UNIVERSITÉ PARIS-SACLAY

FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY

MATHEMATIQUES ORSAY

Optimisation numérique

Transport Optimal

BARILLER Halvard
BERTRAND Virgile
LAHMI Elona

Partie 1 - Un problème de programmation linéaire

1. Soit $c := (C_{11}, ..., C_{1N}, C_{21}, ..., C_{NN}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ le vecteur de coût.
Soit $x := (\gamma_{11}, , ..., \gamma_{1N}, \gamma_{21}, ..., \gamma_{NN}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ le vecteur de couplage.
Soit $b := (\mu_1, ..., \mu_N, \nu_1, ...\nu_N) \in \mathbb{R}^{2N}$ le vecteur contenant les distributions μ et ν.
On cherche $A \in \mathbb{M}_{2N \times N^2}(\mathbb{R})$ telle que :

$$Ax = b \iff \begin{pmatrix} \langle a_1, x \rangle \\ \vdots \\ \langle a_N, x \rangle \\ \langle a_{N+1}, x \rangle \\ \vdots \\ \langle a_{2N}, x \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_n \\ \nu_1 \\ \vdots \\ \nu_n \end{pmatrix}, \quad a_i \in \mathbb{R}^{N^2}.$$

Il vient :

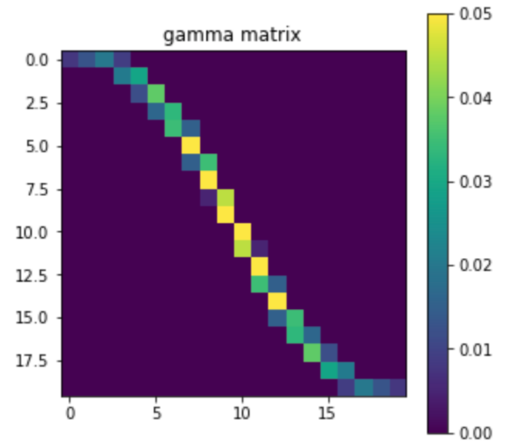
$$A = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 1 & & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & & & \vdots & \\ & \vdots & & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & & 1 & \dots & 1 \\ & & & & & & \\ & I_N & & \dots & & I_N & \end{pmatrix}$$

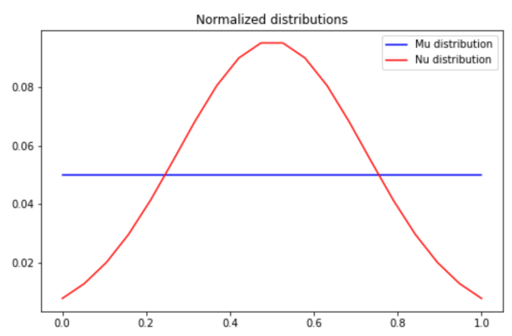
ou encore :

$$\forall i \in \{1, \dots, N\}, (A_{ij}) = \begin{cases} 1 & \text{si } (i-1)N + 1 \leq j \leq iN \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\forall i \in \{N+1, \dots, 2N\}, (A_{ij}) = \begin{cases} 1 & \text{si } j = Nk + (i - N), \ \forall k \in \{0, \dots, N-1\} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

3. On applique la fonction *solveOT* aux distributions $\begin{cases} \mu(x) = \chi_{[0,1]}(x) \\ \nu(x) = \exp\left(-10(y-0.5)^2\right) \end{cases}$ sur l'intervalle $[0, 1]$ discrétisé uniformément avec $N = 20$ points et $c(x, y) = |x - y|^2$.
La matrice de couplage obtenue est presque déterministe : on obtient en effet une matrice *sparse* dans le sens où on l'a (à peu de choses près) un seul élément non nul par ligne.
Cela correspondrait à une solution où chaque boulangerie livrerait à un unique café.





4. On observe que :

$$\gamma \in \Pi(\mu,\nu) \Longrightarrow \begin{cases} \forall i,\ \sum_{j=1}^{N} \gamma_{ij} = \mu_i \\ \forall j,\ \sum_{i=1}^{N} \gamma_{ij} = \nu_j \end{cases}$$
$$\Longrightarrow \begin{cases} \sum_{j=1}^{N} v_j \nu_j = \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} v_j \gamma_{ij} \\ \sum_{i=1}^{N} u_i \mu_i = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} u_i \gamma_{ij} \end{cases}$$
$$\Longrightarrow \sum_{i=1}^{N} u_i\mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j\nu_j = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} (v_j + u_i)\gamma_{ij}.$$

Il vient alors :

$$\sup_{u,v\in\mathbb{R}^N} \sum_{i=1}^{N} u_i\mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j\nu_j - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} (v_j + u_i)\gamma_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } \gamma \in \Pi(\mu,\nu) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\sup_{u,v\in\mathbb{R}^N} \sum_{i=1}^{N} u_i\mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j\nu_j - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} (v_j + u_i)\gamma_{ij} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} C_{ij}\gamma_{ij} = \begin{cases} \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} C_{ij}\gamma_{ij} & \text{si } \gamma \in \Pi(\mu,\nu) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

On peut réécrire le problème comme :

$$(\mathcal{MK}) = \inf_{\gamma\in\mathbb{R}_+^{N\times N}} \sup_{u,v\in\mathbb{R}^N} \sum_{i=1}^{N} u_i\mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j\nu_j - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} (v_j + u_i)\gamma_{ij} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} C_{ij}\gamma_{ij}$$

On obtient alors le problème dual en inversant sup et inf. Par ailleurs, on a :

$$\inf_{\gamma\in\mathbb{R}_+^{N\times N}} \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \left(C_{ij} - (v_j + u_i)\right)\gamma_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } u_i + v_j \leq C_{ij} \\ -\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

$$\inf_{\gamma\in\mathbb{R}_+^{N\times N}} \sum_{i=1}^{N} u_i\mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j\nu_j + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \left(C_{ij} - (v_j + u_i)\right)\gamma_{ij} = \begin{cases} \sum_{i=1}^{N} u_i\mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j\nu_j & \text{si } u_i + v_j \leq C_{ij} \\ -\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Enfin, avec l'inversion sup et inf, on peut écrire le problème dual comme :

$$(\mathcal{MK}_d) = \sup_{u,v\in\mathbb{R}^N} \left\{ \sum_{i=1}^{N} u_i\mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j\nu_j \mid \forall (i,j) \in I \times J, u_i + v_j \leq C_{ij} \right\}.$$

On obtient la forme cherchée en prenant le max.

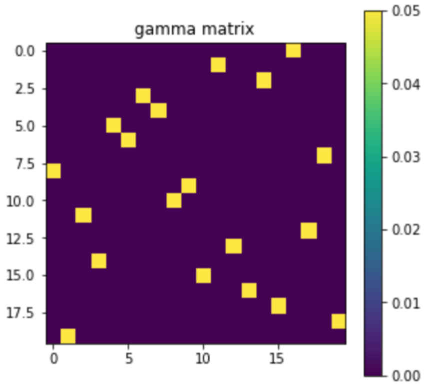
On peut ensuite réécrire $(\mathcal{MK}_d)$ sous forme vectorisée comme le dual de $(\mathcal{P})$.

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}) &= \min_{x\in\Pi(\mu,\nu)} \langle c, x\rangle \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}_+^{N\times N}} \max_{\lambda\in\mathbb{R}^{2N}} \langle c, x\rangle + \langle \lambda, b - Ax\rangle \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}_+^{N\times N}} \max_{\lambda\in\mathbb{R}^{2N}} \langle c - A^T\lambda, x\rangle + \langle \lambda, b\rangle \end{aligned}$$

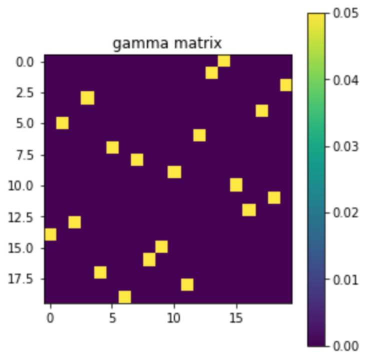
Par le même raisonnement que précédemment, on obtient $(\mathcal{D})$ en inversant min et max :

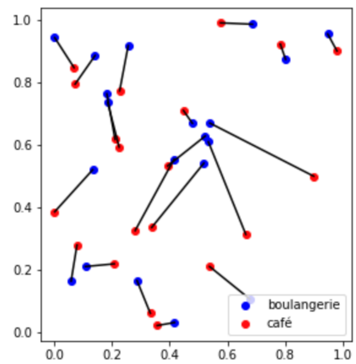
$$(\mathcal{D}) = \max_{\substack{\lambda \in \mathbb{R}^{2N} \\ c \geq A^T \lambda}} \langle \lambda, b \rangle, \quad \text{avec } \lambda \in \mathbb{R}^{2N}, \lambda = (u_1, \ldots, u_N, v_1, \ldots, v_N)^T.$$

5. Soit $\mu_i = \nu_j = \dfrac{1}{N}$, $\forall i, j$. Le couplage optimal obtenu est bien une matrice de permutation :



6. Soient $x_i, y_j \in \mathbb{R}^2$, et soit $C_{ij} = |x_i^1 - y_j^1|^2 + |x_i^2 - y_j^2|^2$. On obtient alors la solution suivante :





Partie 2 - Le problème dual et la fonction log-sum-exp

1. Soit $f : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R}_+$, telle que $f(x) = \log\left(\sum_{i=1}^{N} \exp(x_i)\right)$.

   1.1 Montrons que f est convexe. On a :

$$\frac{\partial f}{\partial x_j}(x) = \frac{\exp(x_j)}{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)}, \quad \text{et} \quad \begin{cases} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_k}(x) & = & \dfrac{-\exp(x_j)\exp(x_k)}{\left(\sum_{i=1}^N \exp(x_i)\right)^2} \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_j^2}(x) & = & \dfrac{\exp(x_j)}{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)} - \dfrac{\exp(x_j)^2}{\left(\sum_{i=1}^N \exp(x_i)\right)^2} \end{cases}$$

   On peut alors réécrire la Hessienne comme :

$$D^2 f(x) = \mathrm{diag}(\nabla f(x)) - \nabla f(x) \nabla f(x)^T.$$

On veut montrer que la Hessienne est positive. Soit $u \in \mathbb{R}^N$.

$$\begin{aligned}
\langle u, D^2 f(x)u\rangle =& u^T \nabla f(x) u - \|\nabla f(x)^T u\|^2 \geq 0 \iff \frac{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)u_i^2}{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)} \geq \left(\frac{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)u_i}{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)}\right)^2 \\
&\iff \left(\sum_{i=1}^N \exp(x_i)\right)\left(\sum_{i=1}^N \exp(x_i)u_i^2\right) \geq \left(\sum_{i=1}^N \exp(x_i)u_i\right)^2 \\
&\iff \|\sqrt{\exp(x)}\|^2 \|\sqrt{\exp(x)}u\|^2 \geq |\langle \sqrt{\exp(x)}, u\sqrt{\exp(x)}\rangle|^2.
\end{aligned}$$

On reconnaît l'inégalité de Cauchy-Schwarz, ce qui nous assure la positivité de la Hessienne et la convexité de f.

1.2 Soit $M = \max_{1\leq i\leq N} x_i$. Par croissance des fonctions log et exp, il vient :

$$\exp(M) \leq \sum_{i=1}^N \exp(x_i) \leq N\exp(M) \iff M \leq \log\left(\sum_{i=1}^N \exp(x_i)\right) \leq \log(N) + M.$$

1.3 D'après la question précédente, $\forall \varepsilon > 0$, on a :

$$\begin{aligned}
\frac{M}{\varepsilon} &\leq \log\left(\sum_{i=1}^N \exp\left(\frac{x_i}{\varepsilon}\right)\right) \leq \log(N) + \frac{M}{\varepsilon} \\
M &\leq \varepsilon \log\left(\sum_{i=1}^N \exp\left(\frac{x_i}{\varepsilon}\right)\right) \leq M + \varepsilon\log(N) \xrightarrow[\varepsilon\to 0]{} M.
\end{aligned}$$

2. On observe que, $\forall j \in J$, $v_j = \min_i C_{ij} - u_i$. On peut alors écrire :

$$v_j = -\max_i u_i - C_{ij} = -\lim_{\varepsilon\to 0} f_\varepsilon(u - C_{.,j}).$$

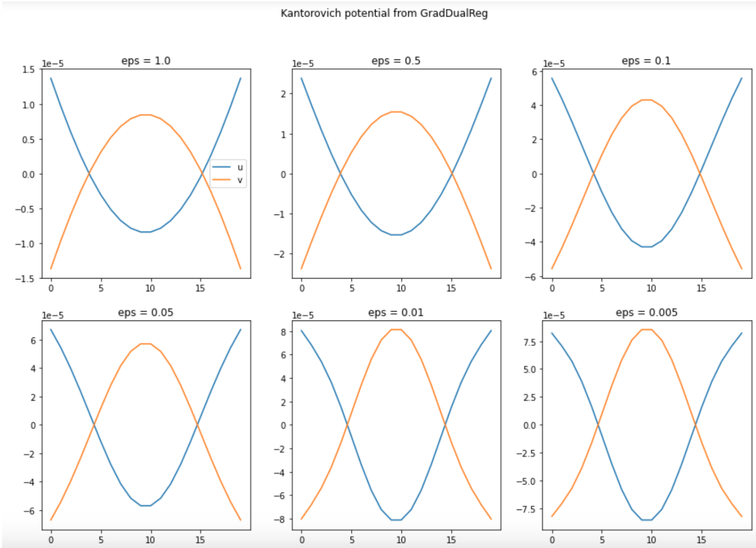
En réintégrant dans $(\mathcal{MK}_d)$, on obtient :

$$\begin{aligned}
(\mathcal{MK}_d) &= \max\left\{\sum_{i=1}^N u_i\mu_i + \sum_{j=1}^N v_j\nu_j \mid u, v \in \mathbb{R}^N, u_i + v_j \leq C_{ij}\ \forall i, j \in I, J\right\} \\
&= \max\left\{\sum_{i=1}^N u_i\mu_i + \sum_{j=1}^N \nu_j(\min_i C_{ij} - u_i) \mid u \in \mathbb{R}^N\right\} \\
&= \max_{u\in\mathbb{R}^N} \sum_{i=1}^N u_i\mu_i - \lim_{\varepsilon\to 0} \sum_{j=1}^N \nu_j f_\varepsilon(u - C_{.,j}).
\end{aligned}$$

3. Comme vu en 2.1.1, on a :

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\exp(x_1)}{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)}, \ldots, \frac{\exp(x_N)}{\sum_{i=1}^N \exp(x_i)}\right)^T.$$

4. En considérant les distributions données en I.3 pour différentes valeurs de ε, on obtient les potentiels suivants :



Partie 3 - La régularisation entropique

1. Soit $F(\gamma) = \sum_{i,j=1}^{N} C_{ij}\gamma_{ij} + \varepsilon \ \mathrm{Ent}(\gamma) = \sum_{i,j=1}^{N} C_{ij}\gamma_{ij} + \varepsilon \sum_{i,j=1}^{N} e(\gamma_{ij})$, $\varepsilon > 0$.
   Si $\exists\ \gamma_{ij} < 0$, $F(\gamma) = +\infty$.
   Si $\forall i, j,\ \ \gamma_{ij} = 0$, alors F est affine en γ.

   On considère donc le cas où $\forall i, j,\ \ \gamma_{ij} > 0$. Il vient :

$$
\begin{aligned}
e(\gamma_{ij}) &= \gamma_{ij}\log(\gamma_{ij} - 1) \\
\frac{\partial \mathrm{Ent}}{\partial \gamma_i}(\gamma) &= \log(\gamma_i),\ \ 1 \leq i \leq N^2 \\
\frac{\partial^2 \mathrm{Ent}}{\partial \gamma_i \partial \gamma_j}(\gamma) &= \begin{cases} \dfrac{1}{\gamma_i} & \text{si } i = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}.
\end{aligned}
$$

   Il vient donc :

$$D^2\mathrm{Ent}(\gamma) = \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\gamma_i}\right),\ \text{ avec } 0 < \gamma_i < 1\ (1 \leq i \leq N^2).$$

   F étant la somme d'une fonction affine en γ et d'une fonction strictement convexe (Hessienne définie positive), on en conclut que F est strictement convexe.
   De plus, en posant $\bar{\gamma}_{ij} = \exp\left(-\dfrac{C_{ij}}{\varepsilon}\right)$, il vient :

$$
\begin{aligned}
\sum_{i,j}\gamma_{ij}\left(\log\left(\frac{\gamma_{ij}}{\bar{\gamma}_{ij}}\right) - 1\right) &= \sum_{i,j}\gamma_{ij}\left(\log(\gamma_{ij}) - \log(\bar{\gamma}_{ij}) - 1\right) \\
&= \sum_{i,j}\gamma_{ij}\left(\log(\gamma_{ij}) + \frac{C_{ij}}{\varepsilon} - 1\right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon}\sum_{i,j}\gamma_{ij}C_{ij} + \sum_{i,j}\gamma_{ij}\left(\log(\gamma_{ij}) - 1\right) \\
&= \frac{1}{\varepsilon}F(\gamma).
\end{aligned}
$$

2. 2.1 Soit $\Pi(\mu,\nu) = \left\{\gamma \in \mathbb{R}_+^{N\times N} \mid \sum_{j=1}^{N}\gamma_{ij} = \mu_i, \sum_{i=1}^{N}\gamma_{ij} = \nu_j\right\}$.

- Montrons que $\Pi(\mu,\nu)$ est fermé.
  Soit $(\gamma^{(n)})_n \in \Pi(\mu,\nu)^{\mathbb{N}}$ une suite convergente, $\lim\limits_{n\to\infty} \gamma^{(n)} = \tilde{\gamma}$.
  $\underline{\tilde{\gamma} \in \mathbb{R}_+^{N\times N}}$: $\forall k,l \in \{1,\dots,N\}, \gamma_{kl} \geq 0 \Longrightarrow \lim\limits_{n\to\infty} \gamma_{kl}^{(n)} = \tilde{\gamma}_{kl} \geq 0$.
  $\underline{\tilde{\gamma} \in \Pi(\mu,\nu)}$: Soit $i \in \{1,\dots,\}$.
  $$\sum_{j=1}^N \gamma_{ij} = \mu_i \Longrightarrow \lim_{n\to\infty} \sum_{j=1}^N \gamma_{ij}^{(n)} = \sum_{j=1}^N \lim_{n\to\infty} \gamma_{ij}^{(n)} = \sum_{j=1}^N \tilde{\gamma}_{ij} = \mu_i.$$
  Par le même raisonnement, on montre $\sum\limits_{i=1}^N \tilde{\gamma}_{ij} = \nu_j$.
  Ainsi, $\Pi(\mu,\nu)$ est bien fermé.
- Montrons que $\Pi(\mu,\nu)$ est borné.
  Soit $\gamma \in \Pi(\mu,\nu)$. On considère la norme matricielle $\|.\|_1 = \max\limits_{1\leq j\leq N} \sum\limits_{i=1}^N |m_{ij}|$.
  On a alors que $\|\gamma\|_1 = \max\limits_{1\leq j\leq N} \nu_j \leq 1$, et donc que $\Pi(\mu,\nu)$ est bien borné.

2.2 On remarque que $(\mathcal{H}) = \min\left\{F(\gamma) \mid \sum\limits_{j=1}^N \gamma_{ij} = \mu_i, \sum\limits_{i=1}^N \gamma_{ij} = \nu_j\right\} = \min\{F(\gamma) \mid \gamma \in \Pi(\mu,\nu)\}$, car $F(\gamma)$ explose si $\gamma \notin \Pi(\mu,\nu)$.
D'après la question précédente, $\Pi(\mu,\nu)$ est fermé et borné. F étant continue sur $\Pi(\mu,\nu)$, on a donc bien l'existence d'un minimiseur.
On regarde l'unicité.
- D'après la question 3.1, $\underline{F \text{ est strictement convexe sur } \Pi(\mu,\nu)}$.
- $\underline{\Pi(\mu,\nu) \text{ convexe :}}$ Soit $\gamma, \tilde{\gamma} \in \Pi(\mu,\nu)$. Soit $t \in]0,1[$.

$$\forall i,j,\ (1-t)\gamma_{ij} + t\tilde{\gamma}_{ij} \geq 0$$
$$\forall i,j,\ \begin{cases} \sum\limits_{j=1}^N (1-t)\gamma_{ij} + t\tilde{\gamma}_{ij} = (1-t)\sum\limits_{j=1}^N \gamma_{ij} + t\sum\limits_{j=1}^N \tilde{\gamma}_{ij} = \mu_i \\ \sum\limits_{i=1}^N (1-t)\gamma_{ij} + t\tilde{\gamma}_{ij} = (1-t)\sum\limits_{i=1}^N \gamma_{ij} + t\sum\limits_{i=1}^N \tilde{\gamma}_{ij} = \nu_j \end{cases}$$
F étant strictement convexe sur un ensemble convexe, il y a donc unicité du minimiseur.

2.3 Soit γ_ε l'unique solution de $(\mathcal{H})$.
2.3.1 Soit $(\gamma_\varepsilon)_\varepsilon$ une suite de solutions de $(\mathcal{H})$.
D'après la question 3.2.1, $\Pi(\mu,\nu)$ est un compact de $\mathbb{R}^N$. D'après le théorème de Bolzano-Weierstrass, de toute suite d'éléments de $\Pi(\mu,\nu)$ on peut donc extraire une sous-suite convergente.
C'est le cas en particulier pour $(\gamma_\varepsilon)_\varepsilon$ puisqu'on a montré que $\min F(\gamma)$ est atteint pour $\gamma \in \Pi(\mu,\nu)$.
2.3.2
- γ étant solution de $(\mathcal{MK})$, il vient que : $\forall \tilde{\gamma} \in \Pi(\mu,\nu),\ \langle \tilde{\gamma}, c\rangle \geq \langle \gamma, c\rangle$.
  C'est vrai en particulier pour γ_ε l'unique solution de $\mathcal{H}$.
- γ_ε étant solution de $(\mathcal{H})$, il vient que :
  $$\forall \tilde{\gamma} \in \mathbb{R}^{N\times N};\ \sum_j^N \tilde{\gamma}_{ij} = \mu_i,\ \sum_i^N \tilde{\gamma}_{ij} = \nu_j,\ F(\tilde{\gamma}) \geq F(\gamma_\varepsilon) \Longrightarrow F(\tilde{\gamma}) - F(\gamma_\varepsilon) \geq 0$$
  $$\Longrightarrow \varepsilon\left(\mathrm{Ent}(\tilde{\gamma}) - \mathrm{Ent}(\gamma_\varepsilon)\right) \geq \langle c, \gamma_\varepsilon\rangle - \langle c, \tilde{\gamma}\rangle.$$
  C'est vrai en particulier pour $\gamma \in \Pi(\mu,\nu)$ solution de $(\mathcal{MK})$.

En regroupant les deux cas, on obtient enfin l'inégalité suivante :
$$0 \leq \langle c, \gamma_\varepsilon\rangle - \langle c, \gamma\rangle \leq \varepsilon\left(\mathrm{Ent}(\gamma) - \mathrm{Ent}(\gamma_\varepsilon)\right).$$

2.3.3 D'une part, on a :

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \langle \gamma_\varepsilon, c \rangle - \langle \gamma, c \rangle = \langle \gamma^*, c \rangle - \langle \gamma, c \rangle.$$

D'autre part, par continuité de $\text{Ent}(\gamma)$ sur $\Pi(\mu, \nu)$, on a :

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon \left(\text{Ent}(\gamma) - \text{Ent}(\gamma_\varepsilon) \right) = \lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon \left(\text{Ent}(\gamma) - \text{Ent}(\gamma^*) \right) = 0.$$

Par le théorème des gendarmes, on conclut que $\langle \gamma^*, c \rangle = \langle \gamma, c \rangle$.

2.3.4 $\forall \varepsilon > 0$, d'après la question 2.3.2, on a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\varepsilon} \left(\langle c, \gamma_\varepsilon \rangle - \langle c, \gamma \rangle \right) \leq \text{Ent}(\gamma) - \text{Ent}(\gamma_\varepsilon) &\Longrightarrow 0 \leq \text{Ent}(\gamma) - \text{Ent}(\gamma^*) \\ &\Longrightarrow \text{Ent}(\gamma^*) \leq \text{Ent}(\gamma). \end{aligned}$$

2.3.5 D'après les questions précédentes, on a :

$$\langle \gamma^*, c \rangle = \langle \gamma, c \rangle \Longrightarrow \gamma^* \in \operatorname{arg\,min} (\mathcal{MK}) = \operatorname{arg\,min} \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{ij} \gamma_{ij} \mid \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\}$$

puis :

$$\text{Ent}(\gamma^*) \leq \text{Ent}(\gamma) \Longrightarrow \gamma^* \in \operatorname{arg\,min} \left\{ \text{Ent}(\gamma) \mid \gamma \in \Pi(\mu, \nu), \sum_{ij} \gamma_{ij} C_{ij} = \mathcal{MK}(\mu, \nu) \right\}.$$

Par unicité de la solution de $(\mathcal{H})$, $\gamma_\varepsilon \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} \gamma^* \in \operatorname{arg\,min} \left\{ \text{Ent}(\gamma) \mid \sum_{ij} \gamma_{ij} C_{ij} = \mathcal{MK}(\mu, \nu) \right\}$.

3. 3.1 On réécrit $(\mathcal{H})$ en introduisant le Lagrangien $L : (\gamma, u, v) \in \mathbb{R}^{N \times N} \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$:

$$L(\gamma, u, v) = F(\gamma) + \sum_{i=1}^N u_i (\mu_i - \sum_{j=1}^N \gamma_{ij}) + \sum_{j=1}^N v_j (\nu_j - \sum_{i=1}^N \gamma_{ij})$$

On pose $K = \left\{ \gamma \mid \sum_{j=1}^N \gamma_{ij} = \mu_i, \sum_{i=1}^N \gamma_{ij} = \nu_j \right\}$.

En réécrivant le problème avec la formulation point selle, on a :

$$(\mathcal{H}) = \inf_{\gamma \in K} F(\gamma) = \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} \sup_{u, v \in \mathbb{R}_+^N} L(\gamma, u, v).$$

Les conditions d'optimalité sans contraintes s'appliquent ici :

$$\begin{cases} \tilde{\gamma} \in \operatorname{arg\,min} L & \Longrightarrow \quad \nabla L(\tilde{\gamma}) = 0. \\ \nabla L(\tilde{\gamma}) = 0 \text{ et } D^2 L(\tilde{\gamma}) \succ 0 & \Longrightarrow \quad \tilde{\gamma} \in \operatorname{arg\,min} L \ . \end{cases}$$

3.2 On réécrit la condition nécessaire d'optimalité du 1^{er} ordre :

$$\forall k, l \in \mathbb{R}^N, \ \frac{\partial L}{\partial \gamma_{kl}} = C_{kl} + \varepsilon \log(\gamma_{kl}) - u_k - v_l.$$

$$\begin{aligned} \gamma \in \operatorname{arg\,min} L &\Longrightarrow \forall k, l \in \mathbb{R}^N, \ C_{kl} + \varepsilon \log(\gamma_{kl}) - u_k - v_l = 0 \\ &\Longrightarrow \forall k, l \in \mathbb{R}^N, \ \gamma_{kl} = \exp\left(\frac{1}{\varepsilon} (u_k + v_l - C_{kl}) \right) \\ &\Longrightarrow \forall k, l \in \mathbb{R}^N, \ \gamma_{kl} = a_k b_l \bar{\gamma}_{kl} \end{aligned}$$

avec $a_k = \exp\left(\frac{u_k}{\varepsilon} \right)$, $b_l = \exp\left(\frac{v_l}{\varepsilon} \right)$ et $\bar{\gamma}_{kl} = \exp\left(-\frac{C_{kl}}{\varepsilon} \right)$.

3.3 On considère donc γ_ε solution du problème, prenant la forme décrite ci-dessus. Puisque γ_ε doit satisfaire les contraintes marginales, il vient :

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{N} \gamma_{\varepsilon_{ij}} = \nu_j \\ \sum_{j=1}^{N} \gamma_{\varepsilon_{ij}} = \mu_i \end{cases} \iff \begin{cases} \sum_{i=1}^{N} a_i b_j \bar{\gamma}_{ij} = \nu_j \\ \sum_{j=1}^{N} a_i b_j \bar{\gamma}_{ij} = \mu_i \end{cases} \iff \begin{cases} b_j = \dfrac{\nu_j}{\sum_{i=1}^{N} a_i \bar{\gamma}_{ij}} \\ a_i = \dfrac{\mu_i}{\sum_{j=1}^{N} b_j \bar{\gamma}_{ij}} \end{cases}$$

3.4 Le problème dual s'écrit en inversant sup et inf dans la formulation point selle :

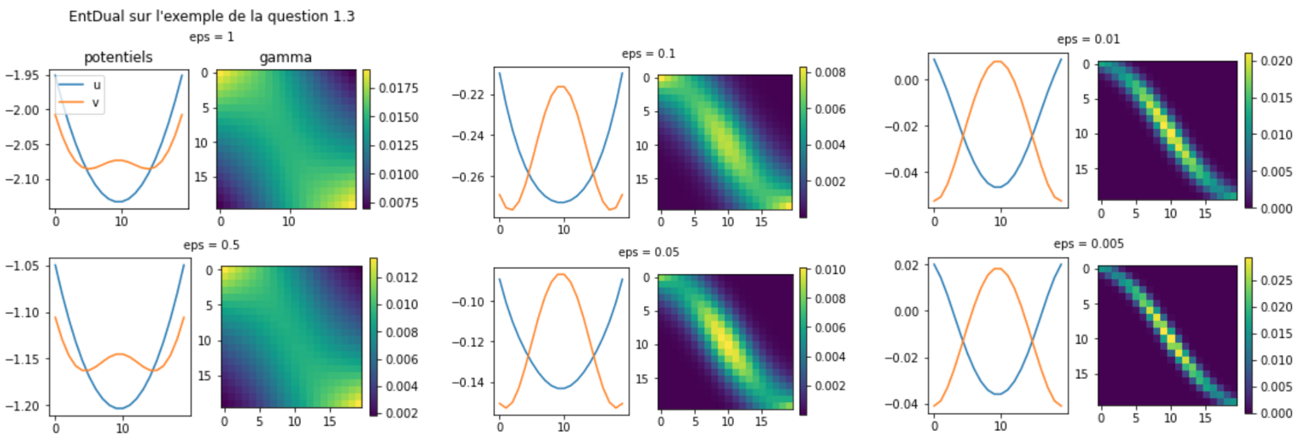
$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_D) &= \sup_{u,v \in \mathbb{R}_+^N} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} L(\gamma, u, v) \\ &= \sup_{u,v \in \mathbb{R}_+^N} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} \sum_{i,j=1}^{N} C_{ij}\gamma_{ij} + \varepsilon \sum_{i,j=1}^{N} e(\gamma_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} u_i(\mu_i - \sum_{j=1}^{N} \gamma_{ij}) + \sum_{j=1}^{N} v_j(\nu_j - \sum_{i=1}^{N} \gamma_{ij}) \\ &= \sup_{u,v \in \mathbb{R}_+^N} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} \sum_{i,j=1}^{N} \gamma_{ij} \left(C_{ij} + \varepsilon \left(\log(\gamma_{ij}) - 1\right) - u_i - v_j\right) + \sum_{i=1}^{N} u_i \mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j \nu_j \end{aligned}$$

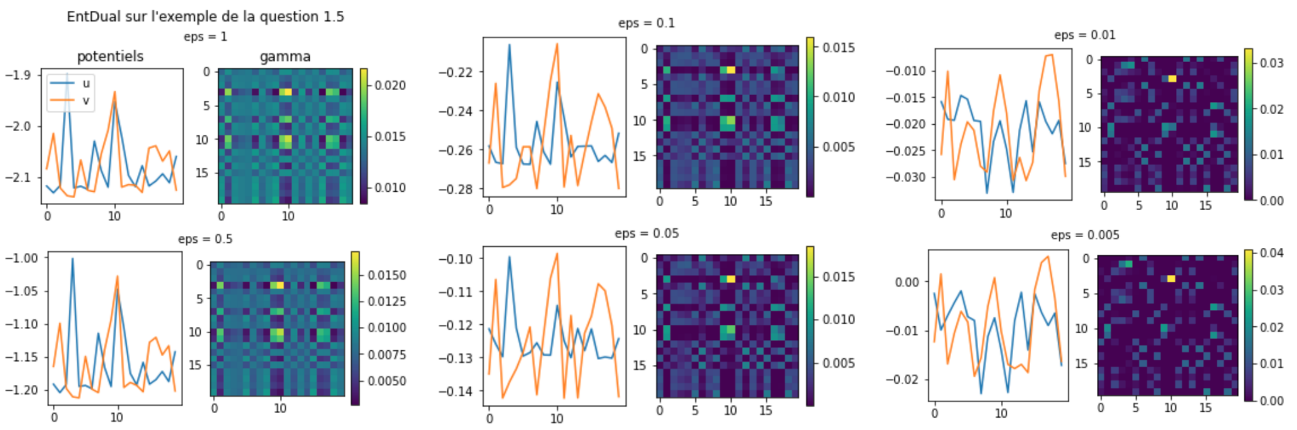
D'après la question 3.2, il vient :

$$(\mathcal{H}_D) = \sup_{u,v \in \mathbb{R}_+^N} - \sum_{i,j=1}^{N} a_i b_j \bar{\gamma}_{ij} \varepsilon + \sum_{i=1}^{N} u_i \mu_i + \sum_{j=1}^{N} v_j \nu_j$$

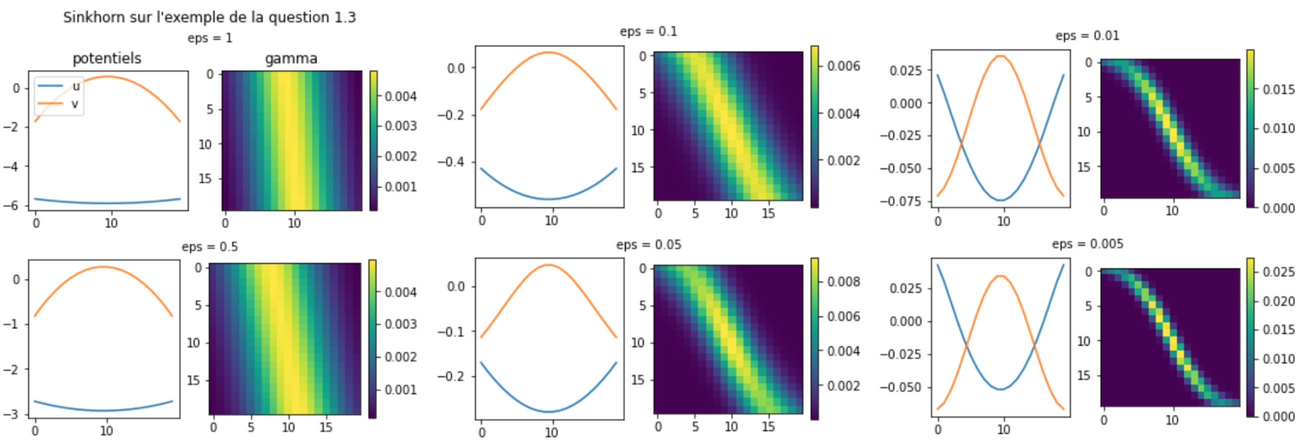
En comparant avec le problème dual régularisé obtenu à la question II.2, on obtient le même problème d'optimisation avec un terme supplémentaire : en effet, on constate l'apparition du terme $- \sum_{i,j=1}^{N} a_i b_j \bar{\gamma}_{ij} \varepsilon = - \sum_{i,j=1}^{N} \exp\left(\frac{u_i}{\varepsilon}\right) \exp\left(\frac{v_j}{\varepsilon}\right) \bar{\gamma}_{ij} \varepsilon$ (propre au terme de régularisation entropique).
Sa présence rend le problème strictement concave (cf. question III.1) en u et en v.

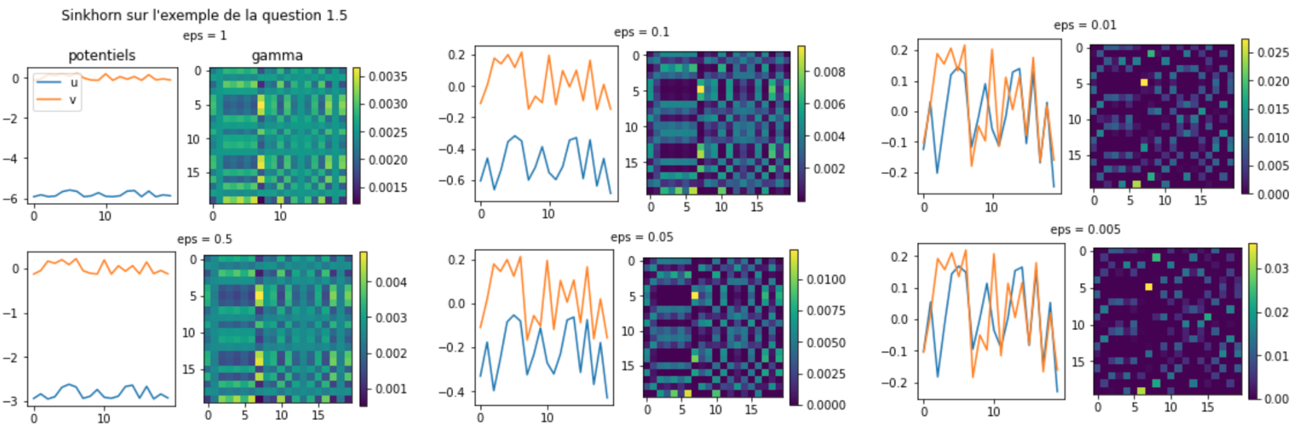
4. Le problème dual est un problème de maximisation de fonctions strictement convexes sur un ensemble convexe.
De plus, on a montré l'existence d'une unique solution pour $(\mathcal{H})$ en III.2.2 : par dualité forte, on conclut que l'unique maximum dans $(\mathcal{H}_D)$ est atteint. On peut donc appliquer un algorithme de descente de gradient pour trouver le minimum de $-(\mathcal{H}_D)$.





5. On teste l'algorithme de Sinkhorn sur les distributions des questions I.3 et I.5 :





Partie 4 - Wasserstein flot pour le problème de matching

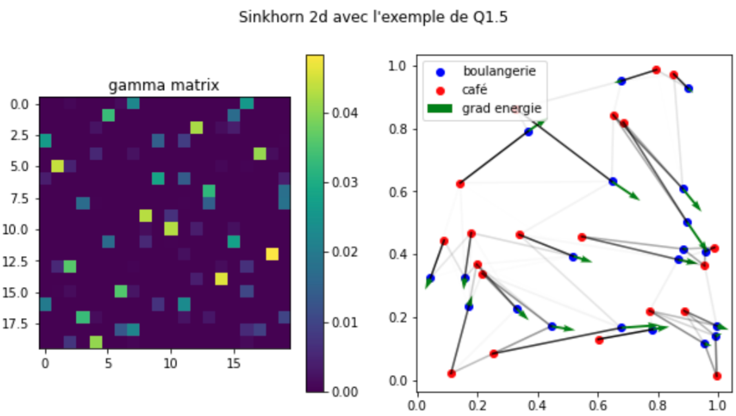
1. On considère l'énergie suivante :

$$\mathcal{E}(z) = \mathcal{W}_\varepsilon(\mu, \nu) = \sum_{ij}^{N} C_{ij}\gamma_{ij} + \varepsilon \sum_{ij}^{N} \gamma_{ij} \left(\log\left(\frac{\gamma_{ij}}{\mu_i \nu_j} \right) - 1 \right)$$

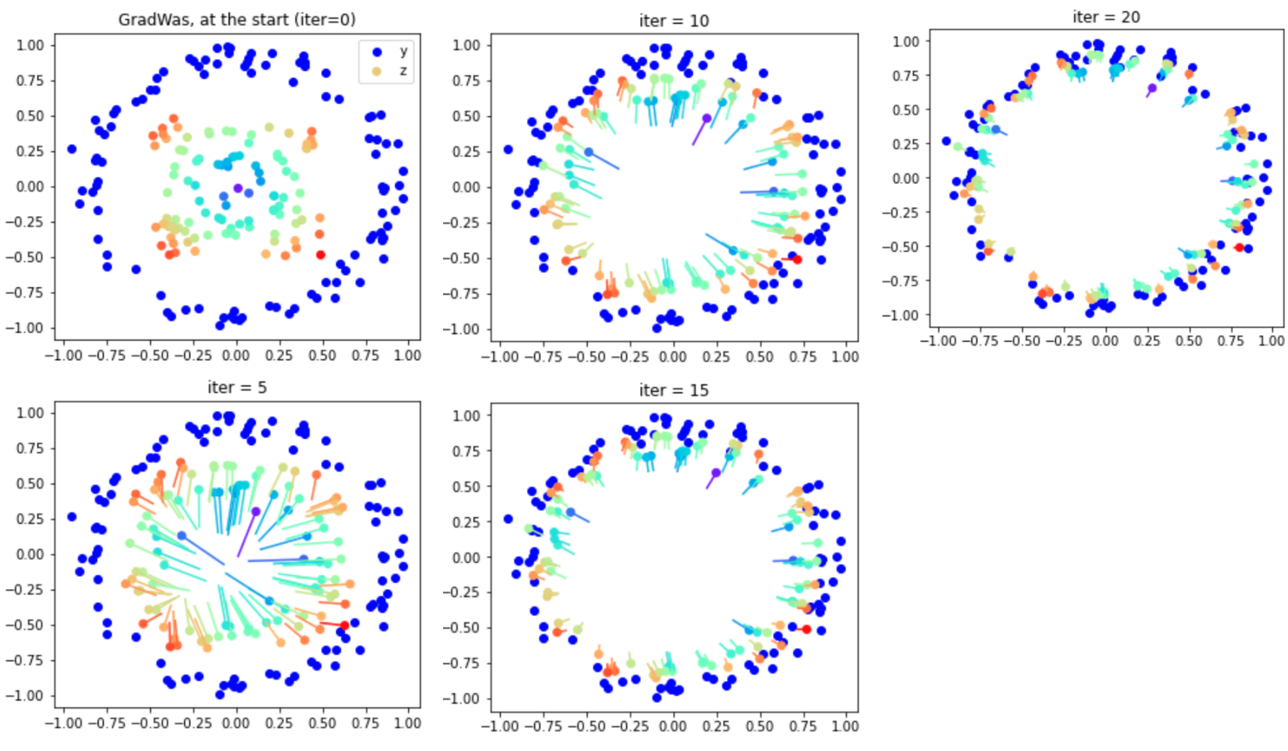
Pour le coût quadratique et les distributions atomiques décrites, il vient alors :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z_i}(z) &= \frac{\partial}{\partial z_i} \sum_{ij}^{N} C_{ij}\gamma_{ij} + \varepsilon \sum_{ij}^{N} \gamma_{ij} \left(\log\left(\frac{\gamma_{ij}}{\mu_i \nu_j}\right) - 1 \right) \\
&= \frac{\partial}{\partial z_i} \sum_{ij}^{N} |z_i - y_j|^2 \gamma_{ij} \\
&= 2 \sum_{j}^{N} (z_i - y_j)\gamma_{ij} \\
&= 2 \left(z_i \sum_{j=1}^{N} \gamma_{ij} - \sum_{j=1}^{N} y_j \gamma_{ij} \right) \\
&= 2 \left(z_i \mu_i - \sum_{j=1}^{N} y_j \gamma_{ij} \right).
\end{aligned}$$

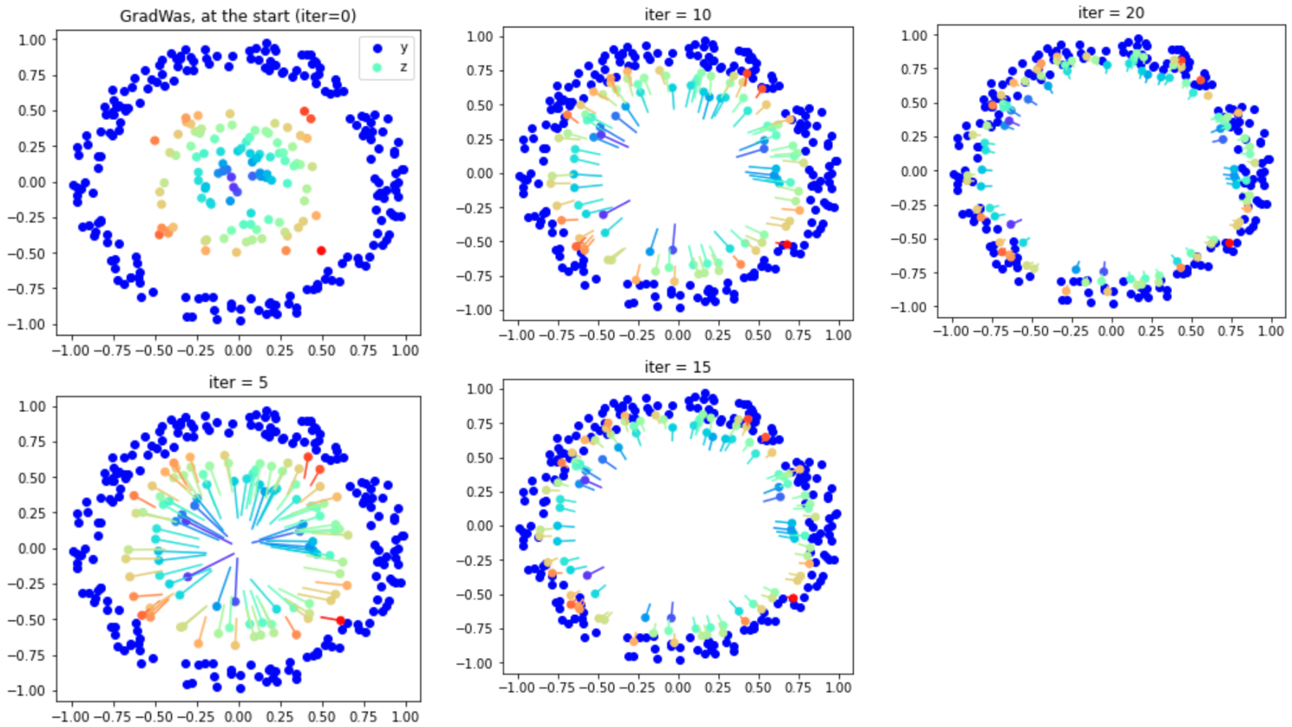
2. En reprenant des mesures générées comme en I.5, l'algorithme de Sinkhorn nous donne la solution suivante :



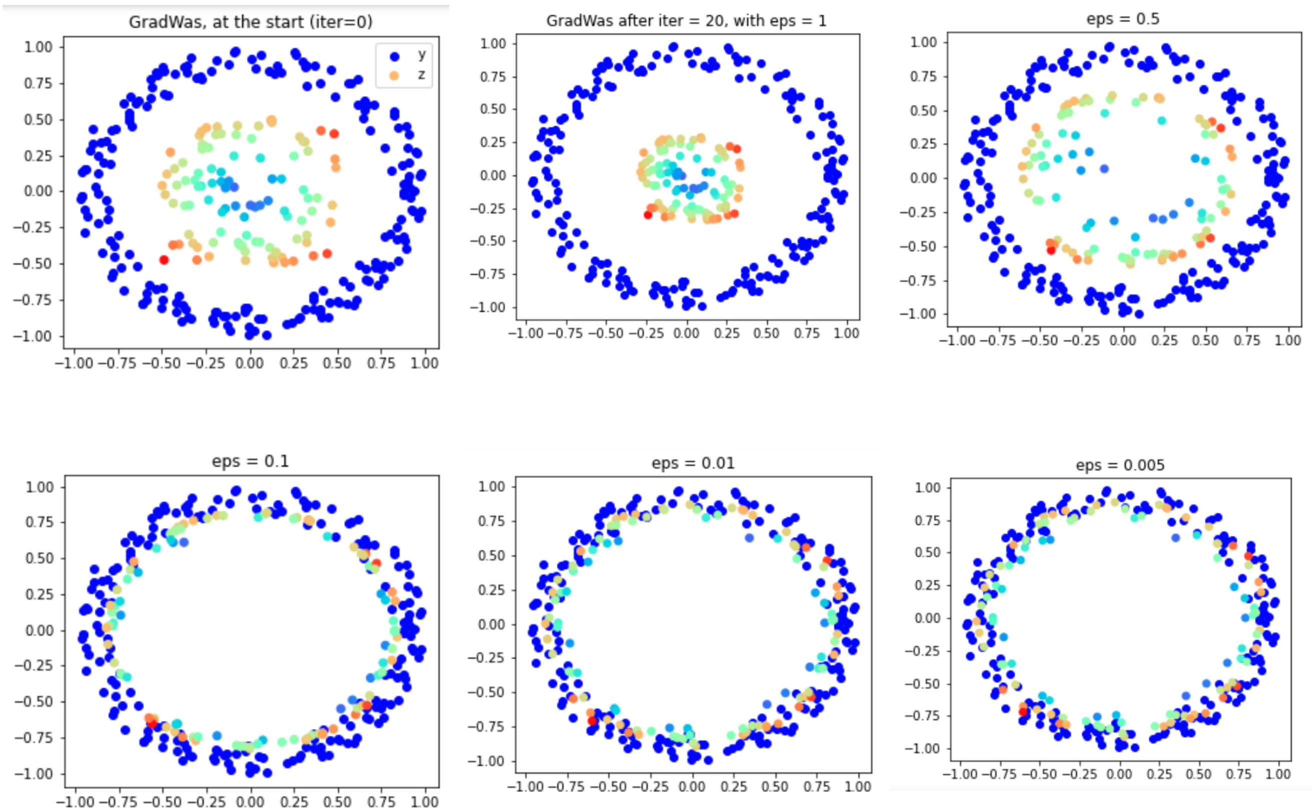
4. On obtient les nuages de points suivants :



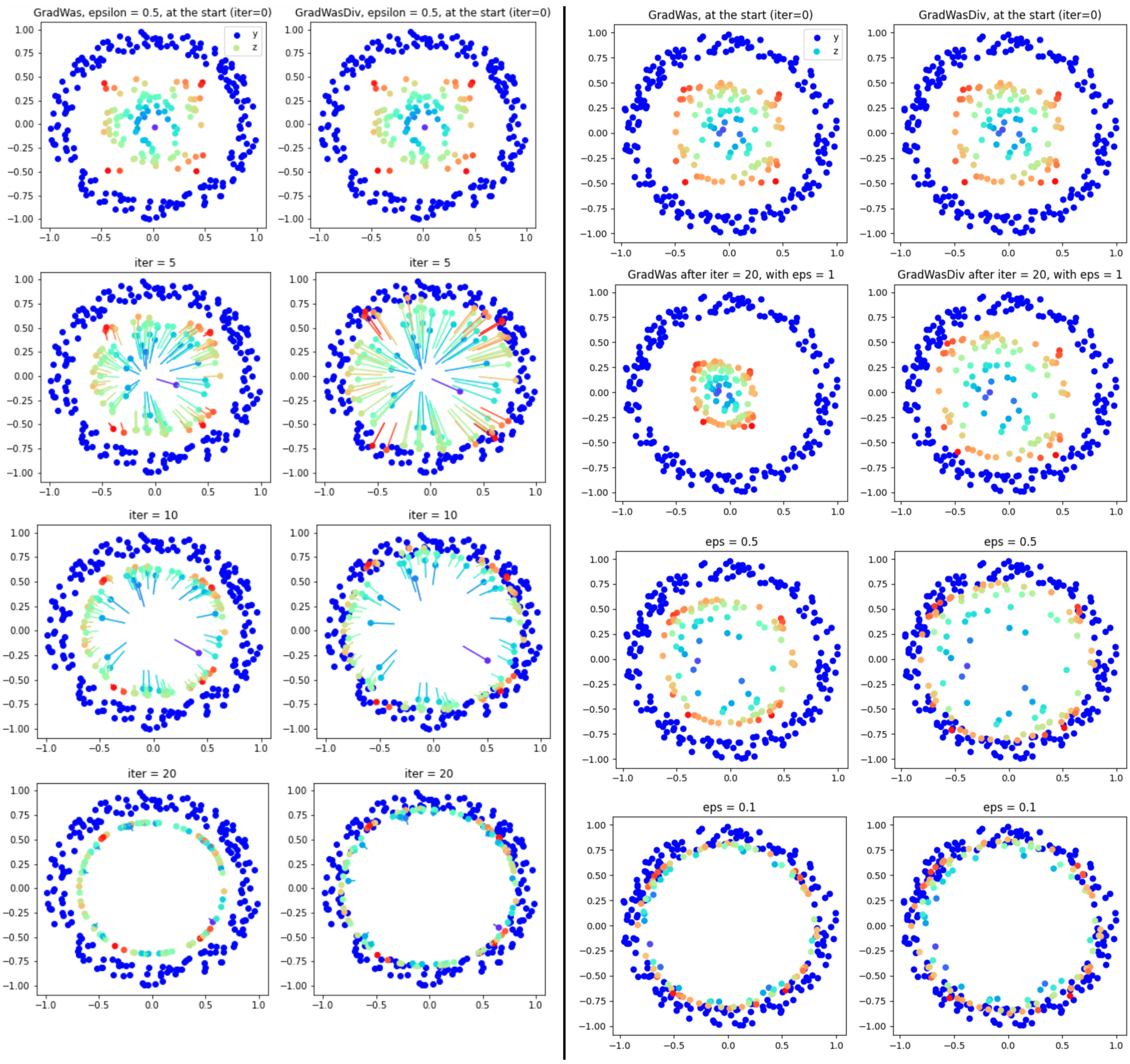
5. Pour $n = 100$ et $m = 200$, on obtient :



6. On reprend l'expérience précédente pour différentes valeurs de ε :



7. On compare la convergences de la divergence de Sinkhorn par rapport à la distance de Wasserstein pour $\varepsilon = 0.5$ (colonne gauche).
   On compare également les convergences après 20 itérations pour différentes valeurs de ε (colonne droite).



On remarque d'une part que la convergence est plus rapide avec la divergence de Sinkhorn, et d'autre part que cette dernière est inversement croissante à ε.