

UNIVERSITÉ CLAUDE BERNARD LYON 1

TRAVAIL D'INITIATIVE PERSONNEL ENCADRÉ

ANNÉE UNIVERSITAIRE : 2019-2020

Transport Optimal

Auteur :

Ferdinand GENANS BOITEUX

Superviseur :

Pr. Filippo SANTAMBROGIO

13 mai 2020

Table des matières

1	Introduction	3
2	Théorie du Transport Optimal	3
2.1	Problème de Monge	3
2.2	Problème de Kantorovich	3
2.3	Dual du Problème de Kantorovich	6
2.4	Espace de Wasserstein	8
3	Transport Optimal Discret	10
3.1	Programmation Linéaire	10
3.1.1	Algorithme du Simplexe	12
3.2	Régularisation entropique du Transport Optimal	14
3.2.1	Problème de Kantorovich Régularisé	14
3.2.2	Algorithme de Sinkhorn	15
4	Transport Optimal appliqué aux images	17
4.1	Algorithme K-Mean	17
4.2	Algorithme K-Nearest Neighbor	18
4.3	Résultats obtenus	19
5	Barycentres de Wasserstein	20
5.1	Notations	20
5.2	Formulation du Problème	20
5.3	Projection Itérative de Bregman	21
5.3.1	Application au barycentre	21
5.4	Application des Barycentres de Wasserstein en Imagerie	22
5.4.1	Barycentre 1D	22
5.4.2	Comparaison avec l'expression exacte	22
5.4.3	Barycentre en 2D	23
5.4.4	Influence du terme de régularisation	23
6	Annexe	25
6.1	Mes programmes	25
6.2	Analyse Convexe	25
6.3	Dualité en programmation linéaire	26
6.4	Théorie de la mesure et Intégration	27
6.5	Analyse fonctionnelle	27

1 Introduction

Ce mémoire conclut le travail d'initiative personnel que j'ai pu faire pendant cette année universitaire, sous la direction de Filippo Santambrogio. Je tiens tout d'abord à le remercier pour le temps qu'il a consacré pour m'encadrer ainsi que pour avoir permis cette expérience extrêmement enrichissante pour moi.

Dans un premier temps, ce travail s'intéresse à quelques aspects théoriques du transport optimal et ensuite étudie quelques applications du transport optimal discret, notamment en imagerie.

2 Théorie du Transport Optimal

2.1 Problème de Monge

Le problème de Monge posé en 1781 dans son "Mémoire sur la théorie des déblais et remblais" [11] est le problème initiale du transport optimal.

Le but était de considérer un tas de sable ainsi qu'un trou de même volume à remplir et de choisir comment déplacer le sable.

En prenant comme volume 1, on peut représenter le tas de sable et le trou comme des mesures de probabilités. Ensuite, en considérant l'ensemble des applications de transport T (en supposant qu'il y en ait) qui envoie le sable initialement en x vers $T(x)$ il fallait trouver celle qui minimisait le coût de transport total, ici la distance euclidienne.

Dans un cadre plus général, le problème de Monge s'est traduit de la façon suivante :

Définition 2.1.1 (Problème de Monge)

Étant donné (X, d) un espace métrique Polonais (séparable et complet), deux mesures de probabilités sur X ainsi qu'une fonction de coût $c : X \times X \rightarrow \mathbb{R}^+$:

$$(\text{MP}) := \min \left\{ C(T) = \int c(x, T(x)) d\mu(x) : T_{\#}\mu = \nu \right\}$$

où $T_{\#}\mu$ est la mesure image de l'application T défini pour chaque partie mesurable A de X par : $T_{\#}\mu(A) = \nu(T^{-1}(A))$

L'ensemble de toutes les applications de transport entre μ et ν est noté $\mathcal{T}(\mu, \nu)$.

Exemple : Considérons $\mu, \nu \in \mathbb{P}(\mathbb{R})$ avec $\mu = \delta_0$ et $\nu = \frac{1}{2}\delta_1 + \frac{1}{2}\delta_2$.

Nous avons : $\mathcal{T}(\mu, \nu) = \emptyset$, mais $\mathcal{T}(\nu, \mu) = \{T : \text{application de Borel}; T(1) = T(2) = 0\}$.

Avec cet exemple, nous voyons que $\mathcal{T}(\mu, \nu)$ peut être vide ou contenir une infinité d'applications de Borel. Nous constatons également que généralement : $\mathcal{T}(\mu, \nu) \neq \mathcal{T}(\nu, \mu)$.

2.2 Problème de Kantorovich

Comme montré dans l'exemple 1, le problème de Monge semble pas assez permissif, on voudrait pouvoir fragmenter la masse d'un atome pour envoyé sa masse à plus d'un endroit à la fois.

Pour faire cela, on veut quelque chose de plus général que l'application de transport du problème de Monge, on veut que la masse présente en un point soit distribué selon une certaine mesure de probabilité.

Pour reprendre le problème initial de Monge, intuitivement, on veut que l'on puisse fragmenter chaque grain de sable et distribuer la poussière de ce grain selon une certaine distribution. L'énoncé du problème suivant a été introduit par Kantorovich dans [9] et nous permet de faire cela. Il est vu comme une relaxation du problème de Monge.

Définition 2.2.2 (Problème de Kantorovich)

Etant donné deux ensembles X et Y ainsi qu'une **fonction de coût** $c : X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$, on considère le problème de minimisation :

$$(KP) \min \left\{ K(\gamma) = \int_{X \times Y} cd\gamma : \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\}$$

où $\Pi(\mu, \nu) = \{\gamma \in \mathbb{P}(X \times Y) : (\pi_x)_\# \gamma = \mu, (\pi_y)_\# \gamma = \nu\}$

Voici deux théorèmes qui prouvent l'existence d'un minimiseur pour le problème de Kantorovich. La deuxième preuve est une version plus forte de la première, qui utilise notamment le théorème de Prokhorov pour montrer que le couplage de mesure $\Pi(\mu, \nu)$ est faiblement compact. Les preuves des théorèmes suivants ont été rédigées grâce à [12].

Théorème 2.2.3

Si X, Y sont des espaces métriques compacts et $c : X \times Y \mapsto \mathbb{R}$ une fonction continue, alors (KP) admet une solution.

Preuve :

Soit $(\gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de $\Pi(\mu, \nu)$ convergeant faiblement.

Par définition de la convergence étroite, on a :

$$\forall \phi \in C(X \times Y, \mathbb{R}) : \int \phi d\gamma_n \rightarrow \int \phi d\gamma$$

Le théorème de représentation de Riesz nous donne que :

$$\forall \gamma_n \in \mathbb{M}(X \times Y), \exists \xi_n \in C'_0(X \times Y) \text{ tel que } \langle \xi, \phi \rangle = \int \phi d\gamma_n \quad \forall \phi \in C_0(X \times Y, \mathbb{R})$$

Où l'on note : $C_0(X)$ l'espace des fonctions continues qui tendent vers 0 en l'infini.

Ici, comme $X \times Y$ est compact, on a : $C_0(X \times Y) = C(X \times Y)$.

Ainsi, on associe la suite $(\xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de $C'(X \times Y)$ à la suite $(\gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$.

On a : $\langle \xi_n, \phi \rangle = \int \phi d\gamma_n \leq \|\phi\| \int d\gamma_n \leq \|\phi\|$, donc $\|\xi_n\| = \sup_{\|\phi\|=1} |\langle \xi_n, \phi \rangle| = 1$.

Ainsi, la suite $(\xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est bornée.

Comme $X \times Y$ est un espace métrique compact, $C(X \times Y, \mathbb{R})$ est séparable.

On peut donc utiliser le théorème de Banach-Alaoglu :

$(\xi_n) \in C'(X \times Y)$ est bornée, $C(X \times Y, \mathbb{R})$ est séparable donc il existe une sous suite (ξ_{n_k}) telle que $\xi_{n_k} \xrightarrow{*} \xi \in C'(X \times Y)$.

On a donc

$$\int \phi d\gamma_{n_k} \rightarrow \int \phi d\xi, \text{ ainsi : } (\gamma_{n_k}) \rightharpoonup \gamma$$

Vérifions que $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$:

Soit $\phi \in C(X \times Y, \mathbb{R})$, on a : $\forall k : \int \phi(x) d\gamma_{n_k} = \int \phi d\mu$ donc par passage à la limite,

$$\int \phi(x) d\gamma = \int \phi d\mu .$$

On a donc : $(\pi_x)_\# \gamma = \mu$ et on prouve de manière similaire que $(\pi_y)_\# \gamma = \nu$.

On peut donc utiliser le théorème de Weierstrass :

$K : \Pi(\mu, \nu) \rightarrow \mathbb{R}$ est continue, $\Pi(\mu, \nu)$ est compacte donc si on prend une suite minimisante $(\gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de K on sait qu'elle converge vers $\gamma \in \Pi(\mu, \nu)$ et que le minimum de K est atteint en γ .

Ainsi (KP) a bien une solution.

Théorème 2.2.4

Soient X et Y deux espaces métriques Polonais (complets et séparables) et $c : X \times Y \mapsto \mathbb{R}$ une fonction semi-continue inférieurement alors (KP) admet une solution.

Preuve : Il faut prouver la semi-continuité inférieure de K au sens de la convergence faible ainsi que la compacité faible de $\Pi(\mu, \nu)$ pour pouvoir utiliser le théorème de Weierstrass comme dans le théorème précédent et conclure.

Montrons que K est semi-continue inférieurement :

Considérons (f_k) une suite croissante de fonctions continues et bornées convergeant simplement vers la fonction de coût c . Posons $K_k(\gamma) = \int f_k d\gamma$, on a $K(\gamma) = \sup_k J_k(\gamma)$ par convergence monotone, or K étant définie comme le supremum de fonctions continues, K est semi-continue inférieurement.

En effet : Soit $(\gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de $\Pi(\mu, \nu)$ telle que $(\gamma_n) \rightharpoonup \gamma$.

$$\text{On a} \quad \forall k : J_k(\gamma) \leq \liminf_n J_k(\gamma_n) \leq \liminf_n K(\gamma_n)$$

$$\text{Donc} \quad J_k(\gamma) \leq \liminf_n K(\gamma_n)$$

$$\text{Ainsi} \quad J(\gamma) \leq \liminf_n K(\gamma_n)$$

Ce qui montre la semi-continuité inférieure de K .

Montrons la compacité faible de $\Pi(\mu, \nu)$:

Par le théorème de Prokhorov, une mesure de probabilité sur un espace Polonais est toujours tendue.

Ainsi pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $K_x \subset X$, compact, tel que $\mu(K_x^c) \leq \frac{\varepsilon}{2}$.

De même il existe $K_y \subset Y$, compact, tel que $\nu(K_y^c) \leq \frac{\varepsilon}{2}$

Soit (γ_n) une suite de $\Pi(\mu, \nu)$, pour tout n on a :

$$\begin{aligned} \gamma_n \left((K_x \times K_y)^c \right) &\leq \gamma_n(K_x^c \times Y) + \gamma_n(X \times K_y^c) \\ &\leq \mu(K_x^c) + \nu(K_y^c) \\ &\leq \varepsilon \end{aligned}$$

Ainsi, toute suite de $\Pi(\mu, \nu)$ est tendue, on peut donc appliquer le théorème de Prokhorov :

$\forall (\gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$, il existe une sous suite $\gamma_{n_k} \rightharpoonup \gamma$.

Ainsi, $\Pi(\mu, \nu)$ est bien faiblement compacte, ce qui conclut la démonstration.

2.3 Dual du Problème de Kantorovich

La formulation dual du problème de Kantorovich est la suivante.

Définition 2.3.5

Etant donné deux ensembles X, Y et une fonction $c : X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$

$$(DP) := \left\{ \max_{\phi, \psi} \int \phi d\mu + \int \psi d\nu; \phi \in C_b(X), \psi \in C_b(Y), (\phi \oplus \psi)(x, y) \leq c(x, y) \right\}$$

Le théorème suivant énonce l'existence d'un maximiseur au problème dual de Kantorovich.

Théorème 2.3.6

Si X et Y sont compacts, c , ϕ et ψ sont continues, alors (DP) admet une solution.

Preuve :

On a les inégalités suivantes :

$$\begin{aligned} \phi(x) &\leq c(x, y) - \psi(y) & \psi(y) &\leq c(x, y) - \phi(x) \\ \phi(x) &\leq \inf_y [c(x, y) - \psi(y)] & \psi(y) &\leq \inf_x [c(x, y) - \phi(x)] \end{aligned}$$

On note $\phi^c = \inf_x [c(x, y) - \phi(x)]$ et $\phi^{c\bar{c}} = \inf_y [c(x, y) - \psi(y)]$

Comme $X \times Y$ est compact, c est uniformément continue.

Ainsi, il existe un module de continuité $\omega : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ croissante tel que $\omega(0) = 0$ et :

$$|c(x, y) - c(x', y')| \leq \omega[d(x, x') + d(y, y')]$$

Montrons que ϕ^c a le même module de continuité que c , par analogie, on aura que $\phi^{c\bar{c}}$ a aussi le même module de continuité que c .

On définit : $g_x(y) = c(x, y) - \phi(x)$.

On a

$$|g_x(y) - g_x(y')| \leq \omega(d(y, y')) \quad \text{donc } g_x \text{ a le même } \omega \text{ que } c.$$

Ainsi

$$\begin{aligned} g_x(y) &\leq g_x(y') + \omega(d(y, y')) \\ \Rightarrow \inf_x g_x(y) &\leq \inf_x g_x(y') + \omega(d(y, y')) \\ \Rightarrow \phi^c(y) &\leq \phi^c(y') + \omega(d(y, y')) \end{aligned}$$

On a donc bien que ϕ^c a le même module de continuité que c .

Soit $(\phi_n, \psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite maximisante de (DP), si on remplace cette suite par la suite $(\phi_n^{c\bar{c}}, \phi_n^c)_{n \in \mathbb{N}}$, cette dernière est "au moins aussi maximisante". On réécrira cette dernière suite $(\phi_n, \psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ par simplicité.

Observons que $\forall C^{te} \in \mathbb{R} : \int \phi + C^{te} d\mu + \int \psi - C^{te} d\mu = \int \phi d\mu + \int \psi d\mu$.

X étant compact, et ϕ_n étant bornée $\forall n$, sans perte de généralité on peut fixer :

$$\min \phi_n = 0 \quad \forall n \text{ ainsi } \phi_n \in [0; \omega(\text{diam}(X))].$$

Par conséquent, on a $\psi_n \in [\min c - \omega(\text{diam}(X)); \max c]$.

Ainsi, $(\phi_n, \psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est équicontinue et équibornée, par le théorème d'Ascoli-Arzelà, il existe une sous suite $(\phi_{n_k}, \psi_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ convergeant uniformément vers (ϕ, ψ) .

$\forall n_k : \phi_{n_k} \oplus \psi_{n_k} \leq c$ donc $\phi \oplus \psi$ est admissible et optimal pour (DP).

Le théorème suivant énonce une égalité (dualité forte) entre le problème de Kantorovich et son dual. Une version plus forte de ce théorème avec X et Y des espaces Polonais et une fonction de coût semi-continue peut être trouvée dans [15]

Théorème 2.3.7

Si X et Y sont compacts et c est continue, alors $\min (\text{KP}) = \max (\text{DP})$.

La preuve suivante est technique, elle utilise l'analyse convexe. Nous pourrions avoir une idée de la véracité de la dualité forte en faisant un changement "inf-sup" et "sup-inf" en réécrivant les problèmes (KP) et (DP) d'une certaine manière, mais cela ne serait pas rigoureux.

Preuve : Posons, pour $p \in C(X \times Y)$

$$H(p) = -\max \left\{ \int \phi d\mu + \int \psi d\nu; (\phi \oplus \psi) \leq c - p \right\}$$

Prouvons que H est convexe et semi-continue inférieurement.

Convexité : Soit p_0 et $p_1 \in C(X \times Y)$ avec leurs optimaux respectifs ϕ_0, ψ_0 et (ϕ_1, ψ_1) . Pour tout t on définit :

$$\begin{aligned} p_t &= (1-t)(p_0) + tp_1 \\ \phi_t &= (1-t)(\phi_0) + t\phi_1 \\ \psi_t &= (1-t)(\psi_0) + t\psi_1 \end{aligned}$$

On a

$$\phi_t \oplus \psi_t \leq c - p$$

Donc

$$H(p_t) \leq -\int \phi_t d\mu - \int \psi_t d\nu = (1-t)H(p_0) + tH(p_1)$$

Ce qui prouve la convexité.

Prouvons la semi-continuité inférieure : Prenons une suite p_n convergeant uniformément vers p et extrayons une sous suite p_{n_k} tel que $\lim H(p_{n_k}) \rightarrow \liminf_n H(p_n)$.

Par le théorème d'Ascoli, la suite p_{n_k} est équicontinue et équibornée.

Ainsi la suite de couples optimaux correspondant (ϕ_{n_k}, ψ_{n_k}) est équicontinue et équibornée.

Ainsi, par le théorème d'Ascoli, il existe une sous suite $(\phi_{n_{k_j}}, \psi_{n_{k_j}})$ convergeant uniformément vers (ψ, ϕ) .

Pour tout j on a

$$\phi_{n_{k_j}} \oplus \psi_{n_{k_j}} \leq c - p_{n_{k_j}} \Rightarrow \phi \oplus \psi \leq c - p$$

Donc

$$H(p) \leq -\int \phi d\mu - \int \psi d\nu = \lim_j H(p_{n_{k_j}}) = \liminf_n H(p_n)$$

Notation : $\mathbb{M}(X)$ est l'ensemble des mesures signées sur X et $\mathbb{M}^+(X)$ l'ensemble des mesures positives sur X .

La transformée de Legendre $H^*(\gamma) : \mathbb{M}(X \times Y) \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est défini par

$$H^*(\gamma) = \sup_p \int p d\gamma + \sup_{\phi, \psi} \left\{ \int \phi d\mu + \int \psi d\nu; \phi \oplus \psi \leq c - p \right\}$$

Si $\gamma \notin \mathbb{M}_+(X \times Y)$, il existe $p_0 \leq 0$ tel que $\int p_0 d\gamma > 0$ et donc en prenant $\psi = \phi = 0$ et $p = c + np_0$ on a $H(\gamma) = +\infty$ pour $n \rightarrow +\infty$.

En revanche, si $\gamma \in \mathbb{M}_+(X \times Y)$, il faut prendre p le plus grand possible : $p = c - \phi \oplus \psi$ et le problème se réécrit :

$$H^*(\gamma) = \sup_{\phi, \psi} \left\{ \int_{X \times Y} c(x, y) d\gamma - \int_{X \times Y} \phi \oplus \psi d\gamma + \int_X \phi d\mu + \int_Y \psi d\nu \right\}$$

Ce qui nous donne

$$H^*(\gamma) = K(\gamma) \text{ si } \gamma \in \Pi(\mu, \nu), H^*(\gamma) = +\infty \text{ sinon}$$

Comme H est convexe et semi-continue inférieurement, on a $H = H^{**}$ ainsi on a :

$$H(0) = -H^{**}(0) = -\sup_{\gamma} \langle 0, \gamma \rangle - H^*(\gamma) = -\inf_{\gamma} H^*(\gamma) = -\inf_{\gamma} K(\gamma) = -\min(KP)$$

Or $(DP) = -H(0)$ donc $\max(DP) = \min(KP)$.

2.4 Espace de Wasserstein

Dans cette partie, (X, d) est un espace métrique Polonais (complet et séparable).

Etant donné $x_0 \in X$, on définit :

$$\mathbb{P}_p(X) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \mu \in \mathbb{P}(X) : \int_X d(x_0, x)^p d\mu(x) < +\infty \right\}$$

On peut remarquer, grâce à l'inégalité triangulaire que le choix de $x_0 \in X$ n'influence pas l'ensemble $\mathbb{P}_p(X)$ car si la condition est réalisée pour un certain x_0 , elle l'est pour tout $x'_0 \in X$.

Définition-Théorème 2.4.8 (Distance de Wasserstein)

L'application \mathcal{W}_p définit sur $\mathbb{P}_p(X) \times \mathbb{P}_p(Y)$ par :

$$\mathcal{W}_p(\mu, \nu) := \min \left\{ \left(\int_{X \times X} d(x, y)^p d\pi(x, y) \right)^{1/p} : \pi \in \Pi(\mu, \nu) \right\}$$

est une distance, appelée **p-distance de Wasserstein**, pour tout $p \in \mathbb{R}$

Démonstration :

Finitude :

$$\begin{aligned} \int_{X \times X} d(x, y)^p d\pi(x, y) &\leq \int_{X \times X} \left(d(x, x_0) + d(x_0, y) \right)^p d\pi(x, y) \\ &\leq \left(2 \max \{ d(x, x_0), d(x_0, y) \} \right)^p d\pi(x, y) \\ &\leq 2^p \left(\int_X d(x, x_0)^p d\mu(x) + \int_X d(x_0, y)^p d\nu(y) \right) \\ &< +\infty \text{ car } \mu, \nu \in \mathbb{P}_p(X) \end{aligned}$$

Symétrie et positivité :

La symétrie et la positivité sont immédiates du à la positivité et la symétrie de la distance.

Séparation :

Si $\mathcal{W}_p(\mu, \nu) = 0$ cela implique qu'il existe $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ tel que $\int d(x, y)^p d\pi = 0$ donc que la mesure π est concentré sur $\{x = y\}$ et donc pour toute fonction mesurable ϕ sur X on a :

$$\int \phi d\mu = \int \phi(x) d\pi = \int \phi(y) d\pi = \int \phi d\nu$$

On a donc $\mu = \nu$ ce qui vérifie l'axiome de séparation.

Inégalité Triangulaire :

Soit $\mu_1, \mu_2, \mu_3 \in \mathbb{P}_p(X)$ le théorème 2.2.3 nous permet d'affirmer qu'il existe $\pi_{1,2} \in \Pi(\mu_1, \mu_2)$ $\pi_{2,3} \in \Pi(\mu_2, \mu_3)$ tel que $\mathcal{W}_p(\mu_1, \mu_2) = \left(\int d(x, y)^p d\pi_{1,2} \right)^{1/p}$ et $\mathcal{W}_p(\mu_2, \mu_3) = \left(\int d(x, y)^p d\pi_{2,3} \right)^{1/p}$. Le lemme de recollement (théorème 6.4.9) permet de prendre $\pi \in \mathbb{P}(X \times X \times X)$ tel que $\pi_{x,y\#}\pi = \pi_{1,2}$ et $\pi_{y,z\#}\pi = \pi_{2,3}$ où $\pi_{x,y\#}\pi$ et $\pi_{y,z\#}\pi$ désignent respectivement la marginale selon les deux premières variables et la marginale selon les deux dernières variables.

On a :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_p(\mu_1, \mu_3) &\leq \left(\int d(x, z)^p d\pi \right)^{1/p} && \text{par la définition de } \mathcal{W}_p \\ &\leq \left(\int \left(d(x, y) + d(y, z) \right)^p d\pi \right)^{1/p} && \text{par inégalité triangulaire} \\ &\leq \left(\int d(x, y)^p d\pi \right)^{1/p} + \left(\int d(y, z)^p d\pi \right)^{1/p} && \text{par inégalité de Minkowski} \\ &= \mathcal{W}_p(\mu_1, \mu_2) + \mathcal{W}_p(\mu_2, \mu_3) \\ &= \mathcal{W}_p(\mu_1, \mu_2) + \mathcal{W}_p(\mu_2, \mu_3) \end{aligned}$$

Ainsi on a prouvé que \mathcal{W}_p était bien une distance.

3 Transport Optimal Discret

Dans cette partie, on s'intéresse au transport optimal, plus précisément au problème de Kantorovich, dans le cas discret. Ceci dans le but de pouvoir utiliser le transport optimal dans des cas appliqués, notamment en informatique. Dans le cas discret, le problème de Kantorovich se reformule de la façon suivante :

Définition 3.0.1 (Problème de Kantorovich Discret)

Etant donné $a \in \sum_n$, $b \in \sum_m$ et une matrice de coût $C \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ on définit :

$$L_C(a, b) = \min \left\{ \sum_{i,j} C_{ij} P_{ij} : P \in \Pi(a, b) \right\}$$

$\Pi(a, b) \stackrel{\text{def}}{=} \{P \in \mathbb{R}_+^{n \times m} : P \mathbb{1}_m, P^T \mathbb{1}_n = b\}$ est appelé l'**ensemble de couplage**.

$\sum_N \stackrel{\text{def}}{=} \{a \in \mathbb{R}_+^n : \sum_{i=1}^n a_i = 1\}$ est appelé le **simplexe de probabilité**.

On voit que dans ce cas, le problème de Kantorovich est un problème de programmation linéaire. La prochaine partie est donc consacrée à la programmation linéaire, dans le but de pouvoir utiliser le transport optimal dans le domaine informatique.

3.1 Programmation Linéaire

Un problème de programmation linéaire consiste à optimiser une fonction linéaire soumise à un ensemble d'inégalités linéaires.

En voici un exemple simple :

Maximiser la fonction f défini sur \mathbb{R}^2 par : $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$

$$\text{Sous les contraintes : } \begin{cases} 4x_1 - x_2 & \leq 8 \\ 2x_1 + x_2 & \leq 10 \\ 7x_1 - 3x_2 & \geq -2 \\ x_1, x_2 & \geq 0 \end{cases}$$

Voici un graphique où la région de faisabilité, correspondant à l'ensemble des solutions réalisables du programme linéaire, est montrée.

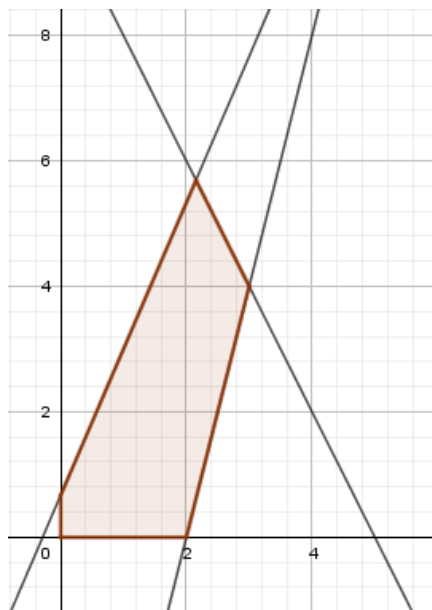


FIGURE 1 – Intersection des contraintes linéaires

On voit que la région de réalisabilité forme une région convexe du plan, cela se généralise en dimension n , avec la notion de polytope convexe que l'on va définir par la suite.

Définition 3.1.2 (Problème de programmation linéaire)

Etant donné $A = (a_{ij}) \in M_n(\mathbb{R})$, $b = (b_i) \in \mathbb{R}^m$, $c = (c_j) \in \mathbb{R}^n$ et $x = (x_i) \in \mathbb{R}^n$.

Forme canonique :

Maximiser la fonction linéaire $f(x) = \sum_{i=1}^n c_i x_i$

Sous les contraintes :

$$\begin{cases} \forall i \in \llbracket 1 ; n \rrbracket : \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \leq b_i \\ \forall j \in \llbracket 1 ; m \rrbracket : x_j \geq 0 \end{cases}$$

Forme standard :

Maximiser la fonction linéaire $f(x) = \sum_{i=1}^n c_i x_i$

Sous les contraintes :

$$\begin{cases} \forall j \in \llbracket 1 ; m \rrbracket, x_j = b_j - \sum_{i \in N} a_{ij} x_i \\ \forall k \in \llbracket 1 ; n + m \rrbracket : x_k \geq 0 \end{cases}$$

Les variables $i \in \llbracket 1 ; n \rrbracket$ sont appelées les variables hors bases, on note aussi cet ensemble N et les autres variables celles de bases notés B .

Remarque :

- Un problème de programmation linéaire peut aussi être vu comme un problème de minimisation. En effet, maximiser une fonction f revient à minimiser la fonction $-f$.
- On peut toujours transformer un problème sous forme canonique en un problème équivalent de forme standard et inversement.

Voici une définition-propriété utile pour pouvoir résoudre un problème de programmation linéaire. Cette propriété de convexité est utilisée dans la résolution de l'algorithme du Simplexe.

Définition-Proposition 3.1.3 (Polytope Convexe)

Dans \mathbb{R}^d , $d \in \mathbb{N}$, un polytope convexe est défini comme l'intersection fini de demi-espaces fermés de \mathbb{R}^d .

Propriétés :

- La région de faisabilité d'un problème de programmation linéaire est un polytope convexe.
- Pour tout problème de programmation linéaire de région de faisabilité non vide, il existe toujours une solution optimale sur un sommet de sa région de faisabilité.

La première propriété est immédiate étant donné que les contraintes d'inégalités définissent des demi-espaces fermés.

Région de faisabilité en transport optimal :

Dans le cas particulier du problème de Kantorvich discret, la région de faisabilité est $\Pi(a, b)$ que l'on nomme polytope de couplage.

On remarque que ce polytope est défini par $n + m$ contraintes et qu'il est borné.

3.1.1 Algorithme du Simplexe

L'algorithme du simplexe est une méthode classique de résolution de problèmes de programmation linéaires.

Sachant qu'il existe au moins une solution sur un des sommets du polytope convexe, l'algorithme consiste à partir d'un sommet du polyèdre, et de se déplacer à un sommet adjacent, dont la valeur de la fonction à maximiser sur ce nouveau sommet n'est pas inférieure à celle du sommet précédent.

L'algorithme du simplexe s'arrête une fois un maximum local trouvé, c'est à dire un sommet dont la valeur de la fonction à maximiser est supérieure à celle de tous les autres sommets adjacents.

Comme l'ensemble réalisable est convexe et que la fonction à optimiser est linéaire, le maximum local trouvé est un maximum global.

On considère un problème de programmation linéaire sous forme standard et on note e la variable entrante, l la variable sortante.

Les algorithmes suivant ont été tiré de [6].

Algorithm 1 Simplexe

```
(N, B, A, b, c, v) ← Initialiser-Simplexe(A, b, c)
while  $j \in N : c_j > 0$  do ‘
  Choisir  $j \in N$  tel que  $C_j > 0$ 
  for  $i \in B$  do
    if  $a_{ie} > 0$  then
       $\Delta_i \leftarrow b_i / a_{ie}$ 
    else
       $\Delta_i \leftarrow +\infty$ 
    Choisir  $l \in B$  minimisant  $\Delta_i$ 
  if  $\Delta_l = +\infty$  then
    Return Le problème est non bornée
  else
     $(N, B, A, b, c, v) \leftarrow \text{Pivot}(N, B, A, b, c, v, l, e)$ 
for  $i \in N$  do
  if  $i \in B$  then
     $\bar{x}_i \leftarrow b_i$ 
  else
     $\bar{x}_i \leftarrow 0$ 
Return  $(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n)$ 
```

Voici l’algorithme permettant de passer d’un sommet à un autre :

Algorithm 2 Pivot(N,B,A,b,c,v,l,e)

```
1- Calcul des coefficients de l’équation avec la nouvelle variable entrante  $x_e$ 
 $b'_e \leftarrow b_l / a_{le}$ 
for  $j \in N - \{e\}$  do
   $a'_{ej} \leftarrow a'_{lj} / a_{le}$ 
 $a'_{el} \leftarrow 1 / a_{le}$ 
2- Calcul des coefficients des contraintes restantes
for  $i \in B - \{e\}$  do
   $b'_i \leftarrow b_i - a_{ie} b'_e$ 
  for  $j \in N - \{e\}$  do
     $a'_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ie} a'_{ej}$ 
   $a'_{il} \leftarrow -a_{ie} a'_{el}$ 
3 - Calcul de la fonction objectif
 $v' \leftarrow v + c_e b'_e$ 
for  $j \in N - \{e\}$  do
   $c'_j \leftarrow c_j - c_e a'_{ej}$ 
 $c'_l \leftarrow -c_e a'_{el}$ 
4- Calcule des nouveaux ensembles de variables de bases/hors bases
 $N' = N - \{e\} \cup \{l\}$ 
 $B' = B - \{l\} \cup \{e\}$ 
Return  $(N', B', A', b', c', v')$ 
```

On ne détaille pas ici l’algorithme pour initialiser le simplexe à un sommet réalisable, on

peut se référer au livre [6] pour voir en détail l'algorithme du simplexe.

Il peut s'avérer que l'algorithme du simplexe ne termine pas à cause d'un phénomène dit de cyclage. C'est à dire que l'algorithme "retourne" sur un sommet qu'il a déjà évalué. Si cela s'avère être le cas, vu que le passage d'un sommet à un autre est déterministe, l'algorithme tournera en boucle dans ce cycle et ne s'arrêtera jamais.

En pratique, le cyclage n'arrive pratiquement jamais et l'on n'implémente pas de technique d'anti-cyclage car celles-ci rendraient la complexité de l'algorithme du Simplexe non-polynomial.

La complexité moyenne de l'algorithme du simplexe est polynomiale.

Remarque : Il existe d'autres algorithmes pour résoudre des problèmes de programmation linéaire en temps polynomiale comme la méthode du point intérieur. Dans le cas du transport optimal, on peut utiliser un autre algorithme similaire à l'algorithme du simplexe : l'algorithme Network Simplexe [4], qui s'avère avoir de très bonnes performances.

3.2 Régularisation entropique du Transport Optimal

3.2.1 Problème de Kantorovich Régularisé

La régularisation entropique du transport optimal consiste à modifier le problème de Kantorovich dans le cas discret en ajoutant une pénalisation, appelée entropie.

Cette méthode a l'avantage que le nouveau problème régularisé est strictement convexe et permet aussi d'avoir une manière efficace d'implémenter un algorithme de minimisation de ce problème.

Définition 3.2.4 (Entropie)

On définit l'entropie $H : \mathcal{M}_{n,m}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{M}_{n,m}(\mathbb{R}) :$

$$H(P) \stackrel{\text{def}}{=} -\sum_{i,j} P_{i,j} (\log(P_{i,j}) - 1)$$

Avec la convention : $H(P) = -\infty$ si $\exists (i,j) \in \llbracket 1;n \rrbracket \times \llbracket 1;m \rrbracket : P_{i,j} < 0$

On remarque que l'entropie est strictement concave, en effet :

$$\partial^2 H(P) = -\text{Diag}(1/P_{i,j})$$

Définition 3.2.5 (Problème de Kantorovich régularisé)

Étant donné $a \in \sum_n$, $b \in \sum_m$, une matrice de coût $C \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ et $\varepsilon > 0$ on définit :

$$L_C^\varepsilon(a,b) = \min \left\{ \sum_{i,j} C_{ij} P_{ij} - \varepsilon H(P) : P \in \Pi(a,b) \right\}$$

Le réel ε est appelé le **terme de régularisation**.

Du à la concavité-forte de l'entropie, la fonction à minimiser est donc strictement convexe et donc si elle possède un minimiseur, il est unique.

On peut voir que le problème de Kantorovich régularisé converge vers le problème non régularisé, ce théorème est énoncé ci-dessous.

Théorème 3.2.6 (Convergence du problème régularisé)

Soit $L_C(a, b)$ un problème de Kantorovich discret et $L_C^\varepsilon(a, b)$ sont problème régularisé par $\varepsilon > 0$:

La solution $L_C^\varepsilon(a, b)$ converge vers $L_C(a, b)$ quand $\varepsilon \rightarrow 0$

En particulier, la solution du problème régularisé converge vers la solution du problème non régularisé ayant la plus grande entropie.

Démonstration : Soit $(\varepsilon_n)_\mathbb{N}$ une suite de réels positifs convergeant vers 0. On associe à $(\varepsilon_n)_\mathbb{N}$ la suite $(P_n)_\mathbb{N}$ où P_n est la solution de $L_C^{\varepsilon_n}(a, b)$.

Comme $\Pi(a, b)$ est un polytope fermé borné et étant en dimension finie, on peut extraire une sous suite $(P_{n_k})_{k \in \mathbb{N}}$ convergeant vers $P^* \in \Pi(a, b)$.

Soit $P \in \Pi(a, b)$ tel que P soit solution de $L_C(a, b)$, pour tout $k \in \mathbb{N}$ on a :

$$0 \leq \sum_{i,j} C_{ij} P_{n_k ij} - H(P_{n_k}) \leq \sum_{i,j} C_{ij} P_{ij} - H(P)$$

Donc :

$$0 \leq \sum_{i,j} C_{ij} P_{n_k ij} - \sum_{i,j} C_{ij} P_{ij} \leq \varepsilon_{n_k} (H(P_{n_k}) - H(P))$$

Pour $k \rightarrow +\infty$, comme H est bornée supérieurement, on a que $L_C(a, b) = \sum_{i,j} C_{ij} P_{ij}^*$, et de

plus comme $0 \leq \varepsilon_{n_k} (H(P_{n_k}) - H(P))$ on a que $H(p) \leq H(P^*)$ ce qui conclut.

3.2.2 Algorithme de Sinkhorn

Comme exposé dans [7], la régularisation entropique du problème de Kantorovich permet par l'algorithme de Sinkhorn d'approximer rapidement le problème non régularisé.

Théorème 3.2.7

Etant donnée $a \in \sum_n$, $b \in \sum_m$, une matrice de coût $M \in \mathcal{M}_{m,n}(\mathbb{R})$, $\varepsilon > 0$ et leur problème de Kantorovich régularisé, on a :

$$L_C^\varepsilon(a, b) = \min_{P \in \Pi(a, b)} KL(P|K)$$

De plus la solution P sera de la forme : $P_{ij} = u_i K_{ij} v_j$ avec $u \in \mathbb{R}^n$ et $v \in \mathbb{R}^m$

Où KL la **divergence de Kullback-Leibler** est défini, étant donné $P, M \in \mathcal{M}_{n,m}(\mathbb{R})$ par :

$$KL(P|K) \stackrel{def}{=} \sum_{i,j} P_{ij} \log\left(\frac{P_{ij}}{K_{ij}}\right) - P_{ij} + K_{ij}$$

Et K est le **noyau de Gibbs** : $K = (k_{ij}) \in \mathcal{M}_{n,m}(\mathbb{R})$ avec $K_{ij} = \exp\left(\frac{-C_{ij}}{\varepsilon}\right)$.

Ce théorème est démontré dans [7].

Les contraintes sur le fait que le minimiseur $P = \text{Diag}(u)K\text{Diag}(v)$ appartient au couplage $\Pi(a, b)$ se réécrivent :

$$\text{Diag}(u)K\text{Diag}(v)\mathbb{1}_m = a \text{ et } \text{Diag}(v)K\text{Diag}(u)\mathbb{1}_n = b$$

L'algorithme de Sinkhorn décrit ci-dessous permet de trouver deux vecteurs u et v répondant à ces contraintes et comme la solution du problème de Kantorovich régularisé est unique, la matrice trouvée est bien le minimiseur P .

Algorithm 3 Sinkhorn

```

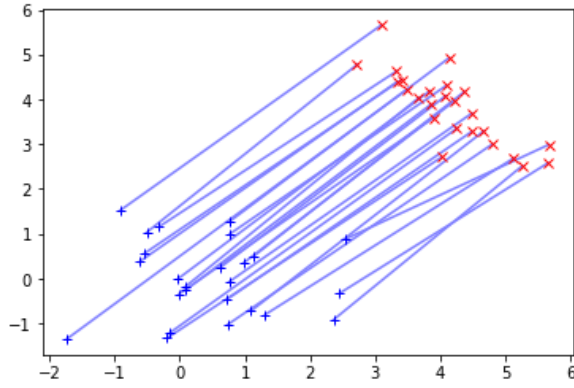
 $K \leftarrow \exp\left(\frac{-C}{\varepsilon}\right)$ 
 $u = \mathbb{1}_n$ 
repeat
   $u \leftarrow \frac{a}{Kv}$ 
   $v \leftarrow \frac{b}{{}^TKu}$ 
until Convergence
Return  $Diag(u)KDiag(v)$ 

```

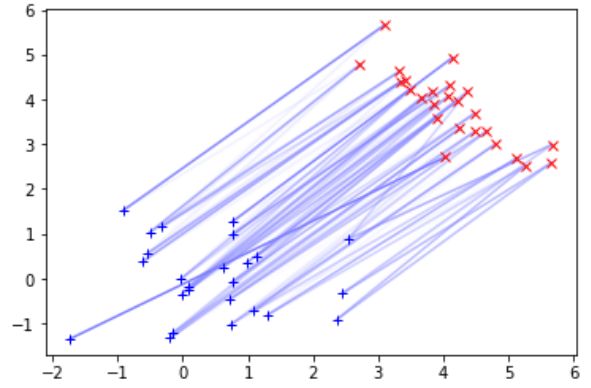
Avec $\frac{a}{b} = \frac{a_i}{b_i}$ pour $(a, b) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$

Illustration de l'algorithme de Sinkhorn

Transport entre deux distributions de masses uniformes de 25 points dans le plan, avec comme coût la distance euclidienne au carré :



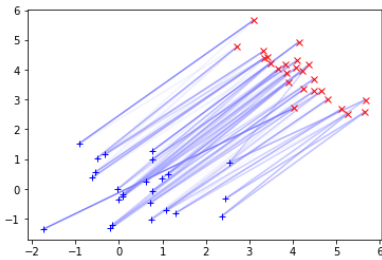
(a) Transport non régularisé



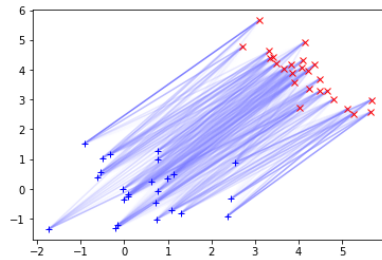
(b) Transport régularisé : $\varepsilon = 10^{-3}$

Illustration de l'importance du terme de régularisation

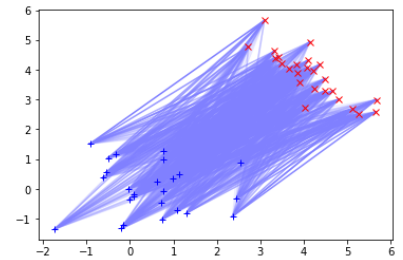
En reprenant le même problème que le paragraphe ci-dessus, voici une illustration pour montré l'importance du terme de régularisation ε :



(a) Régularisation : $\varepsilon = 10^{-3}$



(b) Régularisation : $\varepsilon = 10^{-2}$



(c) Régularisation : $\varepsilon = 10^{-1}$

Contraintes du problème de transport régularisé :

Bien que le transport optimal régularisé comporte des avantages de rapidité, dans certain

cas l'approximation du transport non régularisé ne sera pas assez bonne du au fait qu'informatiquement, on est limité sur la précision des nombres réels.

En effet, si on choisit un ε trop proche de zéro, des problèmes numériques peuvent apparaître étant donné que la précision limitée des machines approximerait certains réels par zéros et cela induirait des divisions par zéros.

Dans la section d'application du transport optimal en imagerie, on verra un exemple où le transport régularisé n'est pas une approximation satisfaisante du problème de Kantorovich.

4 Transport Optimal appliqué aux images

Dans cette partie, le but est d'appliquer le transport optimal entre deux images en transférant l'histogramme de couleur de l'une des images sur l'autre.

Ce problème est bien un transport entre deux distributions de masses (les histogrammes de couleurs).

Néanmoins, le transport optimal impose que les mesures de départ et d'arrivée soient de même masses. Il faudra donc travailler sur les histogrammes de couleurs pour pouvoir résoudre le transfert de couleur. En effet, on voudrait que chaque couleur soit de mêmes masses et donc il faut qu'il y ait le même nombre de couleur sur les deux images. Ensuite on pourra comparer la résolution du problème entre deux algorithmes, un résolvant le problème exact de transport (Network Simplex) et un autre résolvant un problème régularisé (Algorithme de Sinkhorn).

4.1 Algorithme K-Mean

Pour que les histogrammes aient le même nombre d'atomes, nous allons utiliser les algorithmes K-Mean et K-Nearest Neighbor comme dans [8] Étant donné un ensemble de points $X = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^d$, le but est de partitionner ces points en $K \leq n$ ensembles : $S = (S_1, \dots, S_K)$ en minimisant la somme des distances euclidiennes au carré de chaque point au centre de gravité de son ensemble.

C'est à dire, de trouver :

$$\arg \min_S \sum_{i=1}^K \sum_{x \in S_i} |x - \mu_i|^2$$

Où μ_i est la moyenne (centre de gravité) de S_i .

Le problème ci-dessus est NP-Complet, néanmoins l'algorithme K-mean est un algorithme convergent en temps polynomial $O(K*n*d)$ vers un minimum local du problème.

Principe Algorithmique :

L'algorithme K-mean prend d'abord K points de \mathbb{R}^d appelés centroïdes.

Ensuite la boucle à répéter est la suivante :

Chaque point de X est associé au centroïde qui lui est le plus proche. On a donc K ensembles de points (où le k -ème ensemble représente les points associés au k -ème centroïde).

Pour chaque ensemble, on détermine sa moyenne, celles-ci deviennent les nouveaux centroïdes.

Pour l'arrêt de l'algorithme, on peut demander la fin de la boucle au bout d'un nombre fini d'itérations et/ou un critère sur le changement de valeur de la fonction à minimiser (un changement de la valeur, un changement de valeur supérieur à une certaine valeur) et/ou

un critère de changement des centroïdes.

Dépendance de l'initialisation :

L'algorithme est dépendant de l'initialisation aléatoire des valeurs du premier ensemble de centroïdes, celui-ci joue un rôle sur la valeur du minimum local vers lequel l'algorithme va converger.

Pour pallier à ce problème, il faut réitérer l'algorithme N fois et prendre la valeur donnant le minimum local le plus petit.

Pour ne pas perdre trop de temps en répétant N fois l'algorithme, il est judicieux de paralléliser les itérations de l'algorithme.

4.2 Algorithme K-Nearest Neighbor

L'algorithme K-Nearest Neighbor, comme son nom l'indique, consiste à interpoler les valeurs d'un ensemble de points $X = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^d$ par celle de son voisin le plus proche dans l'ensemble $S = (S_1, \dots, S_K)$. La complexité de l'algorithme est $O(n \cdot K)$.

Principe Algorithmique :

Pour tout point x_i de X , remplacer sa valeur par celle de $\arg \min_{S_j \in S} d(x_i, S_j)$

Où d est une distance dans l'espace où se trouve l'ensemble X .

Exemple d'utilisation des deux algorithmes : Étant donné une image, on peut utiliser ces deux algorithmes pour déterminer les K-couleurs dominantes de celle-ci et interpoler l'image qu'avec cet ensemble de K-couleurs.



FIGURE 4 – Image originale : 56 215 couleurs RGB



(a) 10 Couleurs RGB

(b) 40 Couleurs RGB

(c) 250 Couleurs RGB

Algorithmes K-Mean sur des images avec beaucoup de couleurs

Lorsque notre image a un histogramme de couleur très éparpillé, on peut prendre le parti de choisir aléatoirement les couleurs assignées aux centroïdes et donc se passer de l'algorithme de K-Mean avec un rendu visuel pratiquement, voir, aussi bon. Cela permet de réduire assez considérablement notre transport de couleurs d'images.

On peut illustrer ce parti pris avec l'image précédente :



(a) 250 Couleurs avec K-Mean



(b) 250 Couleurs aléatoires

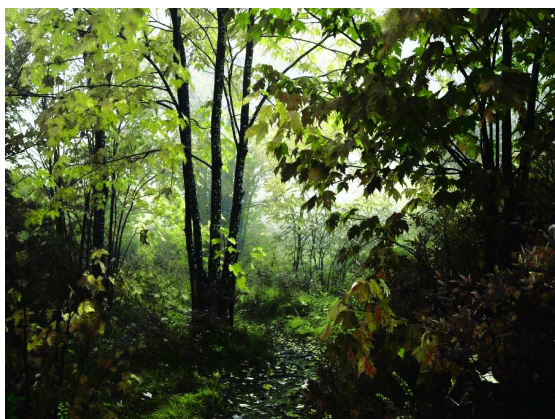
4.3 Résultats obtenus



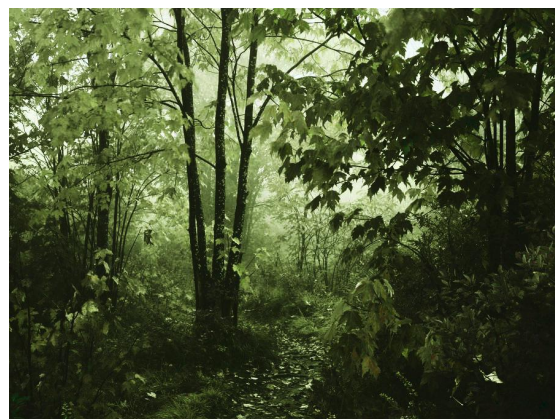
(a) Histogramme à modifier



(b) Histogramme à transporter



(a) Network Simplex



(b) Sinkhorn (terme de régularisation : 0.001)

On voit que l'algorithme de Sinkhorn et donc le transport optimal régularisé est moins bon pour le transport de couleurs. En effet, le terme de régularisation (ne pouvant pas être trop petit dû à des problèmes numériques donnant des divisions par zéros) contraint le transport à être plus éparpillé.

5 Barycentres de Wasserstein

5.1 Notations

Voici quelques définitions nécessaires pour qui seront utiles pour résoudre le problème de barycentre de Wasserstein dans le cas régularisé..

Définition 5.1.1 (Divergence de Kullback-Leibler)

La divergence de Kullback-Leibler entre $\gamma \in \mathbb{R}_N^+$ et $\xi \in \mathbb{R}_+^{N \times N}$ est définie par

$$KL(\gamma|\xi) := \sum_{i,j=1}^n \gamma_{i,j} (\log(\gamma_{i,j}/\xi_{i,j}) - 1)$$

Définition 5.1.2 (Projection de Kullback-Leibler)

Étant donné un ensemble convexe $C \in \mathbb{R}^{N \times N}$, la projection par la divergence de Kullback-Leibler est donnée par

$$P_C^{KL}(\xi) := \operatorname{argmin} \{KL(\gamma|\xi); \gamma \in C\}$$

Définition 5.1.3 (Distance de Wasserstein régularisée)

La distance de Wasserstein régularisée entre deux mesures de probabilités $(p, q) \in \sum_N^2$, $p > 0$ et de régularisation $\varepsilon > 0$ est

$$W_\varepsilon(p, q) := \min \left\{ \left(\sum_{i,j=1}^n \gamma_{i,j} |x_i - y_j|^2 \right) - \varepsilon H(\gamma); \gamma \in \Pi(p, q) \right\}$$

Remarque : Dans le cas où $\varepsilon = 0$ on retrouve la 2-distance de Wasserstein au carrée, dans le cas discret.

5.2 Formulation du Problème

La notion de barycentre de Wasserstein à été premièrement introduite dans [1] dans le cas de mesures quelconques. Dans le cas de mesures discrètes, on peut le formuler de la façon suivante :

Étant donné un ensemble de mesures de probabilités discrètes $(p_k)_{K \in \mathbb{N}}$ avec $p_k \in \sum_N$ munies de leurs masses $a = (a_k)_{K \in \mathbb{N}} \in \sum_K$, on souhaite calculer leur barycentre suivant la distance de Wasserstein. Comme expliqué dans [12], la caractérisation du barycentre revient à résoudre le problème suivant :

$$\min \left\{ \sum_{k=1}^K a_k \mathcal{W}_2^2(p_k, p); p \in \sum_N \right\}$$

Pour résoudre ce problème informatiquement, nous allons utiliser la reformulation régularisé du problème comme dans [2] avec un paramètre $\varepsilon > 0$ fixé, le problème est alors

$$\min \left\{ \sum_{k=1}^K a_k W_\varepsilon(p_k, p); p \in \sum_N \right\}$$

qui peut être réécrit comme :

$$\min \left\{ KL_a(\gamma|\xi) := \sum_{k=1}^K a_k KL(\gamma_k|\xi_k); \gamma \in C_1 \cap C_2 \right\}$$

Avec $\xi_k := \xi := e^{-C/\varepsilon} \forall k$, où C est la matrice de coût et les ensembles C_1 et C_2 définis comme suit :

$$\begin{aligned} C_1 &:= \left\{ \gamma = (\gamma_k)_k \in (\sum_N)^K; \forall k, \gamma_k^T \mathbb{1} = p_k \right\} \\ C_2 &:= \left\{ \gamma = (\gamma_k)_k \in (\sum_N)^K : \exists p \in \mathbb{R}^N, \gamma_k \mathbb{1} = p \right\} \end{aligned}$$

5.3 Projection Itérative de Bregman

Soit un problème de minimisation de la forme :

$$\min \{ KL(\gamma|\xi); \gamma \in C \}$$

Où C est une intersection d'ensemble convexe fermé : $C = \cap_{l=0}^{L-1} C_l$ telle que $C \cap \mathbb{R}_+^{N \times N} \neq \emptyset$. Dans le cas où les ensembles convexes C_l sont des sous espaces affines, on peut résoudre le problème de minimisation en itérant la projection de Kullback-Leibler, en commençant avec $\gamma^{(0)} = \xi$ et en calculant :

$$\forall n > 0, \gamma^{(n)} := P_{C_n(mod L)}^{KL}(\gamma^{(n-1)})$$

On a, $\gamma^{(n)} \rightarrow P_C^{KL}$ quand $n \rightarrow \infty$. Ce résultat a été premièrement démontré dans [2]

5.3.1 Application au barycentre

Comme montré dans [2],[10], la projection itérative de Bregman peut être appliquée à KL_λ . Et cela revient à itérer $\gamma^{(n)} = (\gamma_k^{(n)})_k$ qui satisfait pour tout k :

$$\gamma_k^{(n)} = \text{diag}(u_k^{(n)}) \xi \text{diag}(v_k^{(n)})$$

Avec $(u_k^{(n)}, v_k^{(n)}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ en initialisant $v_k^{(0)} = \mathbb{1} \forall k$ et en calculant :

$$u_k^{(n)} = \frac{p^{(n)}}{\xi v_k^{(n)}} \text{ et } v_k^{(n+1)} = \frac{p_k}{\xi^T u_k^{(n)}}$$

Où $p^{(n)}$ est l'estimation courante du barycentre, calculé comme suit :

$$p^{(n)} = \prod_{k=1}^N (\xi v_k^{(n)})^{a_k}$$

Avec $\frac{a}{b} = \frac{a_i}{b_i}$ pour $(a, b) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$

Traduction Algorithmique : Voici la traduction algorithmique pour résoudre un problème de barycentre de Wasserstein régularisé :

Algorithm 4 Bregman Barycenter Sinkhorn

```

 $\xi \leftarrow \exp(-M/reg)$ 
 $p \leftarrow \xi$ 
 $v_k \leftarrow \mathbb{1}_N \forall k$ 
repeat
   $v_k = \frac{p_k}{\xi^T u_k} \forall k$ 
   $p \leftarrow \prod_{k=1}^N (\xi v_k^{(n)})^{a_k}$ 
   $u_k \leftarrow \frac{p}{\xi v_k} \forall k$ 
until Convergence

```

Où $reg > 0$ est le terme de régularisation, $M \in \mathbb{M}_{N \times N}(\mathbb{R})$ est la matrice de coût, $P = (p_k \in \mathbb{M}_{K \times N}(\mathbb{R}))$ est la matrice des mesures de probabilités, (a_k) est le poids des mesures.

5.4 Application des Barycentres de Wasserstein en Imagerie

Les illustrations des sections suivantes ont été faites en Python.

5.4.1 Barycentre 1D

Voici un exemple de l'utilisation des barycentres de Wasserstein, entre deux gaussiennes (approximées avec 100 points chacune). Les poids étaient respectivement $(1-0.1*i, 0.1*i)$ pour $i \in \llbracket 1; 10 \rrbracket$

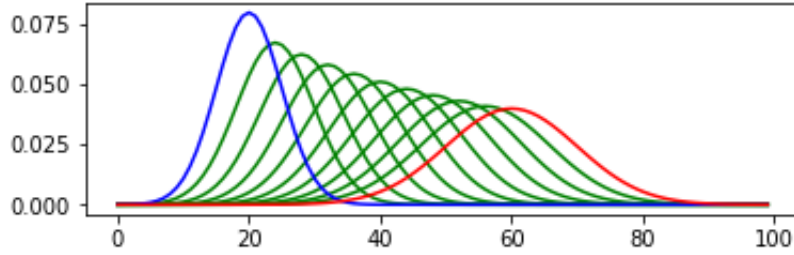


FIGURE 9 – Barycentres entre deux gaussiennes, régularisation= $1e^{-3}$

5.4.2 Comparaison avec l'expression exacte

Dans le cas de deux gaussiennes dans \mathbb{R}^d , il est possible de trouver une formulation exacte du barycentre [3].

En effet, pour des gaussiennes, la distance 2-Wasserstein \mathbb{W}_2 est en relation avec la distance de Bures : $d(A, B) = [tr A + tr B - 2tr(A^{\frac{1}{2}} B A^{\frac{1}{2}})^{\frac{1}{2}}]^{\frac{1}{2}}$

$$\mathcal{W}_2^2(\mu, \nu) = \min_{\gamma \in \Pi(\mu, \nu)} \mathbb{E}(\|x - y\|^2) = d(A, B)^2 + \|m_A - m_B\|^2$$

Où A et B sont les matrices de covariance de nos deux vecteurs gaussiens et m_A, m_B leurs moyennes respectives.

Ainsi, en translatant nos lois gaussiennes pour que leurs moyennes soient chacune de 0, on a :

$$\mathcal{W}_2^2(\mu, \nu) = d(A, B)^2$$

En appliquant cela a nos fonctions gaussiennes 1D, on a que le barycentre de poids $(1-t, t)$ entre deux gaussiennes d'espérances et d'écart types : (m_1, σ_1) et (m_2, σ_2) , le barycentre sera la fonction gaussienne d'espérances et d'écart types : $((1-t)m_1 + tm_2, (1-t)\sigma_1 + t\sigma_2)$

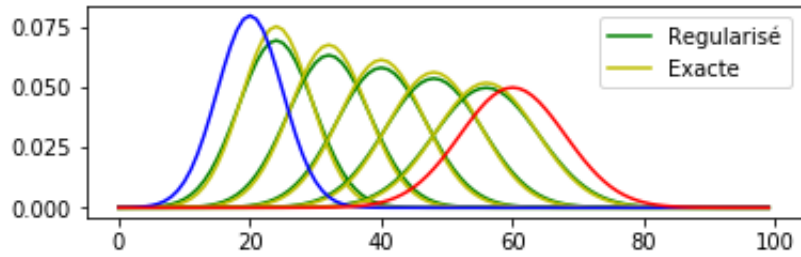


FIGURE 10 – Différence transport exacte et régularisé, régularisation= $1e^{-3}$

On voit bien la tendance de la régularisation à "écraser" le résultat exact.

5.4.3 Barycentre en 2D

Dans cette partie, le but est d'appliquer le problème de barycentre de Wasserstein à des images 2D, représentant chacune des mesures de probabilités en 2D.

Barycentre entre quatre images avec les poids déterminés par interpolation bilinéaire :

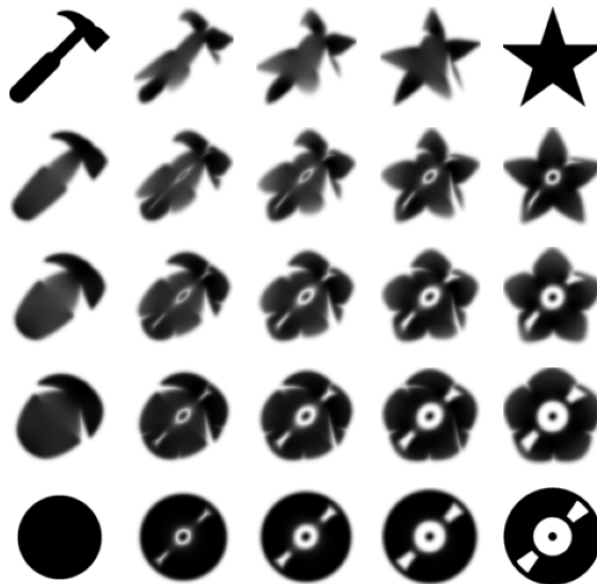


FIGURE 11 – Barycentre entre quatre images, régularisation $3e^{-4}$

5.4.4 Influence du terme de régularisation

L'influence du terme de régularisation ε est importante comme vont le montrer les images ci-dessous.

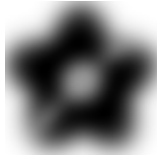
Cependant, le terme de régularisation ne peut pas être trop petit, pour éviter des erreurs numériques (divisions par 0 dans l'algorithme dû à l'approximation numérique de très petit nombres par 0).

Néanmoins, connaissant ce défaut, il existe des algorithmes pour pallier à cela comme dans [13], section "Entropic Sharpening".

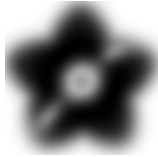
Images initiales :



Isobarycentre des deux images en fonction de ε (poids : $[0.5, 0.5]$) :



(a) $\varepsilon = 5e^{-3}$



(b) $\varepsilon = 2.5e^{-3}$



(c) $\varepsilon = 1e^{-3}$



(d) $\varepsilon = 5e^{-4}$

Pour le barycentre entre les 4 images précédentes, le terme de régularisation n'a pas pu être pris plus petit que $3e^{-4}$ car avec certains poids, il y avait des erreurs numériques. Néanmoins, j'ai préféré ne pas utiliser "d'affûtage" et montrer les vrais résultats.

6 Annexe

Dans le but d'étudier la théorie du transport optimal, il y avait beaucoup de notions préalables à voir, notamment pour un étudiant de L2. Cette partie est donc majoritairement consacrée à de brefs résumés des notions que j'ai du étudier dans le but de me consacrer à la théorie du transport optimal ainsi qu'à l'énonciation des théorèmes utilisés. Cependant, pour alléger cette section, il n'y aura pas de partie consacrée à la topologie métrique et générale, bien que certaines notions soient indispensables.

6.1 Mes programmes

Les algorithmes intéressants étudiés et utilisés lors de mon TIPÈ ont été retranscrits en algorithmique dans cette rédaction. Néanmoins j'ai hébergé sur Github certains de mes programmes : [lien](#).

Dont entre autres :

Programme sur le transfert de couleur section 4.3 : [lien](#).

Programme sur le barycentre de Wassertein entre des images 2D section 5.4.3 : [lien](#).

6.2 Analyse Convexe

Cette partie a été très essentiellement rédigée par la lecture de [14], on peut se référer à ce livre pour les démonstrations des propriétés suivantes.

Définition 6.2.1 (Fonction Convexe)

Une fonction $f : I \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \cup +\infty$ est dite convexe si $f \neq +\infty$ et que pour tout $x, y \in \mathbb{R}^d$ et tout $t \in [0, 1]$:

$$f(tx + (1-t)y) \leq t(f(x) + (1-t)f(y))$$

Définition Bis :

Une fonction $f : I \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ est dite convexe si il existe une famille de fonction affine f_α tel que : $\forall x \in I : f(x) = \sup_\alpha f_\alpha(x)$.

Définition 6.2.2 (Transformé de Legendre-Fenchel)

Pour une fonction $f : I \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \cup +\infty$ où $f \neq +\infty$ on définit sa transformée de Legendre-Fenchel f^* par :

$$f^*(y) = \sup_{x \in I} \langle x|y \rangle - f(x)$$

où $\langle | \rangle$ est le produit scalaire canonique de \mathbb{R}^d .

Proposition 6.2.3 (Transformée de Legendre-Fenchel)

- f^* est convexe
- $f \leq g \Rightarrow f^* \geq g^*$
- Pour tout $x, y \in \mathbb{R}^d$: $f(x) + f^*(y) \geq \langle x|y \rangle$

Théorème 6.2.4

Une fonction semi-continue inférieurement $f : I \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \cup +\infty$ est convexe si et seulement si $f = f^{**}$

Remarque : On peut généraliser ces résultats en dimension infinie. ON a d'ailleurs utilisé le fait $H = H^{**}$ pour le théorème 2.3.7.

6.3 Dualité en programmation linéaire

Le but de la dualité en programmation linéaire est, étant donné un problème de programmation linéaire de maximisation (dit problème primal), trouver un problème linéaire de minimisation (dit problème dual) dont la valeur optimale est celle du problème linéaire primal.

Définition 6.3.5 (Problème dual)

Étant donné $A = (a_{ij}) \in M_n(\mathbb{R})$, $b = (b_i) \in \mathbb{R}^m$, $c = (c_j) \in \mathbb{R}^n$ et $x = (x_i) \in \mathbb{R}^n$ et le problème de maximisation linéaire associé (L_P) , on définit le problème dual :

$$(L_D) : \text{Maximiser } \sum_{i=1}^n b_i y_i$$

Sous les contraintes :

$$\begin{cases} \forall j \in \llbracket 1 ; n \rrbracket : \sum_{i=1}^m a_{ij} y_i \geq c_j \\ \forall i \in \llbracket 1 ; m \rrbracket : y_i \geq 0 \end{cases}$$

Proposition 6.3.6 (Dualité faible)

Soit x une solution réalisable du problème primal et soit y une solution réalisable du problème dual. On a alors :

$$\sum_{j=1}^n c_j x_j \leq \sum_{i=1}^m b_i y_i$$

Théorème 6.3.7 (Dualité en programmation linéaire)

Si le problème primal possède un ensemble réalisable non vide, alors l'ensemble réalisable du problème dual est non vide et inversement.

Dans ce cas, on a :

$$L_P = L_D$$

On pourra se référer à [6] pour les démonstrations de la propriété et du théorème énoncés ci-dessus.

6.4 Théorie de la mesure et Intégration

Théorème 6.4.8 (Théorème de convergence monotone)

Soit (E, τ, μ) un espace mesuré.

Pour toute suite croissante (f_n) de fonctions mesurables sur E et à valeurs dans \mathbb{R}^+ , la limite simple de la suite est mesurable et l'on a

$$\int \lim f_n d\mu = \lim \left(\int f_n d\mu \right)$$

Théorème 6.4.9 (Lemme de recollement)

Étant donné X_1, X_2, X_3 des espaces métriques Polonais, μ_1, μ_2, μ_3 des mesures de probabilités respectivement sur X_1, X_2, X_3 et $\pi_{1,2} \in \Pi(\mu_1, \mu_2)$, $\pi_{2,3} \in \Pi(\mu_2, \mu_3)$ alors il existe $\pi \in \mathbb{P}(X_1 \times X_2 \times X_3)$ de marginales $\pi_{1,2}$ sur $X_1 \times X_2$ et $\pi_{2,3}$ sur $X_2 \times X_3$

On pourra consulté [12] pour ce lemme.

6.5 Analyse fonctionnelle

Pour étudier la théorie du transport optimal, notamment les preuves d'existences de minimiseurs et maximiseurs pour les problèmes primales et duales de Kantorovich, il fallait connaître certaines notions d'analyse fonctionnelle, réécrites dans cette partie.

Le livre de référence presque exclusivement utilisé pour cette partie est [5].

Dans cette partie, on note E un espace de Banach (espace vectoriel complet) sur \mathbb{R} et E' son dual muni de la norme $\|f\| = \sup_{\substack{x \in E \\ \|x\|=1}} |\langle f, x \rangle|$.

Définition 6.5.10 (Topologie faible)

La topologie faible $\sigma(E, E')$ sur E est la topologie la moins fine (avec le moins d'ouverts) rendant continue toutes les formes linéaires de E

Définition 6.5.11 (Topologie faible-*)

La topologie faible-* $\sigma(E', E)$ est la topologie la moins fine (avec le moins d'ouverts) sur E' rendant continues toutes les applications $(\phi_x)_{x \in E}$ où les applications $\phi_x : E' \rightarrow \mathbb{R}$ sont définies par $f \mapsto \phi_x(f) = \langle f, x \rangle$.

Définition 6.5.12 (Convergence faible)

Étant donné une suite $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \in E$, on désigne par $x_n \rightharpoonup x$ la convergence de x_n vers x pour la topologie faible $\sigma(E; E')$.

Définition 6.5.13 (Convergence *-faible)

Etant donné une suite $(f_n)_{n \in \mathbb{N}} \in E'$, on désigne par $f_n \xrightarrow{*} f$ la convergence de f_n vers f pour la topologie *-faible $\sigma(E'; E)$.

Théorème 6.5.14 (Banach-Alaoglu)

Soit E un espace de Banach et $(\xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de E' .
Si E est séparable et la suite (ξ_n) est bornée, alors il existe une sous suite (ξ_{n_k}) et $\xi \in E'$ tel que $\xi_{n_k} \xrightarrow{*} \xi$.

Les énoncés des deux théorèmes suivants sont ceux que l'on trouve dans [12].

Théorème 6.5.15 (Représentation de Riesz)

Soit X un espace métrique séparable et localement compact. Munissons $C_0(X)$ de la norme du sup.

Alors :

$$\forall \xi \in C'_0(X) \exists ! \lambda \in \mathbb{M}(X) \text{ tel que } \langle \xi, \phi \rangle = \int \phi d\lambda, \forall \phi \in C_0(X)$$

De plus $C'_0(X)$ et $\mathbb{M}(X)$ muni de la norme $\|\lambda\| = |\lambda|(X)$ sont isomorphe.

Définition 6.5.16 (Equicontinue)

Soit (X, d) et (Y, d') deux espaces métriques. Une suite de fonction f_n appartenant $C(X, Y)$ est dite équicontinue si :

$$\forall x \in X, \forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0, \forall y \in X, d(x, y) < \delta \Rightarrow d'(f(x), f(y)) < \varepsilon$$

Théorème 6.5.17 (Théorème d'Ascoli-Arzelà)

Si X est un espace métrique compact et $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de fonctions de X dans \mathbb{R} équicontinue et equibornée alors il existe une sous suite (f_{n_k}) convergeant uniformément vers une fonction f .

Références

- [1] AGUEH M et GARLIER G. « Barycenters in the Wasserstein space ». In : *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 43(2) (2011), p. 904-924. URL : <https://arxiv.org/abs/1901.08686>.
- [2] BENAMOU J-D, G G Carlier, CUTURI M, NENNA L et PEYRÉ G. « Iterative Bregman Projections for Regularized Transportation Problems ». In : *SIAM Journal on Scientific Computing* 37(2) (2014), p. 1111-1138. URL : <https://arxiv.org/abs/1412.5154>.
- [3] BHATIA R, JAIN T et Y Y Lim. « On the Bures-Wasserstein distance between positive definite matrices ». In : *Expositiones Mathematicae* 37(2) (2019), p. 165-191. URL : <https://arxiv.org/abs/1712.01504>.
- [4] BONNEEL N. *Github : Fast Network Simplex for Optimal Transport*. URL : https://github.com/nbonneel/network_simplex.
- [5] BREZIS H. *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. Universitext. Springer, 2011. ISBN : 978-0-387-70913-0.
- [6] CORMEN T, LEISERSON C et RIVEST R. *Introduction to Algorithms*. Cambridge, MA : MIT Press, 2001.
- [7] CUTURI M. « Sinkhorn Distances : Lightspeed Computation of Optimal Transportation Distances ». In : *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)* 26 (2013), p. 2292-2300. URL : <https://arxiv.org/abs/1306.0895>.
- [8] FERRADANS S, PAPADAKIS N, PEYRE G et AUJOL J. « Regularized Discrete Optimal Transport ». In : *Scale Space and Variational Methods in Computer Vision. SSVM* 7893 (2013). URL : <https://arxiv.org/pdf/1307.5551.pdf>.
- [9] KANTOROVICH L. « On the transfer of masses ». In : *Dokl. Acad. Nauk. USSR* 37.7-8 (1942).
- [10] KROSHNIN A, DVINSKIKH A, DVURECHENSKY P, GASNIKOV A, TUPITSA N et C C Uribe. *On the Complexity of Approximating Wasserstein Barycenter*. URL : <https://arxiv.org/abs/1901.08686>.
- [11] MONGE G. « Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais ». In : *Histoire de l'Académie royale des sciences avec les mémoires de mathématique et de physique tirés des registres de cette Académie* (1781), p. 666-705.
- [12] SANTAMBROGIO F. *Optimal Transport for Applied Mathematicians*. Calculus of Variations, PDEs, and Modeling. ISBN : 9783319208282.
- [13] SOLOMON J, DE GOES F, PEYRÉ G, CUTURI M, BUTSCHER A, NGUYEN A, DU T et GUIBAS L. « Convolutional Wasserstein Distances : Efficient Optimal Transportation on Geometric Domains. » In : *ACM Transactions on Graphics* (2015). URL : https://people.csail.mit.edu/jsolomon/assets/convolutional_w2.compressed.pdf.
- [14] TYRELL ROCKAFELLAR R. *Convex analysis*. Princeton mathematical series 28. Princeton University Press, 1970. ISBN : 9780691080697.
- [15] VILLANI C. *Optimal transport, old and new*. Springer Berlin Heidelberg, 2009.