje kontaminirane piksele koristeći formalizam poznat kao "*lattice associate memory (LAM) theory*". Dodatna prednost LAM algoritma je da ne zahtjeva da broj izvornih signala bude poznat unaprijed. U usporednoj analizi pokazao je bolje rezultate od VCA algoritma [77] i MVES algoritma [57]. Iz tih razloga LAM algoritam [78] ušao je u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. MATLAB kôd algoritma [78] raspoloživ je na: [http://www.ehu.es/ccwintco/index.php/Endmember_Induction_Algorithms_\(EIAs\)_for_MATLAB_and_SCILAB](http://www.ehu.es/ccwintco/index.php/Endmember_Induction_Algorithms_(EIAs)_for_MATLAB_and_SCILAB).

U radu [79] uspoređene su različite implementacije N-FINDR algoritma u procjeni matrice miješanja pri dekompoziciji hiperspektralne slike. N-FINDR algoritam striktno zahtjeva "čiste piksele" pri procjeni matrice miješanja. U usporednoj analizi algoritmi [78], [74] i [75] postižu bolje rezultate od algoritma [79]. Iz tih razloga algoritam [79] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji

spektara mase bioloških uzoraka. U radu [80] prezentiran je algoritam za procjenu matrice miješanja za k -rijetke izvorne signale. Algoritam u osnovi koristi geometrijske metode u procjeni k -dimenzionalnih podprostora i procjeni matrice miješanja. Za $k > 1$ računaska složenost algoritma je vrlo velika. Za $k=1$ algoritam zapravo pretpostavlja postojanje "čistih uzoraka", što ga čini nepodesnim za pododređeni problem NSRS. Čak i kada je zahtjev $k=1$ ispunjen algoritam je računski izvediv za probleme SRS koji imaju $N \leq 3$ mjerenja. To je zbog toga što se položaj vektora miješanja, koji ima jediničnu duljinu u ℓ_2 -normi, opisuje sa $N-1$ kutem u kuglinim koordinatama. U tome slučaju tehnika grupiranja podataka rezultira sa $L_1 \times \dots \times L_{N-1}$ pretraživanja, pri čemu su L_n , $n=1, \dots, N-1$, broj kuteva po pojedinim dimenzijama. Iz opisanih raloa algoritam [80] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. U radu [81] je prezentiran algoritam tehnikom grupiranja podataka za procjenu matrice miješanja kada su izvorni signali u pododređenom problemu NSRS korelirani. Glavna poteškoća sa algoritmom [81] je relativno veliki broj slobodnih parametara (pragova) koje je potrebno podešavati i čije vrijednosti su uvijek problemski zavisne. Iz tog razloga algoritam [81] nije ušao u uži izbor za primjene u dekompoziciji RGB slike histopatološkog uzorka i dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. U radu [82] prezentiran je algoritam za procjenu matrice miješanja u pododređenom problemu SRS, a koji se također temelji na pretpostavci o postojanju "čistih uzoraka". Metoda je primarno razvijena za procjenu matrice miješanja iz vremensko-frekvencijske reprezentacije govornih signala. Ovaj algoritam nije direktno primjenjiv na signale u području spektrometrije mase i RGB slike, što je od interesa za projekt, pa stoga nije ušao u uži izbor.

U radu [83] prezentiran je algoritam za procjenu broja nakupina, što odgovara broju izvornih signala, i lokacijama nakupina, pri grupiranju skupa mješanih uzoraka. Algoritam konstruira stablo minimalnog raspona, a koje opisuje viševarijabilnu funkciju gustoće raspodjele vjerojatnosti. Pri tome modovi viševarijabilne funkcije raspodjele vjerojatnosti odgovaraju centrima nakupina. Na simuliranim podacima ovaj algoritam se, u usporednoj analizi, pokazao dobrim u procjeni broja izvornih signala. U zavisnosti od rezultata dobivenih ostalim izabranim algoritmima, algoritam [83] može biti razmatran u analizi RGB slike i spektara mase.

1.3.3. Algoritmi za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi

U radu [84] predložen je algoritam temeljen na regularizaciji kvadrata pogreške $\ell_{1/2}$ -normom vektora koeficijenata. U duhu zaključaka iz rada [52], u [84] se tvrdi da $\ell_{1/2}$ -norma osigurava najrijeđe rješenje među ℓ_p -normama za $p \in [1/2, 1]$, a da nema značajne razlike kada je $p \in (0, 1/2]$. U [84] je pokazano da su $p=1/2$ i $p=2/3$ jedine norme između $(0, 1)$ za koje postoji analitičko rješenje temeljeno na "thresholding-u" u analogiji sa tvrdim "thresholding-om" za ℓ_0 -normu i mekim "thresholding-om" za ℓ_1 -normu. Budući da $\ell_{2/3}$ -norma promovira manje rijetko rješenje u [84] je za dalju analizu, razvoj algoritma, zadržana $\ell_{1/2}$ -norma. Iterativan "thresholding" algoritam je dan jednadžbama (47) i (48) u [84]. Za shemu 1 nije potrebna informacija o očekivanom broju nenultih koeficijenata, k , vektora rješenja, dok za sheme 2 i 3 jest. Predloženi algoritam je uspoređen sa algoritmima mekog i tvrdog "thresholding-a" kao i sa ponderiranim ℓ_1 -normom regulariziranom minimizacijom kvadrata pogreške. Na problemu $N=240$, $M=512$, $k=130$ algoritam je dao najbolji rezultat. Ovaj algoritam ima potencijalnu važnost u dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka no njegovi glavni nedostaci su: (i) velika računaska složenost što vodi do računski neizvedive implementacije kada je potrebno riješiti i do 10,000 pododređenih sustava linearnih jednadžbi; (ii) točnost ovog kao i svih drugih algoritama iz ove skupine je u vrlo značajnoj mjeri određena točnošću procjene matrice miješanja (algoritmi iz skupine 1.3.2.). Iz ovih razloga, a gledano iz perspektive projekta, na ovaj algoritam je potrebno računati u "krajnjoj nuždi".

U radu [85] prezentiran je, možebitno, jedan od najkvalitetnijih algoritama za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi. Algoritam minimizaciju kvadrata pogreške regularizira glatkom aproksimacijom ℓ_0 -norme. To ga čini robusnim kada broj nenultih koeficijenata, k , vektora rješenja raste. Uz malu pogrešku aproksimacije, u odnosu na konkurentne algoritme, algoritam [85] je zaista brz, tj. ima malu računsku složenost (vidi sekciju 1.4.3.). Procjena je da bi ovaj algoritam u kombinaciji sa algoritmima [74] i [78], za procjenu matrice miješanja, mogao biti važan u dekompoziciji spektara mase nelinearnih kemijskih reakcija u HPRJ. MATLAB kôd algoritma [85] raspoloživ je na:
<http://ee.sharif.ir/~SLzero/>.

U radu [86] prezentirana je "poboljšana" verzija algoritma [85]. U odnosu na originalan algoritam [85], algoritam [86] koristi Newton-ovu metodu pri optimizaciji, Tablica III u [86]. U iscrpnoj usporednoj analizi provedenoj u [86], ovaj novi algoritam pokazuje

dobra svojstva kada se broj jednadžbi (mjerenja) smanjuje. Ispitivanja provedena u sekciji 1.4.3. također potvrđuju poboljšanu točnost algoritma [86] u odnosu na algoritam [85] no uz značajno veću računsku složenost. Procjena je da algoritam [86] u kombinaciji sa algoritmima [74] i [78], za procjenu matrice miješanja, može biti važan u dekompoziciji spektara mase nelinearnih kemijskih reakcija u HPRJ.

U radu [87] je pokazano da je moguća egzaktna rekonstrukcija rijetkih signala sa bitno manje mjerenja kad se regularizacija ℓ_1 -normom zamjeni regularizacijom ℓ_p -normom, $0 < p \leq 1$. Računski efikasna implementacija, poznata kao metoda najmanjih kvadrata sa iterativnim otežavanjem, je prezentirana u [88]. U [88] je pokazano da metoda najmanjih kvadrata sa iterativnim otežavanjem postiže najbolji rezultat, pri povećanom broju nenulih koeficijenata vektora rješenja, kada norma regularizacije teži prema ℓ_0 . To je u skladu sa rezultatima prezentiranim u [86] i [52]. Glavni prigovori regularizaciji ℓ_0 -normom su da je osjetljiva na šum. No u [104] je pokazano da je za $\text{SNR} \approx 0\text{dB}$ ℓ_1 -norma bolji izbor od ℓ_0 -norme, dok je pri $\text{SNR} > 7\text{dB}$ zaključak suprotan. Iz tih razloga, kao i zbog činjenice da je računska složenost algoritma [88] mala, procjena je da algoritam [88] u kombinaciji sa algoritmima [74] i [78], za procjenu matrice miješanja, može biti važan u dekompoziciji spektara mase nelinearnih kemijskih reakcija u HPRJ.

U radu [89] prezentiran je algoritam za rješenje pododređenog sustava linearnih jednadžbi koji uključuje poopćeni regularizacijski član (uključuje većinu poznatih potencijalnih funkcija), pridruženi "proximity" operator te približno rješenje poopćenog "proximity" operatora u analitičkoj formi. To daje skup "thresholding" funkcija koje omogućuju neprekidnu interpolaciju između mekog i tvrdog "thresholdinga" (ℓ_1 i ℓ_0 norme). Prema radu ova poopćena regularizacija daje bolji rezultat nego penalizacija ℓ_p -normom. Ovaj algoritam u kombinaciji sa algoritmima [74] i [78], za procjenu matrice miješanja, može biti važan u dekompoziciji spektara mase nelinearnih kemijskih reakcija u HPRJ. No njegov ozbiljan nedostatak je velika računska složenost (što je procjenjeno kroz preliminarna ispitivanja).

U radu [90] je prezentiran algoritam sa neseeparabilnim otežavanjem i regularizacijom sa ℓ_1 i ℓ_2 normama, što je antipod separabilnim algoritmima (težinski koeficijent je funkcija samo pojedinačnih koeficijenata iz prethodne iteracije) kao npr. [88]. Ovaj algoritam spada u klasu algoritama izvedenih iz Bayesove teorije uz pretpostavljene rijetke raspodjele rješenja.

Kao dobar predstavnik ove klase algoritama može se uzeti algoritam [100]. MATLAB kôd algoritma [90] raspoloživ je na: <http://dsp.ucsd.edu/~dwipf/>.

U radu [91] prezentiran je algoritam za simultano rješenje pododređenih sustava linearnih jednadžbi sa zajedničkom matricom sustava (matricom miješanja). Algoritam minimizira kvadrat pogreške sa penalizacijom ℓ_1 -norme vektora koeficijenata. To nije dobro rješenje za pododređeni problem SRS sa značajno koreliranim komponentama, a upravo to se očekuje u dekompoziciji spektara mase bioloških uzoraka. Iz tog razloga algoritam [91] je od indirektnosti, zbog svoje računске efikasnosti, za projekt. MATLAB kôd algoritma [91] raspoloživ je na: <http://ie.technion.ac.il/Home/Users/becka.html>.

U radu [92] prezentirana je detaljna empirijska studija za određivanje optimalne vrijednosti praga s svrhom dobivanja optimalno podešenih iterativnih algoritama sa mekim i tvrdim "thresholding-om". Korisnik ne mora algoritmu dostavljati prethodne informacije o vrijednosti praga ili očekivanom broju nenultih koeficijenata k . No u radu nije prezentirana usporedba sa algoritmima koji koriste regularizaciju ℓ_p -normom, $0 < p \leq 1$. Prema prethodnom iskustvu algoritmi koji koriste regularizaciju koja aproksimira ℓ_0 -normu, kao algoritmi [85], [86], [88], daju najbolju točnost uz malu (u relativnom smislu) računsku složenost. Iz tog razloga algoritam [92] nije ušao u uži izbor. MATLAB kôd algoritma [92] raspoloživ je na: <http://sparselab.stanford.edu/OptimalTuning/main>.

U radu [93] je prezentiran algoritam za rješenje pododređenog sustava linearnih jednadžbi koji koristi regularizaciju ℓ_p -normom, $0 < p \leq 1$, pri čemu se lokalno (u svakoj iteraciji) nekonveksna (konkavna) funkcija zamjenjuje konveksnom. Na rezultatima prikazanim na slici 2 (u radu [93]) vidi se da predloženi algoritam daje bolji rezultat od FOCUSS algoritma. Također je važno napomenuti da je najbolji rezultat dobiven za $p=0.1$, što je u suglasnosti sa rezultatima iz [52], [84] i [88]. Algoritam [93] spada u istu klasu algoritama kao [85] i [88], regularizacija se provodi blizu ℓ_0 -norme vektora koeficijenata. Rad [94] ima teorijsku važnost jer pokazuje da regularizacija ℓ_p -normom, $0 < p < 1$, daje bolje teorijske garancije na točnost rekonstrukcije nego ℓ_1 -norma. Također je numeričkim eksperimentima pokazano da za signale koji nisu jako rijetki i koji su kontaminirani šumom najbolji rezultat daje regularizacija $\ell_{1/2}$ -normom.

U radu [95] prezentiran je algoritam za rješenje pododređenog sustava linearnih jednadžbi temeljen na minimizaciji kvadrata greške i regularizaciji ℓ_1 -normom. Algoritam se temelji na tehnici konveksne optimizacije poznatoj kao metoda unutrašnje točke (*engl. interior point method*). U odnosu na algoritme [85], [88], [100], [101], algoritam [95] ima manju točnost i veću brzinu izvođenja. MATLAB kôd algoritma [95] raspoloživ je na: http://www.stanford.edu/~boyd/l1_ls/.

U radu [96] analizirana je konvergencija minimizacije kvadrata pogreške pri regularizaciji ℓ_1 -normom za slučaj rijetkih signala/riješenja, pri čemu se regularizacijska konstanta adaptira sekvencijalno. Teorijski je dokazano da za rijetke signale ovakav algoritam konvergira. No, glavni nedostatak ovog algoritma, kao i algoritma [97] koji spada u istu klasu metoda, je da se regularizacija temelji na ℓ_1 -normi što nije adekvatno rješenje kada razina rijetkosti signala pada (kao i kada se smanjuje broj jednadžbi/mjerenja). Iz tih razloga prednost se daje algoritmima [85], [88], [100], [101].

U [98] je prezentiran pohlepni algoritam za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi sa ograničenjem na rijetkost. Algoritam kombinira korake selekcije (dodavanje vektora u rječnik) i korekcije (odstranjivanje vektora iz rječnika). Za razliku od drugih algoritama iz klase pohlepnih metoda, algoritam [98] ne zahtjeva kao ulaznu informaciju očekivani broj nenulatih koeficijenata k . Umjesto toga traži se razlika u broju vektora između koraka selekcije i korekcije. Ovaj algoritam je uvršten u uži izbor i podrvgnut usporednoj analizi (vidi rezultate u sekciji 1.4.3).

Algoritam u radu [99] spada u klasu probabilističkih metoda utemeljenih na Bayes-ovskoj teoriji učenja s rijetkim *a priori* raspodjelama. Algoritam je razvijen za simultano rješenje većeg broja sustava linearnih jednadžbi pri čemu se na signale nameće ograničenje koreliranosti po nezavisnoj varijabli. To nije u skladu sa LBM koji se primjenjuje u kemometriji i dekompoziciji višekanalne slike. No, kada se algoritam [99] primjenjuje na svaki sustav jednadžbi posebno može dati vrlo kompetitivne rezultate. U usporednoj analizi algoritam [99] je predstavljen algoritmom [100], koji takođe spada u grupu metoda proizišlih iz Bayes-ove teorije učenja. MATLAB kôd algoritma [99] raspoloživ je na: <http://dsp.ucsd.edu/~zhilin/TMSBL.html>. Rad [100] prezentira Bayes-ov pristup rješenju pododređenog sustava linearnih jednadžbi pri čemu se signal modelira Bernoulli-Gaussovom raspodjelom sa nepoznatima: razinom rijetkosti, k , srednjom vrijednosti i varijancom. Na usporednoj analizi prezentiranoj u radu algoritam postiže bolje rezultate nego npr. algoritam

[85]. Iz toga razloga algoritam [100] je ušao u uži izbor za usporednu analizu. MATLAB kôd algoritma [100] raspoloživ je na: <http://www2.ece.ohio-state.edu/~vilaj/EMBGAMP/EMBGAMP.html>. Algoritam [101] je vrlo sličan algoritmu [100], čak su ih razvili isti autori. Razlika je u modeliranju rijetke raspodjele vektora koeficijenata. U [101] se koristi mješavina Gaussovih raspodjela. MATLAB kôd algoritma [101] raspoloživ je na: <http://www2.ece.ohio-state.edu/~vilaj/EMGMAMP/EMGMAMP.html>.

U [102] je prezentiran algoritam koji iterativno (kroz proces selekcije) povećava broj nenultih koeficijenata u vektoru rješenja. U radu se tvrdi da ovaj algoritam daje bolji rezultat od algoritma [88]. No usporedna analiza pokazuje da je njegova točnost usporediva onoj iz [88], a ponekad i slabija. MATLAB kôd algoritma [102] raspoloživ je na: <http://www.caam.rice.edu/~optimization/L1/ISD/>.

U [103] je prezentirana modifikacija *orthogonal matching pursuit (OMP)* algoritma kroz tzv. A^* strategiju pretraživanja indeksa nenultih koeficijenata vektora rješenja. U radu je prezentirana usporedna analiza sa klasičnim pohlepnim algoritmima, no poznato je (vidi također sekciju 1.4.3.) da algoritmi koji se oslanjaju na regularizaciju aproksimacijom ℓ_0 -norme daju bitno veću točnost kada broj nenultih koeficijenata raste ili broj jednadžbi opada. Iz tog razloga prednost se daje algoritmima [85], [88], [100], [101]. MATLAB kôd algoritma [103] raspoloživ je na: <http://myweb.sabanciuniv.edu/karahanoglu/publications/>.

U [104] je prezentiran algoritam za minimizaciju kvadrata pogreške sa regularizacijom ℓ_p -normom, $0 < p < 1$, koristeći operaciju "thresholding-a". Pokazano je da je optimalan iznos norme ovisan o odnosu signal-šum i omjeru broja jednadžbi i broja nepoznanica. Za $\text{SNR} \approx 0\text{dB}$ i omjer ≈ 0.2 važi $p > 0.75$. Za $\text{SNR} \approx 0\text{dB}$ i omjer ≈ 0.5 važi $p = 0.8$. Za $\text{SNR} \geq 7\text{dB}$ važi $p < 0.4$. Ovi rezultati su važan putokaz u selekciji optimalne norme u algoritmima kao [88].

Konačno OMP algoritam [105], [106], kao "klasičan" predstavnik pohlepnih algoritama koji iterativno odabire indekse nenultih koeficijenata je ušao u uži izbor. Njegov nedostatak je da zahtjeva informaciju o broju nenultih koeficijenata. No, informacija o broju

nenultih koeficijenata ne mora biti precizna, tj. OMP daje dobar rezultat kada se rijetkost precijeni (potrebno je nešto više iteracija). Ograničenje nenegativnosti se u OMP algoritam ugrađuje (vrlo) jednostavno.

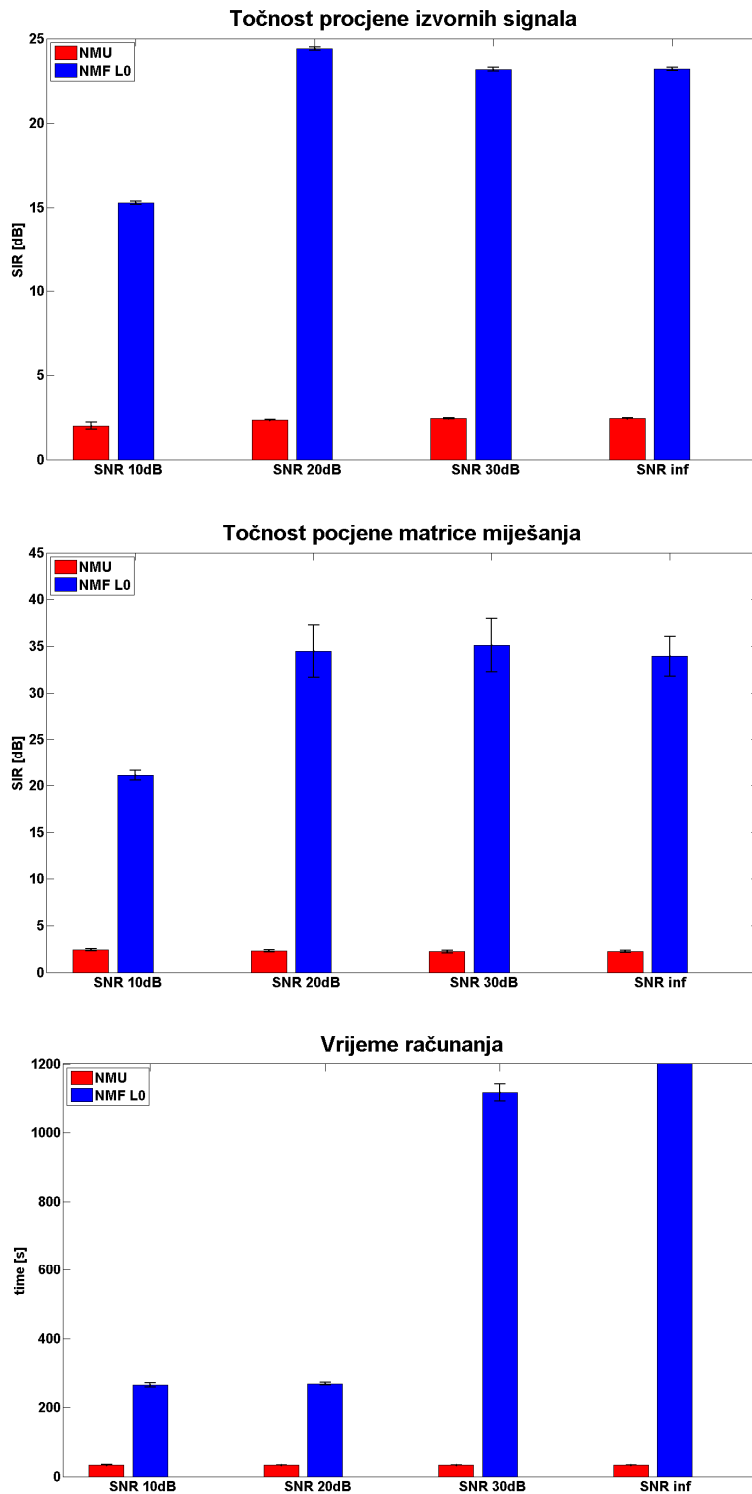
1.4 Rezultati usporedne analize sa diskusijom

Temeljem opisa algoritama i diskusije prezentirane u sekcijama 1.3.1., 1.3.2. i 1.3.3. za svaku skupinu odabrani su algoritmi koji najadekvatnije odgovaraju zahtjevima ciljeva projekta, a koji se odnose na dekompozicije RGB slike histopatološkog uzorka i dekompozicije spektara mase nelinearnih kemijskih reakcija. U oba slučaja dekompozicija se provodi faktorizacijom LBM u induciranom HPRJ, vidi sekciju 2. Scenariji pod kojima je provedena usporedna analiza odabranih algoritama prethodno su opisani u sekciji 1.2.

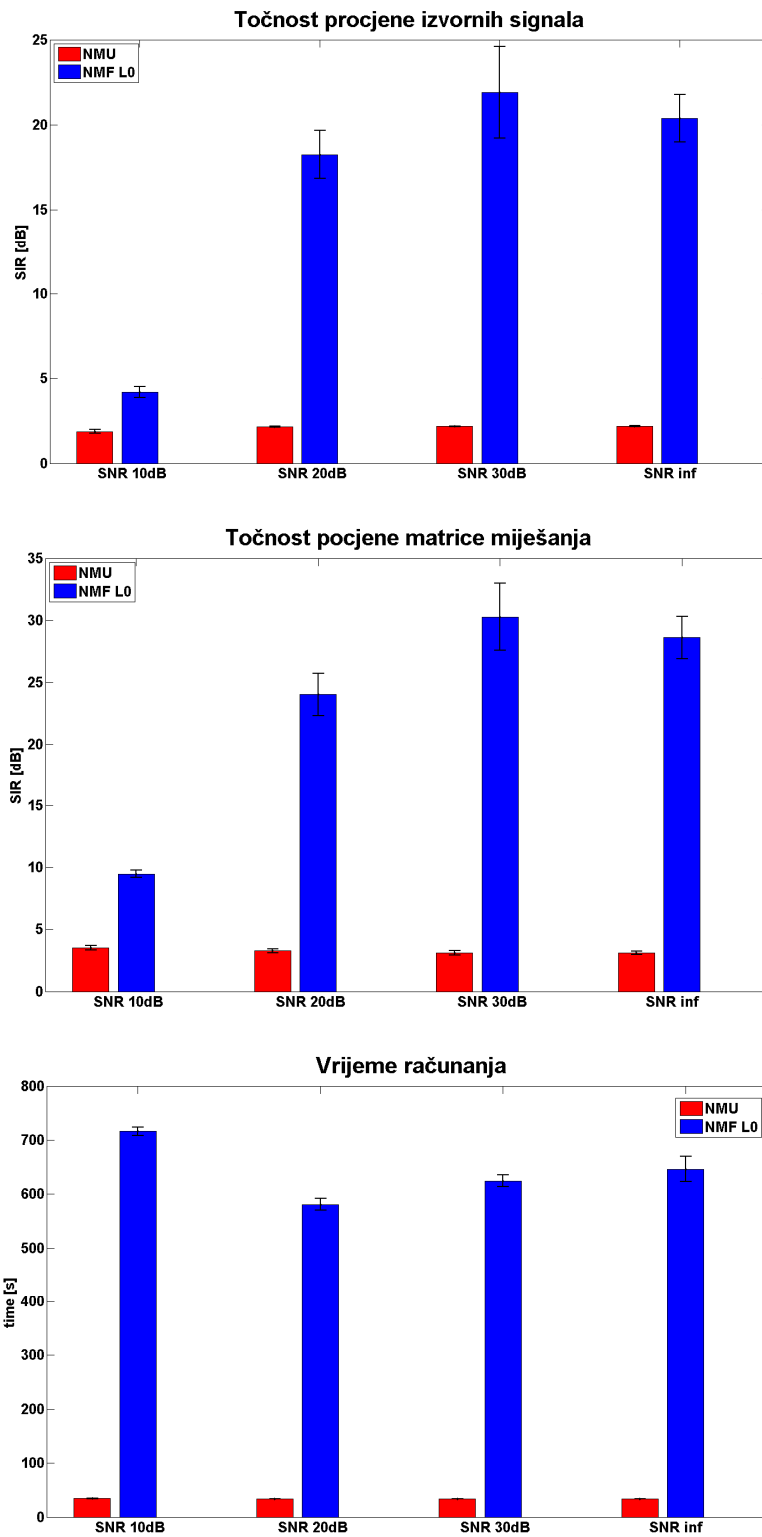
1.4.1. Algoritmi za istovremenu faktorizaciju matrice \mathbf{X} u matrice \mathbf{A} i \mathbf{S}

Sukladno analizi provedenoj u sekciji 1.3.1. za usporednu analizu su odabrani NMU algoritam [55] i NMF_L0 algoritam [67]. Također, je potrebno voditi računa da algoritam [73] može biti koristan ako dimenzija induiranog HPRJ nije veća od 8. Slike 1.4.1.1., 1.4.1.2. i 1.4.1.3. prikazuju točnost procjene matrice izvornih signala \mathbf{S} , (D1.4), matrice miješanja \mathbf{A} , (D1.3) i vrijeme računanja za NMU i NMF_L0 algoritme na problemu NSRS sa $N=100$, $M=250$ i $k=10, 30$ i 50 . SNR u dB je nezavisna varijabla. Kako je problem NSRS bio simuliran bilo je moguće NMF_L0 algoritmu dati kao ulaznu informaciju optimalnu vrijednost za k . Iz toga razloga je točnost NMF_L0 algoritma bitno bolja od točnosti NMU algoritma u većini simuliranih scenarija. Taj zaključak se mijenja kada razina rijetkosti izvornih signala pada, tj. raste broj nenultih vrijednosti izvornih signala, posebno kada je niska razina odnosa signal-šum. Ipak, NMF_L0 algoritam ima značajno veće vrijeme računanja za isti NSRS problem nego NMU algoritam. Kao paradoks se pojavljuje situacija da je vrijeme računanja NMF_L0 algoritma jako veliko kada nema šuma i kada su signali jako rijetki. To je posljedica algoritma za fazu rijetkog kodiranja koji pokušava naći opis podataka rijetkom dekompozicijom, a koji su već opisani rijetkom dekompozicijom. Taj "problem" se može riješiti dodavanjem umjetnog šuma (npr. $SNR=50$ dB). Kao zaključak predlaže se uporaba NMF_L0 algoritma u situacijama kada se može pouzdano procijeniti maksimalan broj nenultih vrijednosti izvornih

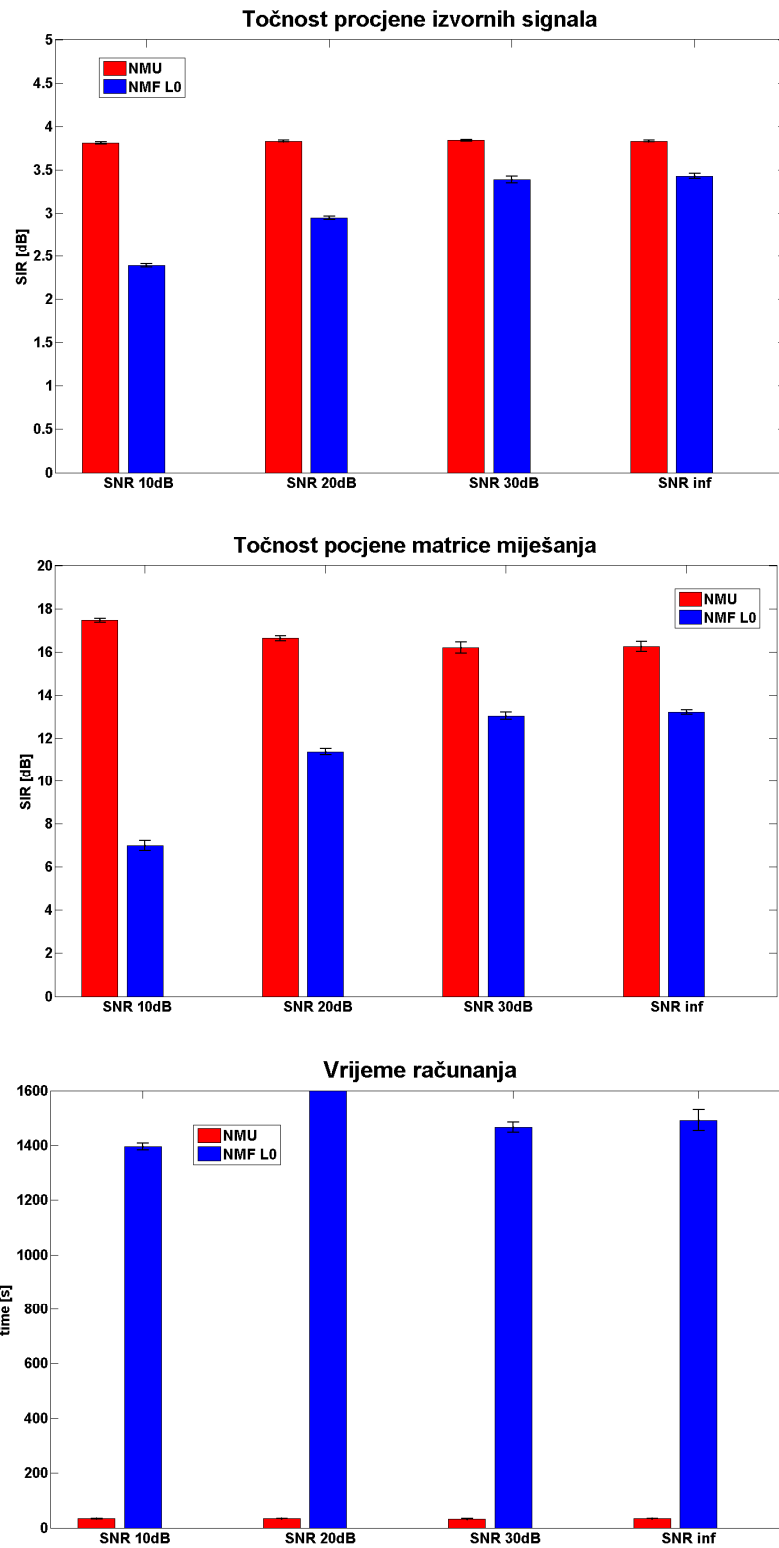
signala k . Inače se NMF_L0 algoritam treba izvesti nekoliko puta za različite vrijednosti parametra k . Predlaže se uporaba NMU algoritma za scenarij u kojem nije moguća pouzdana procjena broja nenultih vrijednosti izvornih signala k . Rezultat dobiven NMU algoritmom može poslužiti kao orjentir u podešavanju parametra k kod NMF_L0 algoritma.



Slika 1.4.1.1. Točnost procjene matrice S , (D1.4), matrice A , (D1.3) i vrijeme računanja za NMU i NMF_L0 algoritme na problemu NSRS sa $N=100$, $M=250$ i $k=10$. SNR u dB je nezavisna varijabla.



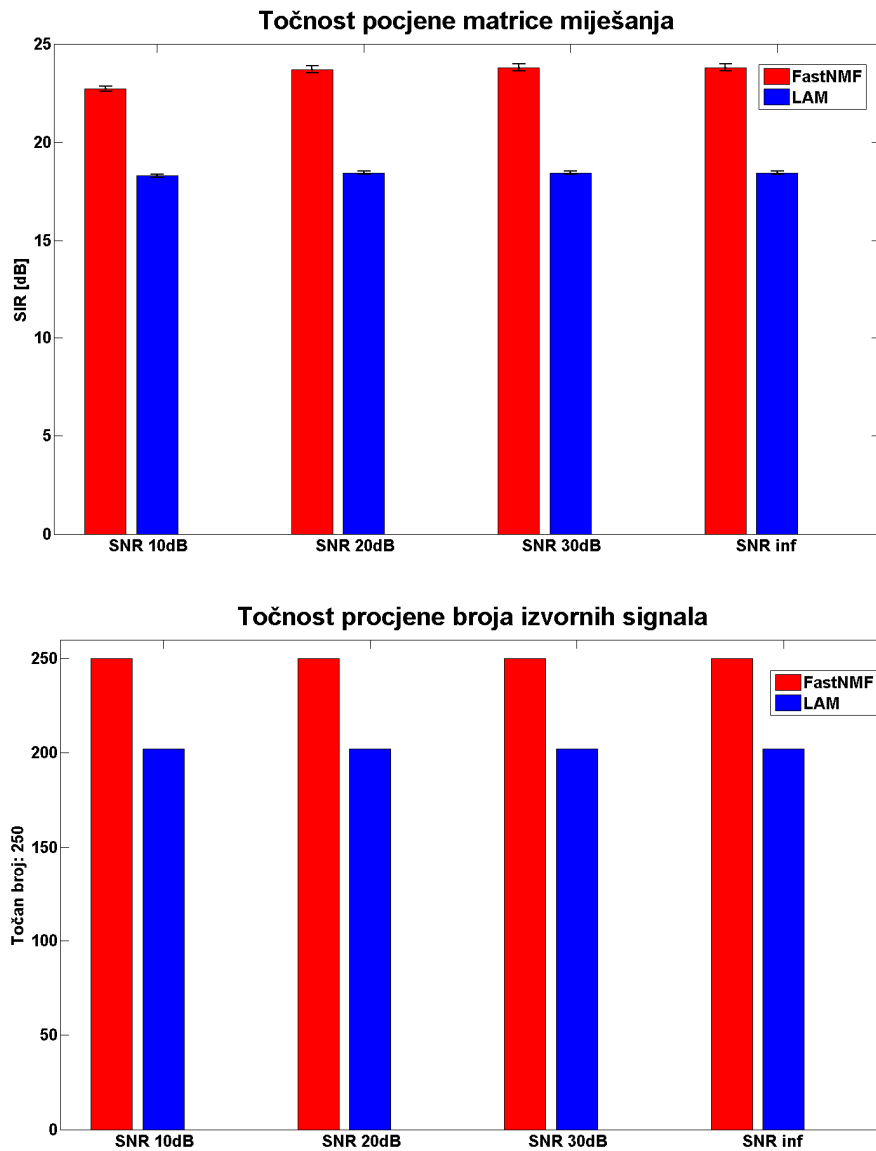
Slika 1.4.1.2. Točnost procjene matrice \mathbf{S} , (D1.4), matrice \mathbf{A} , (D1.3) i vrijeme računanja za NMU i NMF_LO algoritme na problemu NSRS sa $N=100$, $M=250$ i $k=30$. SNR u dB je nezavisna varijabla.



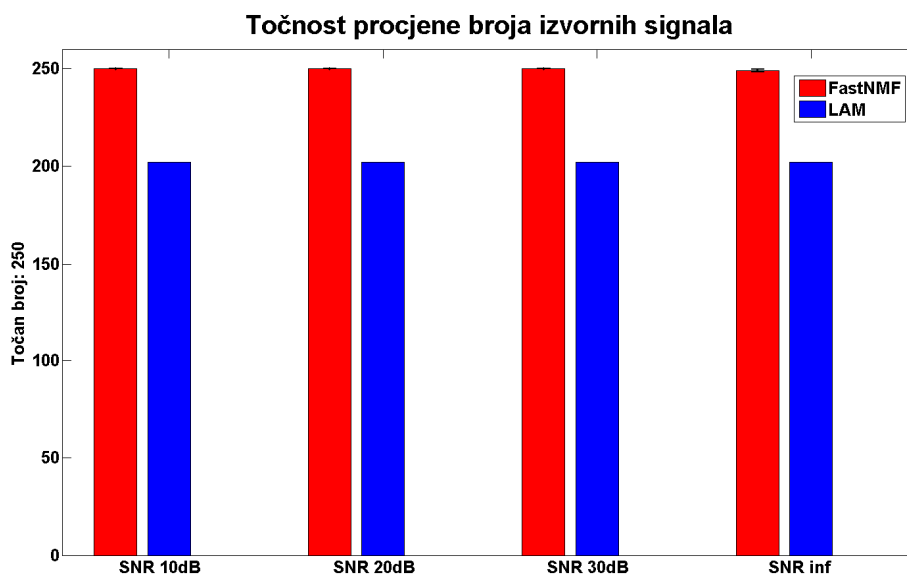
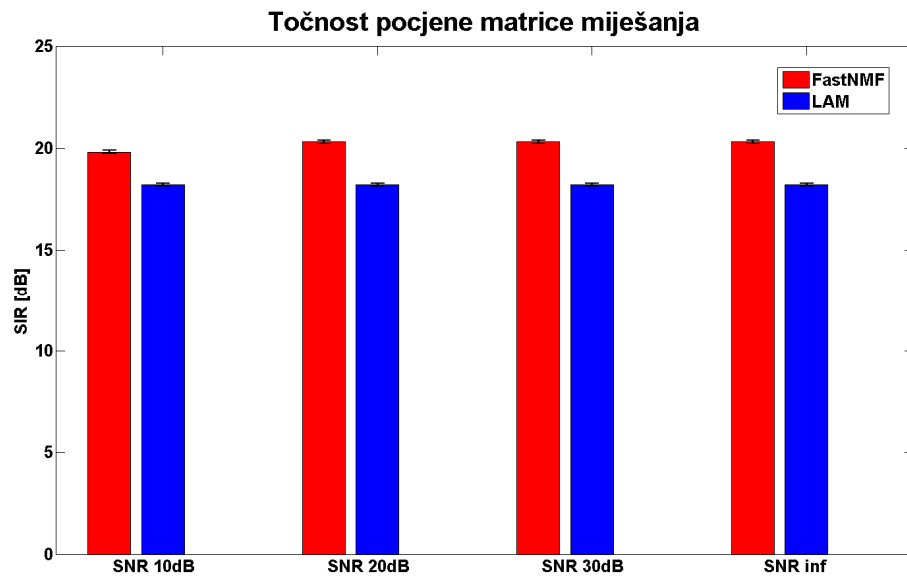
Slika 1.4.1.3. Točnost procjene matrice \mathbf{S} , (D1.4), matrice \mathbf{A} , (D1.3) i vrijeme računanja za NMU i NMF_LO algoritme na problemu NSRS sa $N=100$, $M=250$ i $k=50$. SNR u dB je nezavisna varijabla.

1.4.2. Algoritmi za procjenu matrice \mathbf{A} iz matrice \mathbf{X}

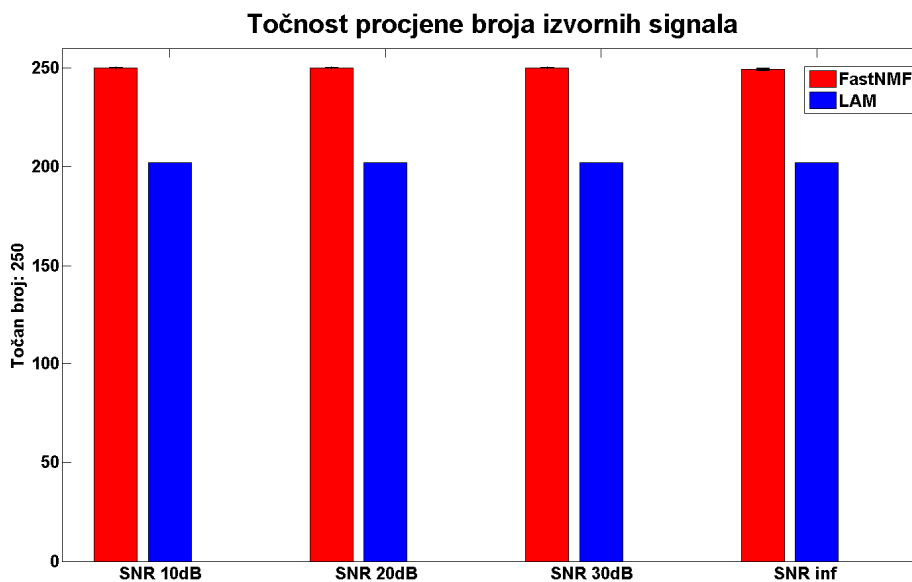
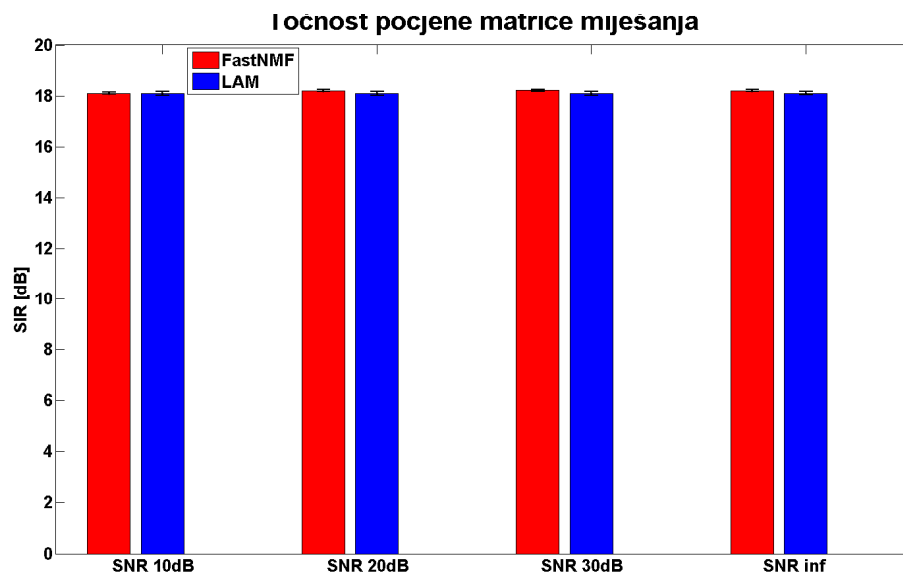
Sukladno analizi provednoj u sekciji 1.3.2. za usporednu analizu su odabrani BrziFNM algoritam [74] i LAM algoritam [78]. Također, potrebno je voditi računa da algoritam [83] može biti koristan u procjeni broja izvornih signala (komponentata) ako se to pokaže potrebnim. Slike 1.4.2.1., 1.4.2.2. i 1.4.2.3. prikazuju točnost procjene matrice miješanja \mathbf{A} , (D1.3) i točnost procjene broja izvornih signala za BrziFNM i LAM algoritme na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$ i $k=10, 30$ i 50 . SNR u dB je nezavisna varijabla. Vrijeme računanja prikazano je na slici 1.4.2.4. Prezentirani rezultati sugeriraju slijedeće zaključke: (i) za nižu razinu korelacije (preklapanja) među signalima (moguće je izolirati približno "čiste uzorke") BrziFNM algoritam daje točniju procjenu matrice miješanja i broja izvornih signala od LAM algoritma i to uz znatno manju računsku složenost; (ii) kada razina korelacije (preklapanja) među izvornim signalima raste točnost u procjeni matrice miješanja između dva algoritma se izjednačava. Iz ovoga se može preporučiti da se BrziFNM algoritam [74] treba (može) koristiti pri dekompoziciji RGB slike u HPRJ, gdje se zbog visoke prostorne rezolucije može očekivati da je uvjet "približno čistih uzoraka" zadovoljen. Kada se radi o dekompoziciji spektara mase, posebice bioloških uzoraka, preporuka je da se koristi LAM algoritam [78].



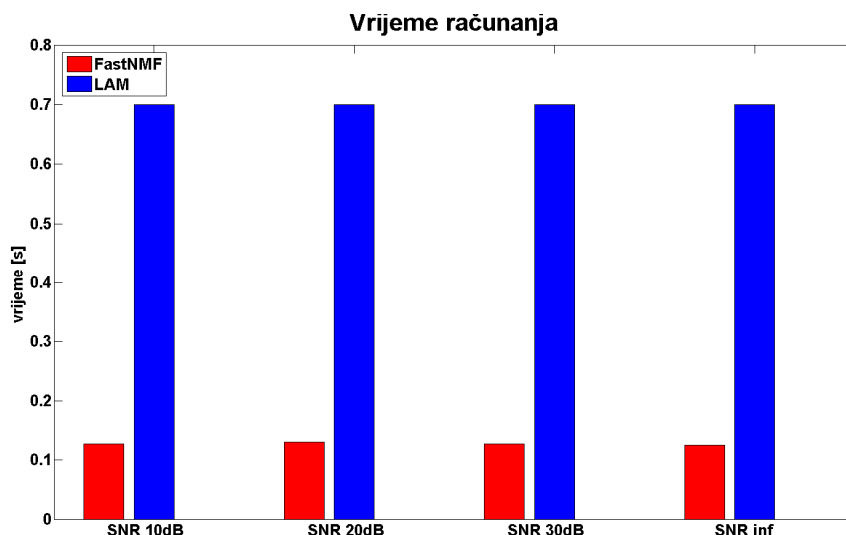
Slika 1.4.2.1. Točnost procjene matrice \mathbf{A} , (D1.3) i točnost procjene broja izvornih signala za BrziFNM i LAM algoritme na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$ i $k=10$. SNR u dB je nezavisna varijabla.



Slika 1.4.2.2. Točnost procjene matrice \mathbf{A} , (D1.3) i točnost procjene broja izvornih signala za BrziFNM i LAM algoritme na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$ i $k=30$. SNR u dB je nezavisna varijabla.



Slika 1.4.2.3. Točnost procjene matrice \mathbf{A} , (D1.3) i točnost procjene broja izvornih signala za BrziFNM i LAM algoritme na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$ i $k=50$. SNR u dB je nezavisna varijabla.



Slika 1.4.2.4. Vrijeme računanja BrziFNM i LAM algoritam na problemu NSRS sa $N=250$, $M=250$. Vrijeme računanja je invarijantno u odnosu na k . SNR u dB je nezavisna varijabla.

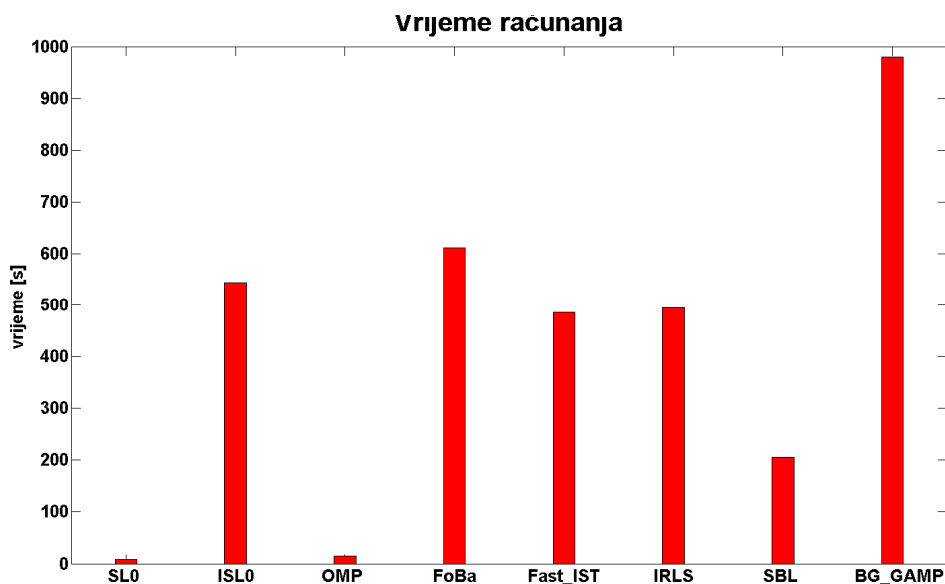
1.4.3. Algoritmi za rješavanje pododređenog sustava linearnih jednadžbi

Sukladno analizi provedenoj u sekciji 1.3.3. za usporednu analizu su odabrani slijedeći algoritmi: SLO [85], ISL0 [86], IRLS [88], Fast_IST [91], SBL [99], BG_GAMP [100], OMP [105]. Slike 1.4.3.1. i 1.4.3.2. prikazuju točnost procjene vektora izvornih signala \mathbf{s} , i vrijeme računanja na problemu NSRS sa $N=350$, $M=1000$, $T=1000$ i $k=100$, za problem bez šuma (slika 1.4.3.1.) i problem sa šumom, SNR=10 dB (slika 1.4.3.2). Točnost aproksimacije računa se kao signal-to-interference ratio (SIR) u dB prema (D.1.7):

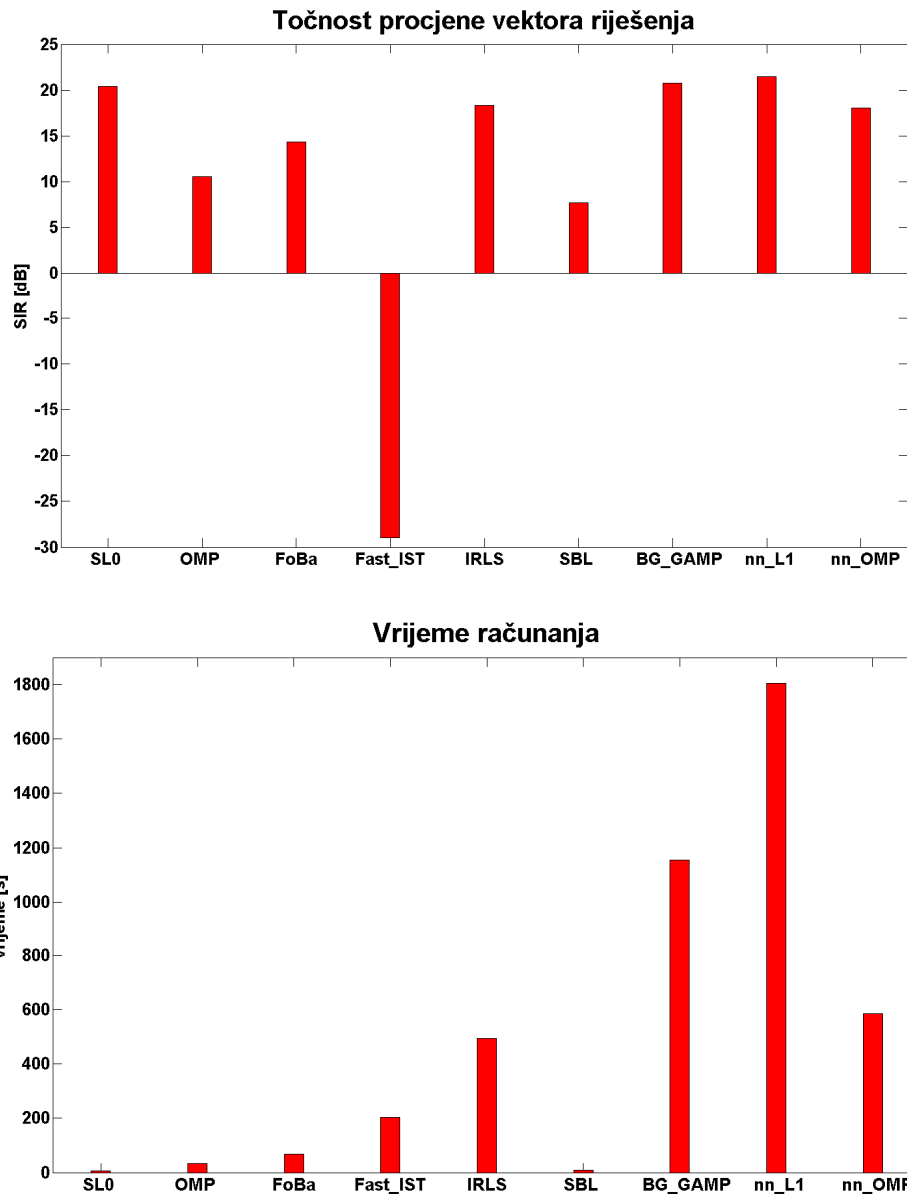
$$SIR = 20 \log_{10} \frac{\|\mathbf{s}\|}{\|\mathbf{s} - \hat{\mathbf{s}}\|} \quad (\text{D.1.7})$$

Iz prezentiranih rezultata proizlaze slijedeći zaključci: (i) najveću točnost postižu algoritmi SLO, ISL0 i IRLS regulariziran sa $\ell_{0.1}$ -normom. To je u skladu sa analizom prezentiranom u sekciji 1.3.3. SLO ima daleko najmanju računsku složenost. S obzirom na visoku točnost računaska složenost IRLS algoritma može biti prihvatljiva. Na problemu NSRS s izraženim aditivnim šumom (SNRR=10dB) BG_GAMP algoritam i modifikacija algoritma

regulariziranog ℓ_1 -normom sa ograničenjem nenegativnosti, NN_L1 [107], pokazuju također kompetitivnu točnost. Slijedom prezentiranih rezultata algoritmi SL0, IRLS, BG_GAMP i NN_L1 su podvrgnuti dodatnoj usporednoj analizi. U prvom scenariju problem NSRS predstavljen je sa $N=350$, $M=1000$, $T=1$, $k \in \{100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200\}$, $\text{SNR} \in \{10, 20, 30\}$ dB. Točnost procjene vektora \mathbf{s} , (D1.7), i vrijeme računanja dani su u tablici 1.4.3.1. U drugom scenariju problem NSRS predstavljen je sa $N \in \{200, 250, 300, 350, 400, 450, 500\}$, $M=1000$, $T=1$, $k=100$, $\text{SNR} \in \{10, 20, 30\}$ dB. Točnost procjene vektora \mathbf{s} , (D1.7), i vrijeme računanja dani su u tablici 1.4.3.2. Iz prezentiranih rezultata prozlaže slijedeći zaključci: (i) SL0 i IRLS ($p=0.1$) algoritmi pokazuju najbolju točnost kada razina rijetkosti vektora koeficijenata pada uz istovremeno malu računsku složenost; (ii) približno isti zaključak kao (i) važi i kada opada broj jednadžbi (mjerenja). Slijedom navedenog preporuka je da se SL0 [85] i IRLS ($p \leq 0.5$) [88] algoritmi koriste u kombinaciji sa BrziFNM algoritmom [74] pri dekompoziciji RGB slike u HPRJ, gdje se zbog visoke prostorne rezolucije može očekivati da je uvjet "približno čistih uzoraka" zadovoljen. Kada se radi o dekompoziciji spektara mase u HPRJ, posebice bioloških uzoraka, preporuka je da se SL0 [85] i IRLS ($p \leq 0.5$) [88] algoritmi koriste u kombinaciji sa LAM algoritmom [78].



Slika 1.4.3.1. Točnost procjene vektora \mathbf{s} , (D1.7), i vrijeme računanja za algoritme: SLO [85], ISL0 [86], IRLS [88], Fast_IST [91], SBL [99], BG_GAMP [100], OMP [105]. Problem NSRS: $N=350$, $M=1000$, $T=1000$ i $k=100$. Nema aditivnog šuma.



Slika 1.4.3.2. Točnost procjene vektora s , (D1.7), i vrijeme računanja za algoritme: SLO [85], ISLO [86], IRLS [88], Fast_IST [91], SBL [99], BG_GAMP [100], OMP [105]. Problem NSRS: $N=350$, $M=1000$, $T=1000$ i $k=100$. Aditivni šum sa $SNR=10$ dB.

Tablica 1.4.3.1. Točnost procjene vektora s , SIR - (D.1.7) u dB, i vrijeme računanja u sekundama za algoritme SL0, NN_L1, BG_GAMP, IRLS. Problem NSRS karakteriziran je sa: $N=350$, $M=1000$, $T=1$, $k \in \{100, 110, 120, 130, 140, 150, 160, 170, 180, 190, 200\}$, $\text{SNR} \in \{10, 20, 30\}$ dB.

k	100	110	120	130	140	150
Algoritam, SNR	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme
SL0, 10	6.37 0.09	5.90 0.08	4.83 0.09	4.33 0.09	3.70 0.09	3.03 0.09
IRLS, 10	5.71 0.01	5.43 1.42	4.87 0.00	4.54 0.00	4.08 0.00	3.64 0.00
NN_L1, 10	7.04 1.79	6.40 1.95	5.60 1.78	5.06 1.78	4.32 1.80	3.94 1.80
BG_GAMP 10	6.49 1.65	5.85 0.00	5.00 1.85	4.40 1.88	4.10 1.89	3.61 1.87
SL0, 20	18.20 0.09	16.90 0.09	14.56 0.09	12.74 0.09	10.52 0.09	8.84 0.09
IRLS, 20	16.60 0.00	16.22 0.00	15.41 0.00	14.58 0.00	13.53 0.00	12.38 0.00
NN_L1, 20	12.01 1.89	10.36 1.87	8.63 1.88	7.39 1.85	6.15 1.85	5.25 1.85
BG_GAMP 20	12.74 1.59	11.23 1.71	9.83 1.79	9.16 1.75	8.44 1.77	7.62 1.81
SL0, 30	29.11 0.09	27.88 0.09	25.64 0.09	21.18 0.10	16.01 0.09	11.27 0.10
IRLS, 30	27.37 0.00	26.96 0.00	26.66 0.00	26.23 0.00	25.57 0.00	24.27 0.00
NN_L1, 30	12.88 1.91	11.16 1.90	9.27 1.88	7.62 1.86	6.76 1.85	5.35 1.87
BG_GAMP, 30	14.19 1.68	12.69 1.77	11.51 1.79	10.02 1.75	9.21 1.75	8.47 187
k	160	170	180	190	200	
Algoritam, SNR	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	
SL0, 10	2.63 0.10	2.27 0.09	1.75 0.10	1.59 0.10	1.28 0.11	
IRLS, 10	3.23 0.00	2.98 0.00	2.54 0.00	2.36 0.00	2.11 0.00	
NN_L1, 10	3.28 1.83	2.81 1.82	2.41 1.83	2.02 1.82	1.71 1.82	
BG_GAMP, 10	3.13 2.01	2.85 1.99	2.68 2.06	2.81 2.06	2.94 2.12	
SL0, 20	7.17 0.10	5.89 0.10	4.78 0.10	4.05 0.10	3.33	
IRLS, 20	10.91 0.00	9.66 0.00	8.26 0.00	7.15 0.00	5.76 0.11	
NN_L1, 20	4.29 1.88	3.68 1.85	3.22 1.86	2.57 1.85	2.00 0.00	
BG_GAMP, 20	7.04 1.94	6.74 1.99	6.55 1.96	6.30 2.09	6.09 1.85	

SL0, 30	8.97 0.09	6.70 0.10	5.61 0.09	4.57 0.11	3.63 0.11	
IRLS, 30	22.08 0.00	17.57 0.00	13.63 0.00	9.93 0.00	7.24 0.01	
NN_L1, 30	4.71 1.88	3.76 1.88	3.16 1.86	2.75 1.86	2.15 1.86	
BG_GAMP, 30	8.04 1.90	7.57 2.04	7.54 1.96	7.10 2.14	6.47 2.10	

Tablica 1.4.3.2. Točnost procjene vektora s , SIR - (D.1.7) u dB, i vrijeme računanja u sekundama za algoritme SL0, NN_L1, BG_GAMP, IRLS. Problem NSRS karakteriziran je sa: $N \in \{200, 250, 300, 350, 400, 450, 500\}$, $M=1000$, $T=1$, $k=100$, $SNR \in \{10, 20, 30\}$ dB.

N	200	250	300	350	400	450	500
Algoritam, SNR	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme	SIR vrijeme
SL0, 10	1.25 0.07	2.77 0.08	4.69 0.10	6.37 0.13	7.50 0.16	8.08 0.20	8.53 0.25
NN_L1, 10	1.12 1.14	3.05 1.42	5.42 1.79	6.97 2.29	8.40 3.02	9.30 3.74	10.23 4.59
BG_GAMP, 10	2.42 1.97	2.88 1.95	4.75 2.41	6.50 2.67	8.01 2.62	9.58 2.75	10.51 3.02
IRLS, 10	1.64 0.01	3.28 0.00	4.88 0.00	5.84 0.00	6.24 0.00	6.29 0.00	6.18 0.00
SL0, 20	2.41 0.06	6.46 0.08	13.36 0.10	18.30 0.13	19.89 0.16	20.53 0.20	20.79 0.24
NN_L1, 20	1.37 1.12	4.36 1.45	8.24 1.88	11.63 2.44	14.07 3.26	16.06 3.97	17.33 4.81
BG_GAMP, 20	3.91 1.64	6.94 2.00	10.01 2.30	12.53 2.66	14.66 2.93	16.84 3.17	18.71 3.42
IRLS, 20	3.45 0.00	10.66 0.00	15.35 0.00	16.52 0.00	16.74 0.00	16.81 0.00	16.50 0.00
SL0, 30	2.80 0.06	7.76 0.08	20.41 0.11	30.05 0.13	30.83 0.16	31.40 0.21	31.30 0.25
NN_L1, 30	1.39 1.09	4.38 1.46	8.83 1.93	12.73 2.43	16.03 3.28	18.35 4.08	20.19 4.92
BG_GAMP, 30	4.35 1.63	7.81 1.95	11.10 2.47	14.59 2.83	18.85 3.20	23.05 3.57	27.25 3.57
IRLS, 30	4.20 0.00	20.57 0.00	27.03 0.00	27.36 0.00	27.13 0.00	26.97 0.00	26.60 0.01

Dodatak 2: Algoritmi za nelinearan pododređeni problem SRS

Problem nelinearnog bezmemorijskog slijepog razdvajanja signala definiran je nelinearnim bezmemorijskim modelom (NBM):

$$\mathbf{X} = F(\mathbf{S}) \quad (\text{D.2.1})$$

gdje je F nepoznata viševarijabilna funkcija (preslikavanje): $F: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}^N$, koja djeluje na svaku realizaciju: $\{\mathbf{x}_t = F(\mathbf{s}_t)\}_{t=1}^T$. Pri tome $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{M \times T}$ predstavlja nepoznatu matricu izvornih signala koji odgovaraju redcima matrice \mathbf{S} . Problem nelinearnog slijepog razdvajanja signala sastoji se u procjeni matrice izvornih signala \mathbf{S} imajući na raspolaganju samo matricu podataka (mjerjenja) \mathbf{X} . Pri tome je, $F(\mathbf{s}_t) = [f_1(\mathbf{s}_t) \dots f_N(\mathbf{s}_t)]^T$, tako da je $\{f_n: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}\}_{n=1}^N$ pri čemu i dalje važi $M > N$ i $K \geq 1$, tj. nelinearan problem SRS (D.2.1) je pododređen sa statistički zavisnim (preklapajućim) izvornim signalima. Dodatno, zbog primjena koje se razmatraju u projektu, na mjerjenja \mathbf{X} i skrivene varijable \mathbf{S} primjenjuje se ograničenje nenegativnosti: $\mathbf{X} \geq \mathbf{0}$, $\mathbf{S} \geq \mathbf{0}$. Za rješenje nelinearnog problema SRS (D.2.1) postoji bitno manji broj algoritama nego je to slučaj za linearan problem (D.1.1). Taj broj se dodatno smanjuje ako je nelinearan problem SRS (D.2.2) pododređen. To je razlog zbog kojeg kvantitativna usporedna analiza, na sintetičkim i/ili eksperimentalnim podacima, algoritama za problem nelinearnog bezmemorijskog SRS nije moguća na način kako je to bilo moguće za linearan pododređeni bezmemorijski problem SRS (D.1.1). Naime, kako je vidljivo iz sekcije 2.1, "state-of-the-art" algoritmi za nelinearan bezmemorijski problem SRS imaju, gledano iz perspektive projekta, barem jedan od slijedećih nedostataka: (i) zahtjevaju da je broj mjerjenja N veći ili jednak od nepoznatog broja izvornih signala M ; (ii) pretpostavljaju *a priori* znanje, u obliku parametarskog modela, o nelinearnostima $\{f_n: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}\}_{n=1}^N$; (iii) ne uvažavaju ograničenje nenegativnosti rješenja što prirodno proizlazi iz primjena od interesa u projektu; (iv) pretpostavljaju da su izvorni signali statistički nezavisni (ortogonalni) i ponekad pojedinačno korelirani. Prema najboljim saznanjima voditelja projekta postojeći algoritmi za problem nelinearnog slijepog razdvajanja signala nisu u stanju riješiti pododređeni problem sa znatno većim brojem izvornih signala od broja mjerjenja (što onda implicira koreliranost izvornih signala). Kako je to pokazano u doprinosu ostvarenom tijekom prve godine projekta, vidi rad [108], prethodni zaključak važi i za linearan pododređeni problem SRS ograničen

nenegativnosti izvornih signala. Zbog toga je u sklopu projekta predložen razvoj i primjena metoda nelinearnog SRS koja nelinearan problem (D.2.1) transformira u linearan:

$$\Psi(\mathbf{X}) = \mathbf{A}\bar{\mathbf{S}} \quad (\text{D.2.2})$$

gdje su: $\Psi(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}_{0+}^{\bar{N} \times T}$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}_{0+}^{\bar{N} \times \bar{M}}$, $\bar{\mathbf{S}} \in \mathbb{R}_{0+}^{\bar{M} \times T}$, pri čemu je $\bar{N} \gg N$ i $\bar{M} \gg M$. $\Psi(\mathbf{X}) = [\Psi(\mathbf{x}_1) \dots \Psi(\mathbf{x}_T)]$ je nelinearno preslikavanje koje inducira HPRJ. Primjenom ograničenja rijetkosti izvornih signala, koje važi za razmatrane primjene u kemometriji i patologiji, nelinearan problem SRS (D.2.1) svodi se na rijetkošću i nenegativnošću regulariziranu faktorizaciju (D.2.2) pri čemu su izvorni signali $\{\mathbf{s}_m\}_{m=1}^M$ sadržani u izdvojenim signalima $\{\bar{\mathbf{s}}_m\}_{m=1}^{\bar{M}}$. Prepoznavanje izvornih signala temelji se na pretpostavci o postojanju tzv. ekspertnog znanja u obliku biblioteke čistih komponenata (kada se radi o spektrometriji mase)⁸ ili morfologiji (kada se radi o slici histopatološkog uzorka). Budući da algoritmi za pododređeni problem nelinearnog bezmemorijskog SRS razvijeni za primjene u kemometriji i patologiji predstavljaju predmet zaštićenog intelektualnog vlasništva, za što se očekuje podnošenje patentnih prijava, njihov detaljan opis biti će objavljen u godišnjem izvještaju za drugu ili treću godinu projekta, te u znanstvenim publikacijama koje će proizići iz projekta, a nakon što budu podnesene patentne prijave.

⁸ Identifikacija minerala nenadziranom analizom (dekompozicijom) hiperspektralne slike u daljinskom izviđanju temelji se na usporebi procjenjenih spektralnih profila sa onima spremljenim u biblioteci, npr. ASTER spectral library - <http://speclib.jpl.nasa.gov/>. U studijama biomarkera identifikacija izdvojenih analita (čistih komponenata) često se svodi na usporedbu sa bibliotekom čistih komponenata, [109, 110]. Npr. biblioteka *National Institute of Standards and Technology* sadrži više od 800,000 spektara mase koji korespondiraju sa više od 600,000 spojeva (metabolita), [110].

2.1 Pregled sa diskusijom algoritama za nelinearan bezmemorijski problem SRS

U radu [111] prezentiran je FNM algoritam u HPRJ koji je induciran polinomskom jezgrom. Problem je oblika (D.2.2.). Matrica podataka se preslikava u HPRJ nelinearnim preslikavanjem koje može biti čak i beskonačno dimenzionalno. Pri minimizaciji razlike između podataka preslikanih u HPRJ i modela kao mjera koristi se Froebeniusova norma. To omogućava formulaciju problema FNM u HPRJ preko tzv. implicitnih preslikavanja na način istovjetan onome kako se eksplicitna preslikavanja supstituiraju implicitnim u nelinearnoj regresiji i klasifikaciji. U slučaju rada [111] kao implicitno preslikavanje koristi se polinomska jezgra. Osim ograničenja nenegativnosti nikakvo drugo ograničenje se ne koristi prilikom faktorizacije. To nije dovoljno da se osigura suštinski jedinstvena faktorizacija u problemu tipa (D.2.2). Kako se u sklopu projekta razvijaju algoritmi koji u faktorizaciji problema (D.2.2) koriste implicitna preslikavanja temeljena na različitim jezgrama, te uz ograničenje nenegativnosti koriste i ograničenje rijetkosti primjena algoritma predložen u [111] nije od interesa za projekt. Njegov dodatni, barem teorijski, nedostatak je u tome da za razliku od npr. Gaussove jezgre, polinomska jezgra inducira siromašniji Hilbertov funkcijski prostor. Još jedan praktično važan nedostatak algoritma [111] je da je predviđen i evaluiran na problemu raspoznavanja lica, što je problem klasifikacije, a ne na problemu SRS.

FNM algoritam prezentiran u [112] također se izvodi u HPRJ faktorizacijom jezgrene matrice, pri čemu se bazni vektori identificiraju u HPRJ kroz sam FNM algoritam. Kao i slučaju algoritma [111], i ovdje je nedostatak da se na izvorne signale (faktore) osim nenegativnosti ne primjenjuju dodatna ograničenja. Kao i u slučaju algoritma [111] i ovaj algoritam je demonstriran na problemu klasifikacije ali ne i na problemu SRS. Iz razloga ekvivalentnih onima za algoritam [111], algoritam [112] nije od interesa za primjene predviđene u projektu.

U radu [113] ponovo je prezentiran FNM algoritam u HPRJ. Nenegativnost rješenja osigurana je kroz nenegativnu projekciju što, za razliku od algoritma [111], omogućava primjenu proizvoljnih jezgrenih funkcija. Važna značajka FNM algoritma [113] je da se bazna matrica uči iterativno u tzv. ulaznom (originalnom) prostoru razapetom empirijskim uzorcima, vidi jednadžbu (19), dok se matrica koeficijenata (izvornih signala) uči u HPRJ. Upotreba Gaussove jezgre omogućava izvođenje multiplikativnih algoritama adaptacije bazne matrice i matrice koeficijenata, vidi jednadžbe (40) i (47). Nedostatak ovog algoritma je isti kao kod algoritama [111, 112]: osim nenegativnosti nikakvo drugo ograničenje se ne koristi

pri faktorizaciji problema tipa (D.2.2), pri čemu se kao mjera sličnosti/razlike između podataka i modela koristi Froebeniusova norma. Dakle, ova metoda također nije primjenjiva na problem SRS tipa (D.2.1)/(D.2.2).

U radu [114] razvije je FNM algoritam u HPRJ, a čiji razvoj je motiviran nedostacima algoritama [111] i [113] tj. da ne osiguravaju nenegativnost bazne matrice te su stoga kvazi-FNM algoritmi. Algoritam predložen u [114] osigurava nenegativnost bazne matrice u HPRJ kroz nenegativno eksplicitno preslikavanje koje je optimirano u odnosu na neku jezgrenu funkciju (u radu se koristi Gaussova jezgrena funkcija). To je slično konstrukciji temeljenoj na aproksimativnim eksplicitnim preslikavanjima koja se dobiju faktorizacijom separabilnih (posmačno invarijantnih) jezgrenih funkcija (npr. Gaussova jezgrena funkcija). U tom slučaju, ako su podaci nenegativni u ulaznom (originalnom) prostoru oni ostaju nenegativni i nakon preslikavanja. U sklopu projekta predlažu se algoritmi za problem (D.2.1)/(D.2.2) koji za nenegativne ulazne podatke osiguravaju nenegativne podatke u HPRJ za preslikavanjima temeljena na proizvoljnim jezgrenim funkcijama. Iz to razloga algoritam [114] nije od interesa za projekt.

U radu [115] opisan je jedan od prvih algoritama za rješenje nelinearnog bezmemorijskog problema SRS u HPRJ. Linearan problem SRS u HPRJ tipa (D.2.2) rješava se TDSEP algoritmom [116] koristeći kao regularizator glatkoću izvornih signala tj. pretpostavku da su izvorni signali individualno korelirani⁹ ali međusobno nekorelirani. Ova pretpostavka važi za izvorne signale u analizi slike histopatološkog uzorka ali ne važi za čiste komponente u spektrometriji mase. Drugi nedostatak algoritma [115] u odnosu na primjenu u kemometriji je da pretpostavka o nekoreliranosti čistih komponenata nije točna. Upravo suprotno, zbog očekivano velikog broja komponenata prisutnih u smjesama one se preklapaju tj. korelirane su, vidi rad [108]. Treći nedostatak algoritma [115] je da TDSEP algoritam, koji spada u klasu ANK algoritama, ne čuva nenegativnost izvornih signala tj. dobivena rješenja nisu u skladu sa fizikalnom i/ili kemijskom interpretacijom. Četvrti, možda i najvažniji, nedostatak algoritma [115] je neodrživost pretpostavke o statistički nezavisnim izvornim signalima u HPRJ. Naime, nelinearna preslikavanja generiraju u induciranom HPRJ uz originalne izvorne signale i monome različitog reda koji su sastavljeni od produkata različitih potencija izvornih signala. Ti monomi, čiji broj je jako velik ili čak beskonačan, predstavljaju

⁹ Signal $s(t)$ je individualno koreliran ako važi $E[s(t)s(t+\tau)] \neq 0$ za $\tau \neq 0$.

nove izvorne signale u HPRJ koji su statistički zavisni u odnosu na originalne izvorne signale. Iz opisanih razloga algoritam [115] nije od interesa za projekt.

U radu [117] opisan jedan od prvih algoritama za rješenje nelinearnog bezmemorijskog problema SRS u HPRJ. Ova algoritam dobiven je direktnom "kernelizacijom" algoritma [118] na način da je poopćeni svojstveni problem u originalnom ulaznom prostoru (algoritam za linearan problem SRS) zamijenjen poopćenim svojstvenim problemom u HPRJ. Ovaj Algoritam [117] ima iste pretpostavke na izvorne signale kao i alhoritam [115]: da su individualno korelirani i međusobno nekorelirani. Kako je prethodno objašnjeno niti jedna pretpostavka nije točna za čiste komponente u spektrometriji mase. Dodatni nedostatak algoritma [117] je da ne čuva nenegativnost izvornih signala. Iz opisanih razloga algoritam [117] nije od interesa za projekt.

U radu [119] opisan je algoritam za nelinearan bezmemorijski problem SRS (D.1.1) koji radi tako da u prvom stupnju procjeni inverzna preslikavanja $G(\mathbf{x}(t)) = [g_1(x_1(t)) \dots g_N(x_N(t))]^T$ tako da je $\{g_n \approx f_n^{-1}\}_{n=1}^N$ i $\{\mathbf{y}(t) = G(\mathbf{x}(t)) \approx \mathbf{B}\mathbf{s}(t)\}_{t=1}^T$. Nakon toga se za rješenje linearnog problema SRS koristi ANK algoritam koji se temelji na minimizaciji međusobne informacije, [120]. Vezano na zahtjeve koje postavlja projekt algoritam [119] ima nekoliko nedostataka: (i) budući se temelji na ANK algoritmu ne može riješiti pododređeni problem SRS, broj izvornih signala je veći od broja smjesa, što je karakteristično za dekompoziciju slike histopatološkog uzorak i izdvajanje analita iz spektara mase.; (ii) budući se temelji na ANK algoritmu nenegativnost izvornih signala nije očuvana a što je značajka izvornih signala u analizi slike i kemometriji.; (iii) pretpostavka statističke nezavisnosti izvornih signala nije točna za čiste komponente (analite) u spektrima mase; (iv) računaska složenost algoritma [119] je vrlo velika (za aproksimaciju inverznih preslikavanja koriste se višeslojne neuronske mreže) i algoritam je demonstriran na problemima SRS vrlo malog reda (izdvajanje dva izvorna signala iz dvije smjese). Iz opisanih razloga algoritam [119] nije od interesa za projekt.

U radu [121] opisan je algoritam za rješenje određenog nelinearnog bezmemorijskog problema SRS. Algoritam se temelji na dvije pretpostavke: (i) izvorni signali su statistički nezavisni; (ii) nelinearnosti nisu jaki i princip minimalne distorzije se može koristiti kao regularizator. Gledano iz perspektive projekta algoritam [121] ima slijedeće nedostatke: (i) ne može riješiti pododređeni problem SRS; (ii) pretpostavka statističke nezavisnosti među izvornim signalima nije točna za čiste komponente u spektrometriji mase; (iii) ograničenje

statističke nezavisnosti ne čuva nenegativnost izvornih signala što je karakteristično za probleme u analizi slike u patologiji i izdvajanju čistih komponenata u spektrometriji mase; (iv) računska složenost algoritma [121] je velika zbog čega je algoritam demonstriran na problemu SRS malog reda (izdvajanje dva izvorna signala iz dvije smjese). Iz opisanih razloga algoritam [121] nije od interesa za projekt.

Rad [122] predstavlja algoritam za nelinearan bezmemorijski problem SRS koji, za razliku od ANK algoritama, pretpostavlja da su izvorni signali separabilni u faznom prostoru

tj. da važi: $fgv(\mathbf{s}, \dot{\mathbf{s}}) = \prod_{n=1}^N fgv(s_n, \dot{s}_n)$ gdje fgv znači funkcija gustoće raspodjele vjerojatnosti a

$\dot{\mathbf{s}}$ označava derivaciju od \mathbf{s} . Ako je ovaj uvjet ispunjen onda je moguće pronaći funkciju koja razdvaja izvorne signale u faznom prostoru. Uvjet separabilnosti izvornih u faznom prostoru je u praksi teško provjeriti i nije jasno da li je on ispunjen za nenegativne korelirane izvorne signale karakteristične za primjene u kemometriji. U radu [122] koncept je demonstriran na razdvajanju dva kratka signala govora iz jedne smjese. Koncept je također proširen na višedimenzionalan problem SRS i demonstriran na izdvajanju trajektorija dvije pokretne čestice snimane sa pet kamera. Iako je koncept opisan u radu [122] originalan i temeljan nije jasno da li je primjenjiv na pododređene probleme SRS sa koreliranim i nenegativnim izvornim signalima, a što je tipičan slučaj u spketrometriji mase? Iz rada se također vidi da su potrebne vrlo dugačke vremenske serije da bi se procjenili derivativi izvornih signala. To je također nedostatak algoritma [122] gledano iz perspektive projekta. Naime, maseni spektri čistih komponenata se mogu opisati kao povorka delta funkcija i nisu diferencijabilni po nezavisnoj varijabli. Iz opisanih razloga algoritam [122] nije od interesa za projekt.

Rad [123] se nastavlja na koncept opisan u radu [122] na način da je pojednostavljena računska složenost algoritma. No i dalje se čini da je za probleme SRS karakterizirane sa velikim brojem izvornih signala metoda opisan u [123] računski neizvediv. Na primjer, računanje korelacijskih matrice drugog i četvrtog reda derivacije izvornih signala postaje računski neizvedivo kada broj izvornih signala raste. To je glavni razlog zašto je algoritam u radu [123] demonstriran na problemu izdvajanja dva govorna signala iz dvije smjese. Iz opisanih razloga algoritam [123] nije od interesa za projekt.

U radi [124] opisan je jedan od "klasičnih" algoritama za nelinearan bezmemorijski problem SRS. Pretpostavlja se da su smjese invertibilne nelinearne funkcije koje djeluju na

pojedinačnim sensorima. To se naziva post nelinearnim modelom¹⁰. Algoritam prvo provodi linearizaciju problema aproksimirajući inverze nelinearnih funkcija parametarskim modelom temeljenim na višeslojnom perceptronu (vrsta neuronske mreže). Kao regularizator koji omogućava učenje perceptrona i izdvajanje izvornih signala koristi se statistička nezavisnost. Gledano iz perspektive projekta algoritam [124] ima slijedeće nedostatke: (i) nije primjeniv na pododređeni problem SRS; (ii) pretpostavka statističke nezavisnosti nije točna za korelirane čiste komponente u spektrima mase kemijskih mješavina; (iii) statistička nezavisnost ne osigurava nenegativnost izvornih signala što je karakteristično za primjene u analizi slike u patologiji i izdvajanju čistih komponenata iz masenih spektara kemijskih smjesa. Iz opisanih razloga algoritam [124] nije od interesa za projekt.

U radu [125] je algoritam za specifičnu klasu nelineranih problema SRS, a temeljen na maksimalno vjerojatnosti (engl. maximum likelihood) i međusobnoj informaciji. Rad ima teorijski značaj za algoritme za određeni problem SRS a koji koriste međusobnu informaciju. Naime, u radu je pokazano da prisutnost nelinearnosti u problemu uključuje dodatne funkcijske zavisnosti u izrazima sa međusobnu informaciju i maksimalnu vjerojatnost. Iz istih razloga navedenih za prethodno diskutirane algoritme, algoritam [125] nije od interesa za projekt.

Rad [126] predstavlja teorijski doprinos vezan za uvjete pod kojima je moguće riješiti bezmemorijski problem nelinearnog SRS koristeći statističku nezavisnot kao ograničenje. Glavni rezultat je da nelinearnosti moraju biti strukturno ograničene na tzv. konformalna preslikavanja. Ovo ograničenje ograničava praktičnu primjenjivost (značaj) algoritama za nelinearan problem SRS koji se temelje na ograničenju statističke nezavisnosti. Uz činjenicu da omogućava riješene pododređenog problema SRS to je bio drugi glavni razlog za uporabu rijetkosti kao ograničenja pri rješavanju problema (D.2.1)/(D.2.2).

Rad [127] predstavlja algoritam za nelinearan problem SRS pri čemu se kao regularizator koristi rijetkost. Naime, metoda se zasniva na pretpostavci da je nelinearno transformiran signal manje rijedak od originala. Podrazumjeva se da su nelinearne funkcije

¹⁰ Post-nelinearan model miješanja odnosi se na slučaj kada senzori nelinearno izobličuju signal nastao procesom linearnog miješanja. U odnosu na model (D.2.1), post-nelinearan model miješanja x_n definiran je kao

$$x_n = f_n \left(\sum_{m=1}^M a_{nm} s_m \right).$$

monotome i glatke. Aproximacija inverza nelinearnih izobličenja se temelji na polinomima sa neparnim članovima. Gledano iz perspektive projekta glavni nedostatak algoritma [127] je da ne može riješiti pododređeni problem SRS. Isti komentar važi i za algoritam prezentiran u [128].

U radu [129] prezentiran je nelinearan FNM algoritam u HPRJ. Ideja algoritma temelji se na opisu baznih vektora u originalnom ulaznom prostoru kao konveksnoj kombinaciji vektora miješanja. Tada minimizacija ciljne funkcije najmanjih kvadrata daje Gramovu matricu podataka $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, pa se nelinearna verzija FNM algoritma dobije zamjenom Gramove matrice u ulaznom prostoru Gramovom matricom u Hilbertovom funkcijskom prostoru induciranom izabranom jezgrom. Ovaj algoritam je načelno primjenjiv na rješavanje problema (D.2.1)/(D.2.2). No njegovi nedostaci su slijedeći: (i) Gramova matrica u HPRJ je dimenzija $T \times T$, pri čemu T predstavlja broja uzoraka (piksela ili linija u spektrima mase). To ovaj algoritam čini računski neizvedivim u primjenama od interesa za projekt.; (ii) osim nenegativnosti nema drugih ograničenja na izvorne signale što dovodi u pitanje jedinstvenost faktorizacije problema (D.2.2). Iz tih razloga algoritam [129] nije od interesa za projekt.

U radu [130] predložene je metod za poboljšanje točnosti algoritma [117]. Kao i [117] algoritam [130] se temelji na formulaciji poopćenog svojstvenog problema u HPRJ pri čemu se podrazumjeva da su izvorni signali pojedinačno korelirani i međusobno nekorelirani. Iz perspektive projekta za algoritam [130] važe iste primjedbe kao za algoritam [117]. Stoga algoritam [130] nije od interesa za projekt. Kao dodatni komentar navodi se da je tehnike procjene jezgrene matrice u HPRJ, usrednjavanjem procjene na d segmenata signala što daje matricu $(T/d) \times (T/d)$, u osnovi proizvoljna i ne garantira poboljšanje u odnosu na [117]. Za razliku od metoda selekcija baze preko algoritama grupiranja podataka, gdje se uzroci grupiraju u d skupina sa različitim brojem uzoraka prema nekom kriteriju (npr. sličnost spektralnih profila), ovdje je grupiranje potpuno proizvoljno. To znači da se centar grupe (centroid) dobije kao: $\mathbf{v}_i = \frac{1}{d} \sum_{t=1}^d \mathbf{X}_{(:,D(t-1)+i)}$, $i=1, \dots, D$. Naravno, da uzorci $\mathbf{X}_{:,i}$, $\mathbf{X}_{:,D+i}$, $\mathbf{X}_{:,2D+i}, \dots$, $\mathbf{X}_{:,(d-1)*D+i}$ ne moraju (i vrlo vjerovatno ne pripadaju) istoj klasi.

U radu [131] je predložen algoritam za nelinearan problem SRS sa tzv. post-nelinearnim modelom miješanja originalno predloženim u [124]. Metoda se sastoji od tri koraka: (i) grupiranje uzoraka u prostoru podataka na skupu uzoraka u kojima je prisutan samo jedan izvorni signal; (ii) procjena inverznih nelinearnih preslikavanja koristeći

parametarski model temeljen na višeslojnom perceptronu; (iii) rješenju linearnog pododređenog problema SRS. Učinak ovog algoritma kritično zavisi od postojanja uzoraka u kojima je prisutan samo jedan izvorni signal. Kako je detaljno diskutirano u [108] taj uvjet gotovo sigurno nije ispunjen u realističnim eksperimentalnim uvjetima izdvajanja čistih komponenata iz spektara mase bioloških uzoraka, gdje se zbog očekivano velikog broja komponenata one međusobno preklapaju. Drugi nedostatak algoritma [131] je da je računaska složenost učenja parametarskih modela temeljenih na višeslojnim perceptronima velika što ograničava primjene predloženog algoritma na probleme SRS male složenosti. Npr., u radu [131] algoritam je provjeren na sintetičkim nadodređenim problemima sa 2 smjese i 3 izvorna signala, te 3 smjese i 5 izvornih signala. Također, kroz publikacije predloženog projekta i izvještaj nakon druge godine projekta biti će pokazano da se u slučaju rijetkih izvornih signala linearana model u HPRJ (D.2.2) znatno pojednostavljuje na način da matrica izvornih signala $\bar{\mathbf{S}}$ u HPRJ sadrži matricu originalnih izvornih signala \mathbf{S} i "mali" broj nelinearnih članova. Pri tome učinak linearizacije se postiže bez uporabe složenih parametarskih modela kao što je višeslojni perceptron. Iz diskutiranih razloga algoritam [131] nije od interesa za projekt.

U radu [132] je predložen algoritam, u duhu algoritama predloženih u [133] i [137], za linearizaciju nelinearnog bezmemorijskog modela. Dok je u [133] i [137] postupak linearizacije statistički u radu [132] je geometrijski. Geometrijska transformacija površine u ravninu linearizira post-nelinarni model miješanja. Nakon toga se koristi ANK algoritam za rješenje linearnog problema SRS. Iz perspektive predloženog projekta algoritam [132] ima tri nedostatka: (i) ANK algoritmi ne mogu riješiti pododređeni problem SRS; (ii) ANK algoritmi ne mogu razdvojiti korelirane izvorne signale; (iii) ANK algoritmi ne čuvaju nenegativnost izvornih signala. Ovi nedostaci se mogu otkloniti ako se ANK algoritam zamjeni nekim od algoritama koji linearni problem SRS rješava pod ograničenjima rijetkosti i nenegativnosti. No u tom slučaju računski zahtjevan postupak linearizacije se može supstituirati jednostavnijim postupkom nelinearnog preslikavanja originalnog problema u HPRJ: (D.2.2). Iz opisanih razloga algoritam [132] nije od interesa za projekt.

U radu [133] predložen je statistički algoritam za linearizaciju post-nelinearnog modela miješanja temeljen na pretpostavci da su smjese nakon linearnog modela bliske Gaussovoj raspodjeli¹¹. Stoga se linearizacija post-nelinearnog modela temelji na statističkoj

¹¹ Ova pretpostavka temelji se na centralnom graničnom teoremu koji kaže da linearna kombinacija ne-Gaussovih slučajnih procesa teži Gaussovoj raspodjeli kada se broj procesa u linearnoj kombinaciji povećava.

transformaciji koja osigurava da su raspodjele slučajnih procesa nakon transformacije bliske Gaussovoj. Nakon transformacije linearni problem SRS rješava se TDSEP algoritmom [116] koji podrazumjeva da su izvorni signali pojedinačno korelirani i međusobno nekorelirani. Kako je već prethodno diskutirano ove pretpostavke nisu točne za čiste komponente prisutne u spektrima mase bioloških uzoraka. Također TDSEP algoritam, koji spada u klasu ANK algoritama, ne može riješiti pododređeni problem SRS. Stoga algoritam [133] u izvornom obliku nije primjenjiv na pododređeni nelinearan bezmemorijski problem SRS od interesa za projekt. No, ako se u rješavanju linearnog problema SRS umjesto dekokoreliranosti koriste kao ograničenja rijetkost i nenegativnost izvornih signala postupak statističke linearizacije predložen u [133] može biti alternativa postupku nelinearnog preslikavanja originalnog problema u HPRJ. Jedan njegov nedostatak u odnosu na pristup preko HPRJ je da je post-nelinearni model signala restriktivan i nije moguće provjeriti (osim empirijski) da li je on za konkretan problem primjenjiv. Prednost pristupa preko HPRJ je da nelinearnosti nisu strukturno ograničene. Drugi nedostatak algoritma [133] u odnosu na pristup preko HPRJ je računski složenost. Naime, primjena algoritma [133] na dekompoziciju RGB slike histopatološkog zahtjeva 6 sati u odnosu na 6 do 8 minuta koliko je potrebno algoritmima u HPRJ. Kada se na linearizirani model primjeni isti algoritam za faktorizaciju nenegativne matrice rezultat dobiven algoritmom [133] je bitno lošiji (po analizi patologa) nego onaj dobiven linearnom faktorizacijom u HPRJ. Iz opisanih razloga algoritam [133] nije od interesa za projekt.

U radu [134] je prezentiran algoritam za nelinearan pododređeni problem SRS s post-nelinearnim modelom miješanja. Kao u [131], [124] i [129] koristi se parametarski model temeljen na višeslojnom perceptronu za linearizaciju model. Pri tome se i parametri perceptrona i izdvajanje izvornih signala temelje na Bayesovom pristupu sa odgovarajućim *a priori* probabilističkim modelima parametara perceptrona i izvornih signala. Glavni nedostatak Bayesovih metoda u općem pa tako i u ovom slučaju je njihova velika računski složenost. Naime slučajno uzorkovanje prema odabranim probabilističkim modelima temelji se na Monte Carlo tipu uzorkovanja. Metod predložen u radu [134] ispitan je post-nelinearnom problemu izdvajanja tri audio izvorna signala iz dvije smjese. Problemi izdvajanja čistih komponenata iz spektara mase nelinearnih kemijskih reakcija podrazumijevaju izdvajanje nekoliko desetaka čistih komponenata malog broja mješavina. Dakle iz razloga (pre)velike računski složenosti Bayesov pristup predložen u [134] neće biti

razmatran za primjene na projektu. Ovaj pristup zajedno sa sličnim pristupom predloženom u [135] i [136] može biti od (teorijskog) interesa za proučavanje u budućnosti.

U radu [135] predložen je Bayesov metod temeljen na uzorkovanju prema Monte Carlo Markovljevom lancu (MCML) za rješavanje specifičnog problema nelinearnog SRS koji se javlja kod ionski-selektivnih senzorskih polja. Ovaj pristup je zanimljiv za proučavanje zbog MCML uzorkovanja i može biti predmet posebnog interesa u budućnosti zajedno sa metodama [134] i [136]. Kada se radi o primjenama predviđenim na projektu prednost se daje konceptu linearne faktorizacije u HPRJ ograničene rijetkosti i nenegativnosti.

U radu [136] predstavljen je pristup problemu nelinearnog SRS preko varijacijskog Bayesov-og učenja. Pristup je razvijen za tri vrste nelinearnih modela: nelinearan faktorski model temeljen na višeslojnom perceptronu, hijerarhijski nelinearan faktorski model i post-nelinearan model. Iako to nije eksplicirano, numerički eksperimenti prezentirani u radu sugeriraju da je algoritam ograničen na nadodređene i određen probleme SRS. Dakle nije primjenjiv na probleme predviđene na projektu. MATLAB kôd algoritma [136] raspoloživ je na: <http://research.ics.aalto.fi/bayes/software/>.

U radu [137] prezentiran je algoritam za post-nelinearan problem SRS. Algoritam koristi statističku transformaciju, kao [133], pri čemu se linearizacije postiže kada su raspodjele transformiranih slučajnih procesa bliske Gaussovoj. Inverz post-nelinearnog modela nije modeliran sa višeslojnim perceptronima ili polinomima nego raspodjelama linearnih smjesa. Za raliu od algoritma [133], algoritam [137] podrazumjeva da su raspodjele linearnih smjesa bliske Gaussovoj (ali nisu Gaussove) što je praktično realnija pretpostavka. Raspodjele linearnih smjesa modeliraju sa Corner-Fisherovim razvojem. U postojećem obliku algoritam [137] koristi ANK algoritme za rješavanje linearnog problema SRS. To ga čini ne primjenjivim na pododređene probleme SRS koji sadrže nenegativne i korelirane izvorne signale. No slično kao i u slučaju algoritma [133], ako se u rješavanju linearnog problema SRS umjesto statističke nezavisnosti koriste kao ograničenja rijetkost i nenegativnost postupak statističke linearizacije predložen u [137] može biti alternativa postupku nelinearnog preslikavanja originalnog problema u HPRJ. Ipak, kako je to već diskutirano za algoritam [133], glavni neostatak ovog pristupa u odnosu na pristup koji koristi HPRJ je ograničenost post-nelinearnog model i velika računaska složenost. Iz tih razloga algoritam [137] nije od interesa za projekt.

Provedena analiza algoritama za nelinearan pododređeni bezmemorijski problem SRS signala (D.2.1) sugerira slijedeće zaključke:

- algoritmi [133] i [137] koji se temelje na statističkoj linearizaciji post-nelinearnog bezmemorijskog modela signala načelno mogu biti primijenjeni na problem (D.2.1) uz uvjete da se: (i) opći nelinearan model ogranični na post-nelinearan model; (ii) linearan problem SRS rješava faktorizacijom sa ograničenjima rijetkosti i nenegativnosti izvornih signala. Ipak, primjena algoritma [133] na dekompoziciju RGB slike histopatološkog uzorka pokazuje da je algoritam računski vrlo zahtjevan (6 sati u odnosu na 6 do 8 minuta što zahtjeva pristup preko HPRJ) te da nije točan.
- algoritmi [134], [135], [136], koji afirmiraju Bayes-ov pristup problemu nelinearnog SRS su od načelnog interesa i mogu postati zaseban predmet proučavanja u nekom od budućih projekata. Ipak, empirijski dokazana velika računaska složenost metoda temeljenih na Bayes-ovom pristupu (slučajno uzorkovanje u visokodimenzionalnim prostorima) predstavlja značajnu prepreku za njihove primjene na problemima u kojima se rezultati očekuju u praktično kratkom vremenu. Na primjer, za kliničke primjene u scenarijima dijagnostike i odstranjivanja tumora očekuje se da rezultat dekompozicije slike bude raspoloživ za nekoliko minuta.
- uzimajući u obzir dva prethodna zaključka, te prezentiranu analizu algoritama za nelinearno slijepo razdvajanje signala može se zaključiti da pristup nelinearnom pododređenom problemu slijepog razdvajanja nenegativnih koreliranih signala preko Hilbertovih funkcijskih prostora induciranih reprodukcijom jezgrama nema praktičnu alternativu.

Literatura

1. *Handbook of Blind Source Separation*, ed. P. Comon and C. Jutten, Elsevier, 2010.
2. A. Hyvärinen, J. Karhunen, E. Oja, *Independent Component Analysis*, Wiley Interscience, 2001.
3. A. Cichocki, S. Amari, *Adaptive Blind Signal and Image Processing*, John Wiley, New York, 2002.

4. A. Cichocki, R. Zdunek, A. H. Phan, S. I. Amari, *Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations - Applications to Exploratory Multi-way Data Analysis and Blind Source Separation*, Wiley, 2009.
5. M. J. McKewon, T. P. Jung, S. Makeig, G. Brown, S. S. Kindermann, T. W. Lee, T. J. Sejnowski, "Spatially independent activity patterns in functional MRI data during the Stroop color-naming task," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, Vol. 95, str. 803-810, 1998.
6. T. Ristaniemi, J. Joutsalo, 'Advanced ICA-based receivers for block fading DS-SS-SSMA channels', *Signal Processing*, vol. 85, no.3, str. 417-431, 2002.
7. K. Zhang, L. Chan, "Minimal Nonlinear Distortion Principle for Nonlinear Independent Component Analysis," *J. Mach. Learn. Res.*, vol. 9, 2455-2487, 2008.
8. Q. Du, I. Kopriva. Automated Target Detection and Discrimination Using Constrained Kurtosis Maximization, *IEEE Geoscience Remote Sensing Letters*, vol. 5, No. 1, str. 38-42, 2008.
9. Q. Du, I. Kopriva, H. Szu. Independent Component Analysis for Hyperspectral Remote Sensing, *Optical Engineering*, vol. 45, 017008, January 2006.
10. J. M. P. Nascimento, J. M. Bioucas Dias, "Vertex Component Analysis: A Fast Algorithm to Unmix Hyperspectral Data," *IEEE Trans. Geosc. Rem. Sen.*, vol. 43, no. 4, str. 898-909, April, 2005.
11. T. H. Chan, W. K. Ma, A. M. Ambikapathi, C. Y. Chi, "A Simplex Volume Maximization Framework for Hyperspectral Endmember Extraction," *IEEE Trans. Geosc. Rem. Sen.*, vol. 49, no. 11, str. 4177-4193, November, 2011.
12. I. Kopriva, Q. Du, H. Szu, W. Wasylkiwskyj, "Independent Component Analysis Approach to Image Sharpening in the Presence of Atmospheric Turbulence," *Optics Communications*, Vol. 233 (1-3) str. 7-14, 2004.
13. I. Kopriva, A. Peršin, N. Puizina-Ivić, L. Mirić, "Robust demarcation of basal cell carcinoma by dependent component analysis-based segmentation of multi-spectral fluorescence image," *J. of Photochemistry and Photobiology B: Biology*, vol. 100, str. 10-18, 2010.
14. I. Kopriva, A. Peršin, "Unsupervised decomposition of low-intensity low-dimensional multi-spectral fluorescent images for tumor demarcation," *Med. Image Anal.* vol. 13, pp. 507-518, 2009.

15. I. Kopriva, A. Cichocki, "Blind decomposition of low-dimensional multi-spectral image by sparse component analysis," *Journal of Chemometrics*, vol. 23, no. 11, str. 590-597, 2009.
16. I. Kopriva, M. Hadžija, M. Popović-Hadžija, M. Korolija, A. Cichocki, "Rational Variety Mapping for Contrast-Enhanced Nonlinear Unsupervised Segmentation of Multispectral Images of Unstained Specimen," *The Am. J. Path.*, vol. 179, str. 547-553, 2011.
17. G. Begelman, M. Zibulevsky, E. Rivlin, T. Kolatt, "Blind Decomposition of Transmission Light Microscopic Hyperspectral Cube Using Sparse Representation," *IEEE Trans. on Medical Imaging*, vol. 28, No. 8, str. 1317-1324, 2009.
18. T. Nakai, S. Muraki, E. Bagarinao, Y. Miki, Y. Takehara, K. Matsuo, C. Kato, H. Sakahara, H. Isoda, "Application of independent component analysis to magnetic resonance imaging for enhancing the contrast of gray and white matter," *Neuroimage*, vol. 21, str. 251-260, 2004.
19. X. Hu, A. Shimizu, H. Kobatake, S. Nawano, "Independent Component Analysis of Four-Phase Abdominal CT Images," *LNCS 3217*, pp. 916-924, 2004.
20. Y.C. Ouyang, H.M. Chen, J.W. Chai, C.C.C. Chen, S.K. Poon, C.W. Yang, S.K. Lee, and C.I. Chang, "Band Expansion-Based Over-Complete Independent Component Analysis for Multispectral Processing of Magnetic Resonance Image," *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, vol. 55, no. 6, str. 1666-1677, June 2008.
21. V. Zagorodnov, A. Ciptadi, "Component Analysis Approach to Estimation of Tissue Intensity Distributions of 3D Images," *IEEE Trans. Med. Imag.*, vol. 30, no. 3, str. 838-848, March 2011.
22. P. Sajda, S. Du, T. R. Brown, R. Stoyanova, D. C. Shungu, X. Mao, L. C. Parra, "Nonnegative Matrix Factorization for Rapid Recovery of Constituent Spectra in Magnetic Resonance Chemical Shift Imaging of the Brain," *IEEE Trans. Med. Imag.*, vol. 23, no. 12, str. 1453-1465, 2004.
23. I. Kopriva, I. Jerić, "Multi-component Analysis: Blind Extraction of Pure Components Mass Spectra using Sparse Component Analysis," *Journal of Mass Spectrometry*, vol. 44, issue 9, str. 1378-1388, 2009.

24. I. Kopriva, I. Jerić, V. Smrečki, "Extraction of multiple pure component ^1H and ^{13}C NMR spectra from two mixtures: novel solution obtained by sparse component analysis-based blind decomposition," *Analytica Chimica Acta*, vol. 653, str. 143-153, 2009.
25. I. Kopriva, I. Jerić, "Blind separation of analytes in nuclear magnetic resonance spectroscopy and mass spectrometry: sparseness-based robust multicomponent analysis," *Analytical Chemistry*, vol. 82, str. 1911-1920, 2010.
26. I. Kopriva, I. Jerić, A. Cichocki, "Blind Decomposition of Infrared Spectra Using Flexible Component Analysis," *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 97, str. 170-178, 2009.
27. D. Nuzillard, S. Bourg, J.-M. Nuzillard, "Model-Free Analysis of Mixtures by NMR Using Blind Source Separation," *J. Magn. Reson.*, vol. 133, str. 358-363, 1998.
28. W. Guoqing, D. Qingzhu, H. Zhenyu, "Independent component analysis and its applications in signal processing for analytical chemistry," *Trends in Analytical Chemistry*, vol. 27, no. 4, str. 368-376, 2008.
29. V. A. Shashilov, M. Xu, V. V. Ermolenkov, I. K. Lednev, "Latent variable analysis of Raman spectra for structural characterization of proteins," *J. Quant. Spect. & Rad. Trans.*, vol. 102, str. 46-61, 2006.
30. I. Kopriva, M. Filipović, "A mixture model with a reference-based automatic selection of components for disease classification from protein and/or gene expression levels," *BMC Bioinformatics*, vol. 12, str. 496, 2011.
31. S. I. Lee, S. Batzoglou, "Application of independent component analysis to microarrays," *Genome Biology*, vol. 4, str. R76, 2003.
32. J. P. Brunet, P. Tamayo, T. R. Golub, J. P. Mesirov, "Metagenes and molecular pattern discovery using matrix factorization," *Proc Natl Acad Sci USA*, vol. 101, str. 4164-4169, 2004.
33. Y. Gao, G. Church, "Improving molecular cancer class discovery through sparse non-negative matrix factorization," *Bioinformatics*, vol. 21, str. 3970-3975, 2005.
34. W. Liebermeister, "Linear modes of gene expression determined by independent component analysis," *Bioinformatics*, vol. 18, str. 51-60, 2002.

35. P. Comon, "Independent component analysis - A new concept?," *Signal Processing*, vol. 36, str. 287– 314, 1994.
36. Y. Li, A. Cichocki, S. Amari, "Analysis of Sparse Representation and Blind Source Separation," *Neural Comput.*, vol. 16, str. 1193-1234, 2004.
37. P. Georgiev, F. Theis, A. Cichocki, "Sparse Component Analysis and Blind Source Separation of Underdetermined Mixtures," *IEEE Trans. Neural Netw.*, vol. 16, str. 992-996, 2005.
38. P. Bofill, M. Zibulevsky, "Underdetermined blind source separation using sparse representations," *Signal Processing*, vol. 81, str. 2353-2362, 2001.
39. D. D. Lee, H. S. Seung, "Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization," *Nature*, vol. 401, str. 788-791, 1999.
40. O. Fiehn, J. Kopka, P. Dörmann, T. Altmann, R. N. Trethewey, L. Willmitzer, "Metabolite profiling for plant functional genomics," *Nature Biotechnology*, vol. 18, str. 1157-1161, 2000.
41. P. Jonsson, A. I. Johansson, J. Gullberg, J. Trygg, A. Jiye, B. Grung, S. Marklund, M. Sjöström, H. Antti, T. Moritz, " High-throughput data analysis for detecting and identifying differences between samples in GC/MS-based metabolomic analyses," *Analytical Chemistry*, vol. 77, str. 5635-5642, 2005.
42. J. K. Nicholson, J. C. Lindon, " Systems biology: Metabonomics," *Nature*, vol. 455, no. 7216, str. 1054-1056, 2008.
43. D. Rosenthal, "Theoretical limitations of gas chromatographic/mass spectrometric identification of multicomponent mixtures," *Analytical Chemistry*, vol. 54, str. 63-66, 1982.
44. J. M. Davies, J. C. Giddings, " Statistical theory of component overlap in multicomponent chromatograms," *Analytical Chemistry*, vol. 55, str. 418-424, 1983.
45. E. Candès, T. Tao, "Near optimal signal recovery from random projections: universal encoding strategy?," *IEEE Trans. Information Theory*, vol. 52, str. 5406-5425, 2006.

46. R. Chartran, V. Staneva, "Restricted isometry properties and nonconvex compressive sensing," *Inverse Problems*, vol. 24, str.035020 (14 str.), 2008.
47. R. A. DeVore, "Deterministic constructions of compressed sensing matrices," *Journal of Complexity*, vol. 23, str. 918-925, 2007.
48. T. Han, D.G. Goodenough, "Investigation of Nonlinearity in Hyperspectral Imagery Using Surrogate Data Methods," *IEEE Trans. Geosc. and Remote Sens.*, vol. 46, str. 2840-2847, 2008.
49. B. Belaroussi, J. Milles, S. Carme, Y. M. Zhu, and H. Benoit-Cattin, "Intensity non-uniformity correction in MRI: Existing methods and their validation," *Med. Image Anal.*, vol. 10, no.2, str. 234-246, April 2006.
50. J. E. Cohen, U. C. Rothblum, "Nonnegative Ranks, Decompositions, and Factorizations of Nonnegative Matrices," *Linear Algebra and Its Applications*, vol. 190, str. 149-168, 1993.
51. Bouthemy P, Piriou C H G, Yao J. Mixed-state auto-models and motion texture modeling. *J. Math Imaging Vision* 2006; **25**: 387-402.
52. Y. Qian, S. Jia, J. Zhou, A. Robles-Kelly, "Hyperspectral Unmixing via $L_{1/2}$ Sparsity-Constrained Nonnegative Matrix Factorization," *IEEE Trans. Geo. Rem. Sens.*, Vol. 49, No. 11, pp. 4282-4297, 2011.
53. Y. Sun, C. Ridge, F. del Rio, A. J. Shaka, J. Xin, "Postprocessing and sparse blind source separation of positive and partially overlapped data," *Signal Processing*, vol. 91, Issue 8, pp. 1838-1851, 2011.
54. M. S. Karoui, Y. Deville, S. Hosseini, A. Ouamri, "Blind spatial unmixing of multispectral images: New methods combining sparse component analysis, clustering and non-negativity constraints," *Pattern Recognition*, vol. 45, pp. 4263-4278, 2012.
55. N. Gillis, F. Glineur, "Using underapproximations for sparse nonnegative matrix factorization," *Pattern Recognition*, vol. 43, pp. 1676-1687, 2010.
56. C. F. Caifa, A. Cichocki, "Estimation of Sparse Nonnegative Sources from Noisy Overcomplete Mixtures Using MAP," *Neural Computation*, vol. 21, pp. 3487-3518, 2009.
57. T. H. Chan, C. Y. Chi, Y. M. Huang, W. K. Ma, "A Convex-Analysis Based Minimum-Volume Enclosing Simplex Algorithm for Hyperspectral Unmixing," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, vol. 57, No. 11, pp. 4418-4432, 2009.

58. G. Zhou, Z. Yang, S. Xie, J. M. Yang, "Online Blind Source Separation Using Incremental Nonnegative Matrix Factorization with Volume Constraints," *IEEE Trans. Neural Net.*, vol. 22, No. 4, pp. 550-560, 2011.
59. F. Y. Wang, C. Y. Chi, T. H. Chan, Y. Wang, "Nonnegative Least-Correlated Component Analysis for Separation of Dependent Sources," *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intel.*, vol. 32, No. 5, pp. 875-888, 2010.
60. G. Zhou, S. Xie, Z. Yang, J. M. Yang, Z. He, "Minimum-Volume-Constrained Nonnegative Matrix Factorization: Enhanced Ability of Learning Parts," *IEEE Trans. Neural Net.*, Vol. 22, No. 10, pp. 1626-1636, 2011.
61. G. Zhou, Z. Yang, S. Xie, J. M. Yang, "Mixing Matrix Estimation from Sparse Mixtures with Unknown Number of Sources," *IEEE Trans. Neural Net.*, vol. 22, No. 2, pp. 211-221, 2011.
62. E. M. T. Hendrix, I. Garcia, J. Plaza, G. Martin, A. Plaza, "A New Minimum-Volume Enclosing Algorithm for Endmember Identification and Abundance Estimation in Hyperspectral Data," *IEEE Trans. Geo. Rem. Sen.*, vol. 50, No. 7, pp. 2744-2757, 2012.
63. A. Pascual-Montano, J. M. Carazo, K. Kochi, D. Lehman, R. D. Pascual-Marqui, "Nonsmooth Nonnegative Matrix Factorization (*nsNMF*)," *IEEE Trans. Pat. Anal. Mach. Intel.*, Vol. 28, No. 3, pp. 403-415, 2006.
64. Y. Sun, J. Xin, "Nonnegative Sparse Blind Source Separation for NMR Spectroscopy by Data Clustering, Model Reduction and ℓ_1 Minimization," *SIAM J. Image. Sci.*, vol. 5, No. 3, pp. 886-911, 2012.
65. R. Schachtner, G. Pöppel, E. W. Lang, "Towards unique solution of non-negative matrix factorization problems by a determinant criterion," *Digital Sig. Proc.*, vol. 21, pp. 528-534, 2011.
66. S. Babji, A. K. Tangirala, "Source separation in systems with correlated sources using NMF," *Digital Sig. Proc.*, vol. 20, pp. 417-432, 2010.
67. R. Peharz, F. Pernkopf, "Sparse nonnegative matrix factorization with ℓ^0 constraints," *Neurocomputing*, vol. 80, pp. 38-46, 2012.

68. A. Eriksson, A. van den Hengel, "Efficient Computation of Robust Weighted Low-Rank Matrix Approximations Using the L_1 Norm," *IEEE Trans. Pat. Anal. Mach. Intel.*, vol. 34, No. 9, pp. 1681-1690, 2012.
69. D. Luengo, I. Santamaria, L. Vielva, "A general solution to blind inverse problems for sparse input signals," *Neurocomputing*, vol. 69, pp. 198-215, 2005.
70. A. Zandifar, M. Babaie-Zadeh, C. Jutten, "A Projected Gradient-Based Algorithm to Unmix Hyperspectral Data," *Proceedings of the 20th European Signal Processing Conference (EUSIPCO 2012)*, pp. 2482-2486, Bucharest, Romania, August 27-31, 2012.
71. R. Dubroca, C. Junot, A. Soulimiac, "Weighted NMF for High-resolution Mass Spectrometry Analysis," *Proceedings of the 20th European Signal Processing Conference (EUSIPCO 2012)*, pp. 1806-1810, Bucharest, Romania, August 27-31, 2012.
72. M. Mørup, K. H. Madsen, L. K. Hansen, "Approximate L_0 constrained Nonnegative Matrix and Tensor Factorization," *Proceedings of the ISCAS*, 1328-1331, 2008.
73. Z. Yang, Y. Xiang, S. Xei, S. Ding, Y. Rong, "Nonnegative Blind Source Separation by Sparse Component Analysis Based on Determinant Measure," *IEEE Trans. Neural Net. Learn. Syst.*, vol. 23, No. 10, pp. 1601-1610, 2012.
74. N. Gillis and S.A. Vavasis, "Fast and Robust Recursive Algorithms for Separable Nonnegative Matrix Factorization", *arXiv:1208.1237*, 2012.
75. A. Ambikapathi, T. H. Chan, W. K. Ma, C. Y. Chi, "Chance-Constrained Robust Minimum Volume Enclosing Simplex Algorithm for Hyperspectral Unmixing," *IEEE Trans. Geo. Rem. Sen.*, vol. 49, No. 11, pp. 4194-4209, 2011.
76. S. Jia, Y. Qian, "Constrained Nonnegative Matrix Factorization for Hypespectral Unmixing," *IEEE Trans. Geo. Rem. Sen.*, vol. 47, No. 1, pp. 161-173, 2009.
77. J. M. P. Nascimento, J. M. Bioucas Dias, "Vertex Component Analysis: A Fast Algorithm to Unmix Hypespectral Data," *IEEE Trans. Geo. Rem. Sen.*, Vol. 43, No. 4, pp. 898-910, 2005.
78. G. H. Ritter, G. Urcid, "A lattice matrix method for hyperspectral image unmixing," *Information Sciences*, vol. 181, pp. 1787-1803, 2011.

79. M. Zortea, A. Plaza, "A Quantitative and Comparative Analysis of Different Implementations of N-FINDR: A Fast Endmember Extraction Algorithm," *IEEE Geo. Rem. Sen. Let.*, Vol. 6, No. 4, pp. 787-791, 2009.
80. F. M. Naini, G. H. Mohimani, M. Babaie-Zadeh, C. Jutten, "Estimating the mixing matrix in sparse component analysis (SCA) based on partial k -dimensional subspace clustering," *Neurocomputing*, vol. 71, pp. 2330-2343, 2008.
81. Z. He, A. Cichocki, Y. Li, S. Xie, S. Sanei, "K-hyperline clustering learning for sparse component analysis," *Signal Processing*, vol. 89, pp. 1011-1022, 2009.
82. J. J. Thiagarajan, K. N. Ramamurthy, A. Spaias, "Mixing matrix estimation using discriminative clustering for blind source separation," *Digital Sig. Proc.*, vol. 23, pp.9-18, 2013.
83. L. Galluccio, O. Michel, P. Comon, A. O. Hero III, "Graph based k-means clustering," *Signal Processing*, vol. 92, pp. 1970-1984, 2012.
84. Z. Hu, X. Chang, F. Xu, X. Zhang, " $L_{1/2}$ Regularization: A Thresholding Representation Theory and Fast Solver," *IEEE Trans. Neural Net. Learning Syst.*, vol. 23, No. 7, pp. 1013-1027, 2012.
85. H. Mohimani, M. Babie-Zadeh, C. Jutten, "A Fast Approach for Overcomplete Sparse Decomposition Based on Smoothed ℓ_0 Norm," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, vol. 57, No. 1, pp. 289-301, 2009.
86. M. Hayder, K. Mahata, "An Improved Smoothed ℓ^0 Approximation Algorithm for Sparse Representation," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, vol. 58, No. 4, pp. 2194-2205, 2010.
87. R. Chartrand, "Exact reconstructions of sparse signals via nonconvex minimization," *IEEE Sign. Proc. Let.*, vol. 14, pp. 707-710, 2007.
88. R. Chartrand, W. Yin, "Iteratively Reweighted Algorithms for Compressive Sensing," *IEEE ICASSP*, pp. 3869-3872, 2008.
89. A. Gholami, S. M. Hosseini, "A General Framework for Sparsity-Based Denoising and Inversion," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, vol. 59, No. 11, pp. 5202-5211.
90. D. Wipf, S. Nagarajan, "Iterative Reweighted ℓ_1 and ℓ_2 Methods for Finding Sparse Solutions," *IEEE Journal Sel. Top. Sig. Proc.*, Vol. 4, No. 2, 317-329, 2010.

91. A. Beck, M. Teboulle, "A Fast Iterative Shrinkage-Thresholding Algorithm for Linear Inverse Problems," *SIAM J. Image. Sci.*, Vol. 2, No. 1, pp. 183-202, 2009.
92. A. Maleki, D. L. Donoho, "Optimally Tuned Iterative Reconstruction Algorithms for Compressed Sensing," *IEEE J. Sel. Topics Sig. Proc.*, vol. 4, No. 2, pp. 330-341, 2010.
93. N. Mourad, J. P. Reilly, " ℓ_p Minimization for Sparse Vector Reconstruction," *IEEE ICASSP*, pp. 3345-3348, 2009.
94. R. Saab, R. Chartrand, Ö. Yilmaz, "Stable Sparse Approximations Via Nonconvex Optimization," *IEEE ICASSP*, pp. 3885-3888, 2008.
95. Kim S.J., Koh K., Lustig M., Boyd S., Gorinevsky S. An Interior-Point Method for Large-Scale ℓ_1 -Regularized Least Squares. *IEEE J. Selected Topics Sig. Proc.* 2007; **1**: 606-617.
96. L. Xiao, T. Zhang, "A Proximal-Gradient Homotopy Method for the Sparse Least Square Problem," arXiv:1203.3002v1., 14. March, 2012.
97. M. D. Plumbley. Geometry and homotopy for L1 sparse representations. In: Proceedings of the Workshop on Signal Processing with Adaptive Sparse Structured Representations (SPARS'05), 16-18 November 2005, Rennes, France, pp 131-134, 2005.
98. N. B. Karahanoglu, H. Erdogan, "Forward-Backward Search for Compressed Sensing Signal Recovery," *Proc. EUSIPCO 2012*, pp. 1429-1433, Bucharest, Romania, August 27-31, 2012.
99. Z. Zhang, B. D. Rao, "Sparse signal recovery with temporally correlated source vectors using sparse Bayesian learning", *IEEE J. Selected Topics Sig. Proc.*, 5 (2011), 5: 912-926.
100. J. Vila, P. Schniter, "Expectation-maximization Bernoulli-Gaussian approximate message passing", *Proc. Asilomar Conf. on Signals, Systems, and Computers* (Pacific Grove, CA), Nov. 2011.
101. J. Vila, P. Schniter, "Expectation-maximization Gaussian-mixture approximate message passing", *Proc. Conf. on Information Sciences and Systems*, (Princeton, NJ), Mar. 2012.
102. Y. Wang, W. Yin, "Sparse signal reconstruction via iterative support detection", *SIAM J. Imaging Sci.*, 3 (2010), 3: 462-491.

103. N. B. Karahanoglu, H. Erdogan, "A* orthogonal matching pursuit: Best-first search compressed sensing signal recovery," *Digital Signal Processing* vol. 22, Issue 4, pp. 555-568, 2012.
104. G. Marjanović, V. Solo, "On ℓ_q Optimization and Matrix Completion," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, vol. 60, No. 11, pp. 5714-5724, 2012.
105. Y.C. Pati, R. Rezaifar, P.S. Krishnaprasad, Orthogonal matching pursuit: recursive function approximation with applications to wavelet decomposition, in: *Proceedings of 27th Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers*, 1993, pp. 40–44.
106. M. Elad, „Orthogonal Matching Pursuit,” section 3.1.2 in *Sparse and Redundant Representations*, Springer, 2011.
107. A. M. Bruckstein, M. Elad, M. Zibulevsky, "On the uniqueness of nonnegative sparse solutions to underdetermined systems of equations", *IEEE Trans. Inf. Theory*, vol. 54, No. 11, pp. 4813-4820, 2008.
108. I. Kopriva, I. Jerić, L. Brkljačić, "Nonlinear Mixture-wise Expansion Approach to Underdetermined Blind Separation of Nonnegative Dependent Sources," *Journal of Chemometrics*, vol. 27, pp.189-197, 2013.
109. Abu-Farha M, Elisma F, Zhou H, Tian R, Asmer M S, Figeys D. Proteomics: from technology developments to biological applications. *Anal. Chem.*, vol. 81, pp. 4585-4599, 2009.
110. McLafferty F W, Stauffer D A, Loh S Y, Wesdemiotis C. Unknown Identification Using Reference Mass Spectra. Quality Evaluation of Databases. *J. Am. Soc. Mass. Spectrom.*, vol. 10, pp. 1229-1240, 1999.
111. I. Buciu, N. Nikolaidis, and I. Pitas, "Nonnegative Matrix Factorization in Polynomial Feature Space," *IEEE Trans. on Neural Networks*, vol. 19, pp. 1090-1100, 2007.
112. D. Zhang, and W. Liu, "An Efficient Nonnegative Matrix Factorization Approach in Flexible Kernel Space," *Proc. of the 21st International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI'09), Pasadena, CA*, 2009.
113. S. Zafeiriou, and M. Petrou, "Non-linear Non-negative Component Analysis," *IEEE Trans. on Image Processing*, vol. 19, no. 4, pp. 1050-1066, 2010.
114. B. Pan, J. Lai, and W.S. Chen, "Nonlinear nonnegative matrix factorization based on Mercer kernel construction," *Pattern Recognition*, vol. 44, pp. 2800-2810, 2011.
115. S. Harmeling, A. Ziehe, and M. Kawanabe, "Kernel-Based Nonlinear Blind Source Separation," *Neural Computation*, vol. 15, pp. 1089-1124, 2003.

116. Ziehe, A., Muller, K.R., Nolte, G., Mackert, B.M., Curio, G., 1998. TDSEP-an efficient algorithm for blind separation using time structure. In: Proceedings of the international conference on artificial neural networks (ICANN'98), Skovde, Sweden, pp. 675-680.
117. D. Martinez, and A. Bray, "Nonlinear Blind Source Separation Using Kernels. *IEEE Tr. on Neural Networks* vol. 14, pp. 228-235, 2003.
118. J. V. Stone, "Blind source separation using temporal predictability," *Neural Computation*, vol. 13, pp.1559-1574, 2001.
119. L. Almeida, "MISEP-Linear and nonlinear ICA based on mutual information," *J. Mach. Learn. Res.*, vol. 4, pp. 1297-1318, 2003.
120. A. Bell, T. J. Sejnowski, "An information maximization approach to blind separation and blind deconvolution," *Neural Computation*, vol 7, pp. 1129-1159, 1995.
121. K. Zhang, and L. Chan, "Minimal Nonlinear Distortion Principle for Nonlinear Independent Component Analysis," *J. Mach. Learn. Res.*, vol. 9, pp. 2455-2487, 2008.
122. D. N. Levin, "Using state space differential geometry for nonlinear blind source separation," *J. Appl. Phys.*, vol. 103, 044906:1-12, 2008.
123. D. N. Levin, "Performing Nonlinear Blind Source Separation With Signal Invariants," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, vol. 58, pp. 2131-2140, 2010.
124. A. Taleb, and C. Jutten, "Source Separation in Post-Nonlinear Mixtures," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, vol. 47, pp. 2807-2820, 1999.
125. Y. Deville, S. Hosseini, and A. Deville, "Effect of indirect dependencies on maximum likelihood and information theoretic blind source separation for nonlinear mixtures," *Signal Processing*, vol. 91, pp. 793-800, 2011.
126. A. Hyvärinen, and P. Pajunen, "Nonlinear independent component analysis: Existence and uniqueness results," *Neural Networks*, vol. 12, pp. 429-439, 1999.
127. L. T. Duarte, R. Suyama, R. Attux, J. M. T. Romano, C. Jutten, "Blind compensation of nonlinear distortions via sparsity recovery," *Proc. EUSIPCO 2012*, pp. 2362-2366, Bucharest, Romania, August 27-31, 2012.
128. E. F. S. Filho, J. M. de Seixas, L. P. Calôba, "Modified post-nonlinear ICA model for online neural discrimination," *Neurocomputing*, vol. 73, pp. 2820-2828, 2010.
129. H. Lee, A. Cichocki, S. Choi, "Kernel nonnegative matrix factorization for spectral EEG feature extraction," *Neurocomputing*, vol. 72, pp. 3182-3190, 2009.
130. Z Z. L. Sun, D. S. Huang, C. H. Zheng, L. Shang, "Using batch algorithm for kernel blind source separation," *Neurocomputing*, vol. 69, pp. 273-278, 2005.

131. S. V. Vaerenbergh, I. Santamaria, "A Spectral Clustering Approach to Underdetermined Postnonlinear Blind Source Separation of Sparse Sources," *IEEE Trans. Neural Net.*, vol. 17, No. 3, pp. 811-814, 2006.
132. T. V. Nguyen, J. C. Patra, A. Das, "A post nonlinear geometric algorithm for independent component analysis," *Digital Signal Proc.*, vol. 15, pp. 276-294, 2005.
133. A. Ziehe, M. Kawanabe, S. Harmeling, K. R. Müller, "Blind Separation of Post-Nonlinear Mixtures Using Gaussianizing Transformations And Temporal Decorrelation," *J. Mach. Learn. Res.*, vol. 4, pp. 1319-1338, 2003.
134. C. Wei, W. L. Woo, S. S. Dlay, "Nonlinear underdetermined blind source separation using Bayesian neural network approach," *Digital Sig. Proc.*, vol. 17, pp. 50-68, 2007.
135. L. T. Duarte, C. Jutten, S. Moussaoui, "A Bayesian Nonlinear Blind Source Separation Method for Smart Ion-selective Electrode Arrays," *IEEE Sensors Journal*, vol. 9, No. 12, pp. 1763-1771, 2009.
136. A. Honkela, H. Valpola, A. Ilin, J. Karhunen, "Blind separation of nonlinear mixtures by variational Bayesian learning," *Digital Sig. Proc.*, vol. 17, pp. 914-934, 2007.
137. K. Zhang, L. W. Chan, "Extended Gaussianization Method for Blind Separation of Post-Nonlinear Mixtures," *Neural Computation*, vol. 17, pp. 425-452, 2005.