
Le transport optimal numérique et la physique quantique

Réalisé par
Pierre-André Mikem et Nawel Arab



Optimisation Différentiable

Table des matières

1	Introduction	2
2	Un problème de programmation linéaire	2
2.1	Q1.1	2
2.2	Q1.3	3
2.3	Q1.4	3
2.4	Q1.5	5
3	Le problème dual et la fonction LSE	5
3.1	Fonction LSE	5
3.1.1	Convexité de la fonction lse	5
3.1.2	Q2	6
3.1.3	Q3	6
3.2	Q2.2	7
3.3	Gradient du critère	7
3.4	Q2.4	8
4	La régularisation entropique	8
4.1	Convexité du critère F	9
4.2	Dualisation du problème régularisé	9
4.2.1	Lagrangien et conditions d'optimalité	10
4.2.2	10
4.2.3	10
4.2.4	10
4.3	Q3.3	11
4.4	Q3.4	12
4.5	Q3.6	13
5	La transport multi-marges et l'interaction électron-électron	13
5.1	Problème de Monge-Kantorovich	13
5.1.1	Problème dual	14
5.2	Problème de Monge-Kantorovich régularisé	14
5.2.1	15
5.2.2	15
5.2.3	Problème dual	15
5.2.4	Algorithme de Sinkhorn	16
5.2.5	16
5.3	Q4.4	17
5.4	Q4.5	18

1 Introduction

Situons notre contexte à Paris et prenons en considération l'ensemble des boulangeries qui produisent des pains au chocolats. Ces derniers doivent être livrés chaque matin aux cafés dans lesquels les clients pourront les goûter. La production et la consommation des pains au chocolat sont décrites par $\mu \in \mathbb{R}_+^N$ et $\nu \in \mathbb{R}_+^N$, respectivement. Nous supposons que la quantité totale de la production et de la consommation est la même :

$$\sum_{i=1}^N \mu_i = \sum_{i=1}^N \nu_i = 1$$

Il s'agit donc d'un problème de transport optimal discret **équilibré**. On souhaite alors répartir les marchandises afin de minimiser le coût total de transport $C_{i,j}$, tout en satisfaisant les besoins des cafés. Le problème consiste à chercher l'infimum de la quantité :

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{i,j} \gamma_{i,j} \mid \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\} \quad (\mathcal{MK})$$

où

$$\Pi(\mu, \nu) := \left\{ \gamma \in \mathbb{R}_+^{N \times N} \mid \sum_{j=1}^N \gamma_{i,j} = \mu_i, \forall i \in I \text{ et } \sum_{i=1}^N \gamma_{i,j} = \nu_j, \forall j \in J \right\}$$

2 Un problème de programmation linéaire

2.1 Q1.1

On définit un vecteur $c := (C_{1,1}, C_{1,2}, \dots, C_{1,N}, C_{2,1}, \dots, C_{N,2N})$ et un vecteur $x := (\gamma_{1,1}, \gamma_{1,2}, \dots, \gamma_{1,N}, \gamma_{2,1}, \dots, \gamma_{N,2N})$. Soit \mathbf{b} un vecteur de taille $2N$ tel que $b := (\mu_1, \dots, \mu_N, \nu_1, \dots, \nu_N)$. On cherche à déterminer une matrice A de taille $2N \times N^2$ telle que le problème (\mathcal{MK}) s'écrive sous la forme :

$$\min \{ \langle c, x \rangle \mid Ax = b, x \geq 0 \}$$

On en déduit une matrice A de la forme :

$$A = \begin{pmatrix} \overbrace{1 \dots 1}^{N \text{ fois}} & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & \dots & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & 1 \dots 1 & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \\ 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & 1 \dots 1 & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \\ & & \ddots & 0 \dots 0 & 1 \dots 1 & 0 \dots 0 \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \dots 0 & 1 \dots 1 \\ \mathcal{I}_{dN} & \mathcal{I}_{dN} & \mathcal{I}_{dN} & \dots & \mathcal{I}_{dN} & \mathcal{I}_{dN} \end{pmatrix}$$

2.2 Q1.3

On trace sur une fenêtre graphique la solution γ

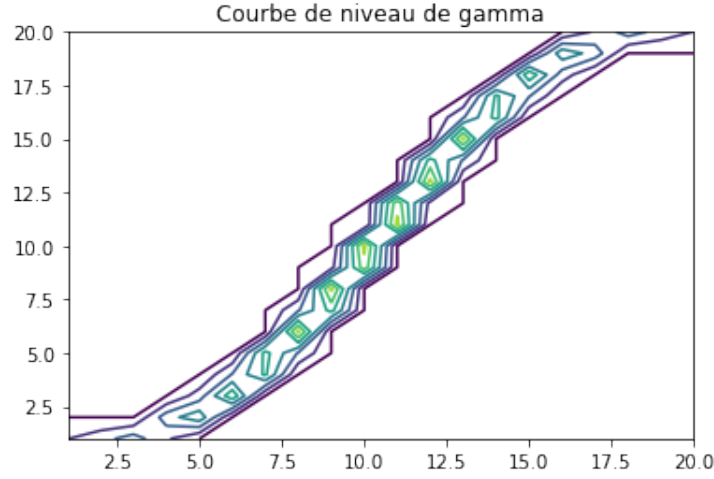


FIGURE 1

On retrouve ci-dessus les lignes de niveau de γ , on en déduit que la solution obtenue n'est pas déterministe et ce car les éléments de la diagonale ne sont pas restreints à un seul point (on peut aisément le remarquer sur le graphe -cf notebook- de la représentation la matrice γ).

Remarque Nous avons choisi de présenter seulement une partie nos graphes sur le rapport pour plus de lisibilité. Le reste sera cependant affiché sur le notebook.

2.3 Q1.4

On commence par introduire le lagrangien du problème :

$$l(\gamma, u, v) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{i,j} \gamma_{ij} - \sum_{i=1}^N u_i \left(\sum_{j=1}^N \gamma_{ij} - \mu_i \right) - \sum_{j=1}^N v_j \left(\sum_{i=1}^N \gamma_{ij} - \nu_j \right)$$

Le dual du problème s'écrit alors

$$\begin{aligned} \max_{u,v} \min_{\gamma \in \mathbb{R}_+^N} l(\gamma, u, v) &= \max_{u,v} \min_{\gamma \in \mathbb{R}_+^N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{i,j} \gamma_{ij} - \sum_{i=1}^N u_i \left(\sum_{j=1}^N \gamma_{ij} - \mu_i \right) - \sum_{j=1}^N v_j \left(\sum_{i=1}^N \gamma_{ij} - \nu_j \right) \\ &= \max_{u,v} \sum_{i=1}^N u_i \mu_i + \sum_{i=j}^N v_j \nu_j + \underbrace{\min_{\gamma \in \mathbb{R}_+^N} \sum_{ij} \gamma_{ij} (C_{ij} - u_i - v_j)}_{(*)} \end{aligned}$$

Avec

$$(*) = \begin{cases} 0 & \text{si } C_{ij} - u_i - v_j \geq 0 \\ -\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le dual s'écrit alors

$$\max \left\{ \sum_{i=1}^N u_i \mu_i + \sum_{i=j}^N v_j \nu_j \mid u_i + v_j \leq C_{ij}, \quad u, v \in \mathbb{R}^N \text{ et } i, j \in \{1, \dots, N\} \right\}$$

On remarque que le problème dual peut alors s'écrire sous la forme

$$\max \{ \langle u, \mu \rangle + \langle v, \nu \rangle \mid A^T y \leq C, \quad C \in \mathbb{R}^N, \quad y = (u_i - v_j)_{ij} \}$$

où A est la matrice définie à la question 1.

On peut donc écrire le problème sous forme standard, par conséquent il est possible d'appliquer l'algorithme du simplex.

Après application de l'algorithme du simplex, on trace les potentiels de Kantorovich obtenus

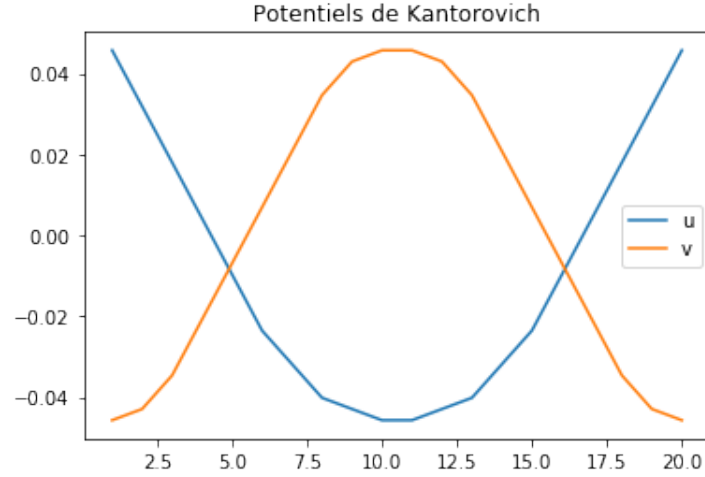


FIGURE 2

Le résultat correspond bien aux potentiels attendus.

2.4 Q1.5

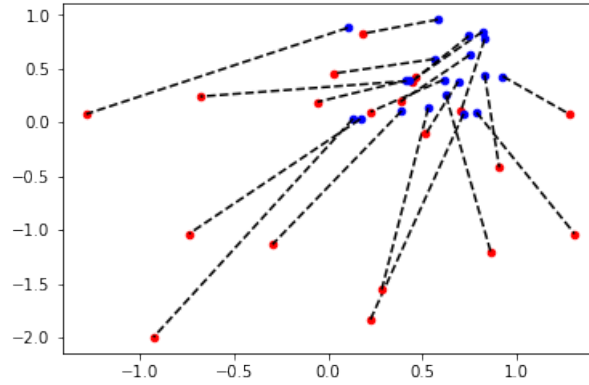


FIGURE 3 – Représentation des liens entre chaque point

On trace sur la figure ci-dessus les points x_i et y_j dans le plans xy ainsi que la ligne qui relie chaque point i au point $j = \sigma^*(i)$. Il est clair qu'il y a **une seule** ligne qui relie les points entre eux, on en déduit que la matrice est une matrice de permutation.

3 Le problème dual et la fonction LSE

3.1 Fonction LSE

On considère à présent la fonction log-sum-exp $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}_+$ définie comme

$$f(x) = \log\left(\sum_{i=1}^N \exp x_i\right)$$

Il est intéressant de travailler avec la fonction log-sum-exp car c'est un **maximum régularisé**.

3.1.1 Convexité de la fonction lse

On pose $u_i = \exp x_i$ et $v_i = \exp y_i$.
Soit $t \in [0,1]$, et $x, y \in \mathbb{R}^N$

$$\begin{aligned} f((1-t)x + ty) &= \log\left(\sum_{i=1}^N \exp((1-t)x_i + ty_i)\right) \\ &= \log\left(\sum_{i=1}^N u_i^{(1-t)} v_i^t\right) \end{aligned}$$

Par l'inégalité de Holder, on a :

$$\sum_{i=1}^N x_i y_i \leq \left(\sum_{i=1}^N |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{i=1}^N |y_i|^q\right)^{\frac{1}{q}}$$

avec $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$.

En l'appliquant à $f((1-t)x + ty)$, on obtient :

$$\begin{aligned}
 f((1-t)x + ty) &= \log \left(\sum_{i=1}^N \exp((1-t)x_i + ty_i) \right) \\
 &\leq \log \left(\left(\sum_{i=1}^N u_i^{(1-t)\frac{1}{1-t}} \right)^{1-t} \left(\sum_{i=1}^N v_i^{t\frac{1}{t}} \right)^t \right) \\
 &\leq (1-t) \log \left(\sum_{i=1}^N u_i \right) + t \log \left(\sum_{i=1}^N v_i \right) \\
 &\leq (1-t) \log \left(\sum_{i=1}^N \exp x_i \right) + t \log \left(\sum_{i=1}^N \exp y_i \right) \\
 &\leq (1-t)f(x) + tf(y)
 \end{aligned}$$

Par conséquent, la fonction log-sum-exp est convexe .

3.1.2 Q2

$$\begin{aligned}
 \max_i x_i &= \log(\exp \max_i x_i) \\
 &\leq \log \left(\sum_{i=1}^N \exp x_i \right) \\
 &\leq \log(N \exp \max_i x_i) \\
 &\leq \log(N) + \max_i x_i
 \end{aligned}$$

On en déduit l'inégalité suivante :

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

3.1.3 Q3

Soit $\varepsilon > 0$, en partant de l'inégalité précédente :

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

On a

$$\max_i x_i \leq \varepsilon \log \left(\sum_{i=1}^N \exp \frac{x_i}{\varepsilon} \right) \leq \max_i x_i + \varepsilon \log(N)$$

On fait tendre ε vers 0, on obtient alors :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \max_i x_i \leq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log \left(\sum_{i=1}^N \exp \frac{x_i}{\varepsilon} \right) \leq \max_i x_i + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log(N)$$

$$\max_i x_i \leq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log \left(\sum_{i=1}^N \exp \frac{x_i}{\varepsilon} \right) \leq \max_i x_i$$

On en déduit que f_ε converge vers \max_i quand $\varepsilon \rightarrow 0$.

3.2 Q2.2

On rappelle le dual du problème :

$$\min \left\{ \sum_i u_i \mu_i + \sum_j v_j \nu_j \mid u, v \in \mathbb{R}^N \ u_i + v_j \leq C_{i,j} \ \forall (i,j) \in I \times J \right\} \quad (\mathcal{MK}_d)$$

Soit $u, v \in \mathbb{R}^N$ tels que $u_i + v_j \leq C_{i,j} \ \forall (i,j) \in [1,N]^2$

On a alors $v_j \leq C_{i,j} - u_i$

En particulier,

$$v_j \leq \min_i C_{i,j} - u_i, \quad \forall j \in \{1, \dots, N\}$$

Le problème se réécrit alors sous forme d'un problème sans contraintes dont la seule variable est u :

$$\min \left\{ \sum_i u_i \mu_i + \sum_j \nu_j \min_i (C_{i,j} - u_i) \mid u \in \mathbb{R}_+^N \right\} \quad (\mathcal{MK}_d)$$

On utilise à présent le résultat obtenu à la question précédente, on a :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} -f_\varepsilon(u - C_j) = \min_i (u_i - C_{ij})$$

Le problème se réécrit alors comme limite d'un problème sans contraintes dont la seule variable est u :

$$\min \left\{ \sum_i u_i \mu_i - \sum_j \nu_j f_\varepsilon(u - C_j) \mid u \in \mathbb{R}_+^N \right\}$$

3.3 Gradient du critère

Soit la fonction critère :

$$g(u) = \sum_{i=1}^N u_i \mu_i - \sum_{j=1}^N \nu_j f_\varepsilon(u - C_j)$$

On a alors :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g(u)}{\partial u_i} &= \mu_i - \sum_{j=1}^N \nu_j \frac{\partial f_\epsilon}{\partial u_i}(u - C_j) \\
 &= \mu_i - \sum_{j=1}^N \nu_j \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\epsilon \log \left(\sum_{i=1}^N \exp \frac{u_i - C_{i,j}}{\epsilon} \right) \right) \\
 &= \mu_i - \sum_{j=1}^N \nu_j \frac{\exp \frac{u_i - C_{i,j}}{\epsilon}}{\sum_{i=1}^N \exp \frac{u_i - C_{i,j}}{\epsilon}}
 \end{aligned}$$

Par conséquent,

$$\nabla g(u) = \mu - \sum_{j=1}^N \nu_j \frac{\exp \frac{u - C_j}{\epsilon}}{\sum_{i=1}^N \exp \frac{u_i - C_{i,j}}{\epsilon}}.$$

3.4 Q2.4

Nous affichons ci-dessous les deux vecteurs u, v contenant les potentiels de Kantorovich régularisés obtenus en résolvant le problème régularisé avec la méthode du gradient à pas fixe.

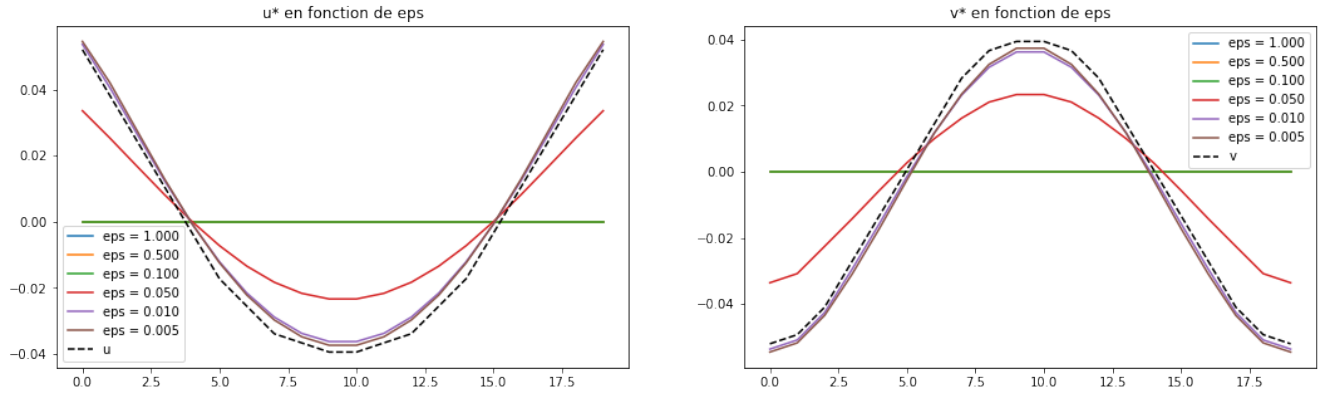


FIGURE 4

On superpose sur le même graphe les solutions approchées pour différentes valeurs de ϵ ainsi que les solutions obtenues par la méthode du simplexe. On peut aisément remarquer que les solutions approchées tendent vers les solutions du simplexe quand ϵ tend vers 0. L'algorithme converge donc vers les solutions souhaitées.

4 La régularisation entropique

On s'intéresse maintenant à la régularisation du problème primal en pénalisant la contrainte de positivité et ce en ajoutant un terme d'entropie.

Nous allons procéder à la minimisation du critère suivant :

$$F(\gamma) := \sum_{i,j} C_{ij} \gamma_{ij} + \varepsilon \text{Ent}(\gamma)$$

où $\varepsilon > 0$ est un paramètre de régularisation et $\text{Ent}: \mathbb{R}_+^{N \times N} \rightarrow \mathbb{R}$ est l'entropie qu'on définit comme

$$\text{Ent}(\eta) = \sum_{ij} \eta_{ij} (\log(\eta_{ij}) - 1)$$

4.1 Convexité du critère F

On commence par montrer que l'entropie Ent est convexe.
Soit $h: x \mapsto x(\log(x) - 1)$, on a alors :

$$\begin{aligned} h'(x) &= \log(x) \\ h''(x) &= \frac{1}{x} > 0 \quad \text{si } x > 0 \end{aligned}$$

L'entropie est donc convexe car c'est la somme de fonction convexes h appliquées à $\gamma_{ij} \in \mathbb{R}_+$.
De plus, $\sum_{ij} C_{ij} \gamma_{ij}$ est la somme de fonctions linéaires donc convexe.

Par conséquent, le critère F est convexe comme somme de fonctions convexes.

On peut écrire la fonction F sous forme :

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

$$F(\gamma) = \varepsilon \sum_{i,j} \gamma_{ij} \left(\log\left(\frac{\gamma_{ij}}{\bar{\gamma}_{ij}}\right) - 1 \right) \quad \text{avec } \bar{\gamma}_{ij} = \exp\left(\frac{-C_{ij}}{\varepsilon}\right).$$

4.2 Dualisation du problème régularisé

On s'intéresse à présent à la dualisation du problème régularisé défini précédemment. Dans ce qui suit, nous allons expliciter le lagrangien du problème puis les conditions d'optimalité.

4.2.1 Lagrangien et conditions d'optimalité

Le lagrangien du problème s'écrit

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

Le Lagrangien est différentiable, on a alors :

$$\begin{cases} \nabla_{\gamma} l(\gamma^*, u, v) = 0 \\ \sum_{j=1}^N \gamma_{ij}^* - \mu_i = 0 \\ \sum_{i=1}^N \gamma_{ij}^* - \nu_j = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} \varepsilon \log(\gamma_{ij}^*) + C_{ij} - u - v = 0 \\ \sum_{j=1}^N \gamma_{ij}^* - \mu_i = 0 \\ \sum_{i=1}^N \gamma_{ij}^* - \nu_j = 0 \end{cases}$$

Comme le problème est convexe, F et l'ensemble des contraintes l'ensemble des contraintes étant convexes, les conditions sont alors suffisantes et globales.

4.2.2

En utilisant la première condition d'optimalité

$$\begin{aligned} \varepsilon \log(\gamma_{ij}^*) + C_{ij} - u - v = 0 &\iff \log(\gamma_{ij}^*) = \frac{u + v - C_{ij}}{\varepsilon} \\ \gamma_{ij}^* = \exp \frac{u + v - C_{ij}}{\varepsilon} &\iff \gamma_{ij}^* = \exp \frac{u_i}{\varepsilon} \exp \frac{v_j}{\varepsilon} \exp \frac{-C_{ij}}{\varepsilon} \end{aligned}$$

On en déduit que la solution du problème s'écrit : $\boxed{\gamma_{ij}^* = a_i b_j \bar{\gamma}_{ij}}$

où $a_i = \exp \frac{u_i}{\varepsilon}$ et $b_j = \exp \frac{v_j}{\varepsilon}$

4.2.3

En imposant que γ_{ij} satisfasse les contraintes marginales, on détermine a_i et b_j en remplaçant γ_{ij}^* par l'expression obtenue précédemment :

$$\sum_{j=1}^N \gamma_{ij}^* = \mu_i \iff \sum_{j=1}^N a_i b_j \bar{\gamma}_{ij} = \mu_i \iff a_i = \frac{\mu_i}{\sum_{j=1}^N b_j \bar{\gamma}_{ij}}$$

De même,

$$\sum_{i=1}^N \gamma_{ij}^* = \nu_j \iff \sum_{i=1}^N a_i b_j \bar{\gamma}_{ij} = \nu_j \iff b_j = \frac{\nu_j}{\sum_{i=1}^N a_i \bar{\gamma}_{ij}}$$

Les équations obtenues sont connues sous le nom de équations de Bernstein-Schrödinger.

4.2.4

On introduit le dual du problème :

$$\sup_{u, v} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} l(\gamma, u, v)$$

$$\sup_{u,v} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} F(\gamma) - \sum_{i=1}^N u_i \left(\sum_{j=1}^N \gamma_{ij} - \mu_i \right) - \sum_{i=j}^N u_i \left(\sum_{i=1}^N \gamma_{ij} - \nu_j \right) \quad (\mathcal{D})$$

On a :

$$\begin{aligned} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} l(\gamma, u, v) &= \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} F(\gamma) - \sum_{i=1}^N u_i \left(\sum_{j=1}^N \gamma_{ij} - \mu_i \right) - \sum_{j=1}^N v_j \left(\sum_{i=1}^N \gamma_{ij} - \nu_j \right) \\ &= \sum_{i=1}^N u_i \mu_i + \sum_{j=1}^N v_j \nu_j + \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} F(\gamma) - \sum_{i,j} \gamma_{ij} (u_i + v_j) \\ &= \sum_{i=1}^N u_i \mu_i + \sum_{j=1}^N v_j \nu_j + \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} \varepsilon \sum_{i,j} \gamma_{ij} \left(\log \left(\frac{\gamma_{ij}}{\bar{\gamma}_{ij}} \right) - 1 + u_i + v_j \right) \end{aligned}$$

Soit $h(x) = \varepsilon x \log \left(\frac{x}{\bar{\gamma}_{ij}} \right) - \varepsilon x - x(u_i + v_j)$, h est convexe car sa dérivée seconde est positive sur \mathbb{R}_+ et on a

$$h'(x) = 0 \iff \varepsilon \log \left(\frac{x}{\bar{\gamma}_{ij}} \right) - u_i - v_j = 0 \iff x = \bar{\gamma}_{ij} e^{\frac{u_i + v_j}{\varepsilon}}$$

Donc h atteint son minimum en $x = \bar{\gamma}_{ij} e^{\frac{u_i + v_j}{\varepsilon}}$ tel que

$$h(\bar{\gamma}_{ij} e^{\frac{u_i + v_j}{\varepsilon}}) = -\bar{\gamma}_{ij} a_i b_j$$

D'où

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

Le problème dual s'écrit alors

$$\max \left\{ \sum_{i=1}^N u_i \mu_i + \sum_{j=1}^N v_j \nu_j - \varepsilon \sum_{i,j} \gamma_{ij}^* \mid u, v \in \mathbb{R}_+^N \right\}$$

4.3 Q3.3

Il est possible d'appliquer un algorithme de descente de gradient pour résoudre le problème dual. En effet, il s'agit d'un problème de maximisation sans contrainte dont le critère est différentiable et qu'on peut réécrire sous forme d'un problème de minimisation.

4.4 Q3.4

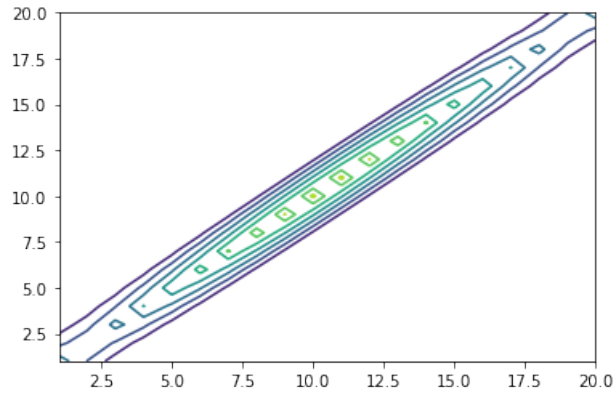


FIGURE 5 – Courbes de niveau de gamma

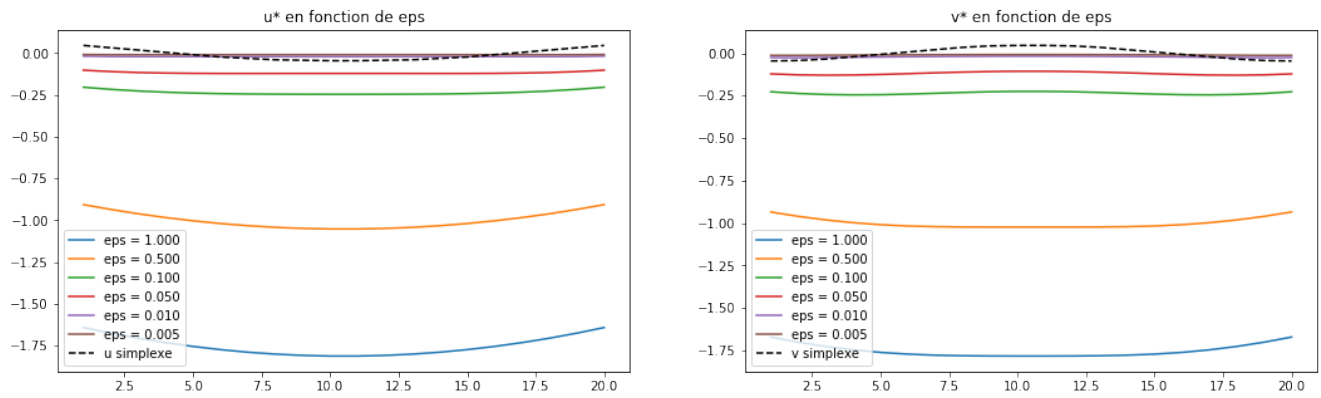


FIGURE 6

Les figures ci-dessus montrent que l'algorithme de descente de gradient ne converge pas vers les solutions voulues. Ceci est dû au fait que le pas de descente utilisé n'est pas optimal à chaque itération.

4.5 Q3.6

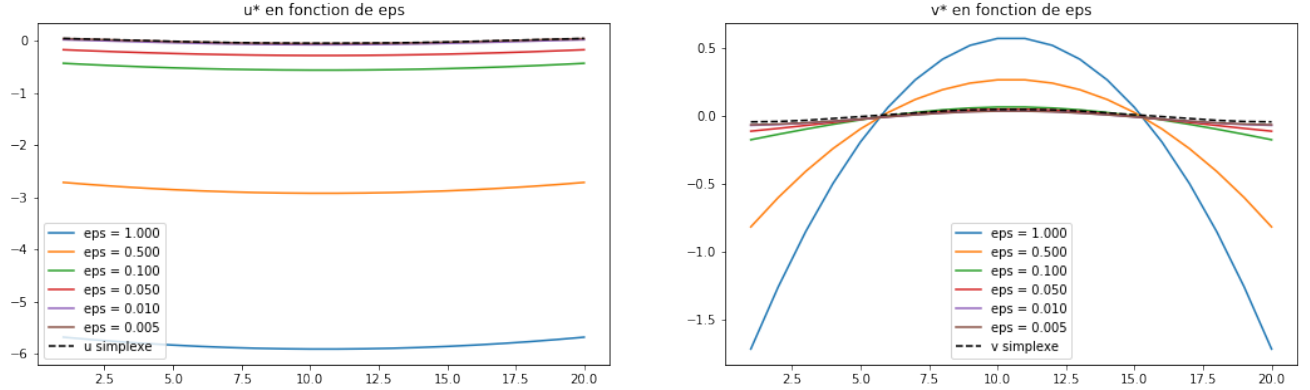


FIGURE 7

On remarque bien que sur les 2 figures ci-dessus les solutions approchées de l'algorithme de Sinkhorn convergent vers les potentiels Kantorovich.

5 La transport multi-marges et l'interaction électron-électron

On traite maintenant le cas du problème du transport optimal multi-marges. Nous ne considérons plus uniquement les boulangeries et les cafés, mais prenons également en compte les hôtels, les restaurants, etc. et cherchons un couplage $\gamma \in \times^K \mathbb{R}_+^{N \times N}$ nous indiquant la quantité de pains au chocolat envoyée par la boulangerie i_1 au café i_2 , à l'hôtel i_3 , etc. On prend comme coût l'interaction de Coulomb

$$c(x_1, \dots, x_K) = \sum_{i \neq j}^K \frac{1}{x_i - x_j}$$

et les K marginales $\mu^k(x_{i_k}, k = 1, \dots, K)$ sont toutes égales à $\rho(x_i)$.

5.1 Problème de Monge-Kantorovich

On fixe $K = 3$. Soit $\gamma \in \mathbb{R}_+^{N \times N \times N}$ et C un tenseur de $\mathbb{R}_+^{N \times N \times N}$ tel que $(C)_{i_1 i_2 i_3} = c(x_{i_1}, x_{i_2}, x_{i_3})$. Le problème de Monge-Kantorovich s'écrit alors :

$$(\mathcal{MK}) \quad \min \left\{ \sum_{i_1 i_2 i_3=1}^N C_{i_1 i_2 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} \mid \rho_{i_1} = \sum_{i_2 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3}, \rho_{i_2} = \sum_{i_1 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} \text{ et } \rho_{i_3} = \sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2 i_3} \right\}$$

5.1.1 Problème dual

On introduit le lagrangien du problème

$$l(\gamma, u, v, w) = \sum_{i_1 i_2 i_3=1}^N C_{i_1 i_2 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} - \sum_{i_1} \left(\sum_{i_2 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} - \rho_{i_1} \right) u_{i_1} - \sum_{i_2} \left(\sum_{i_1 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} - \rho_{i_2} \right) v_{i_2} - \sum_{i_3} \left(\sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2 i_3} - \rho_{i_3} \right) w_{i_3}$$

Le dual du problème s'écrit

$$(\mathcal{MK}d) \quad \sup_{u, v, w} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N^3}} l(\gamma, u, v, w)$$

On a

$$\inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} l(\gamma, u, v, w) = \sum_{i_1} \rho_{i_1} u_{i_1} + \sum_{i_2} \rho_{i_2} v_{i_2} + \sum_{i_3} \rho_{i_3} w_{i_3} + \underbrace{\inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} \sum_{i_1 i_2 i_3=1}^N \gamma_{i_1 i_2 i_3} (C_{i_1 i_2 i_3} - u_{i_1} - v_{i_2} - w_{i_3})}_{(*)}$$

Avec

$$(*) = \begin{cases} 0 & \text{si } C_{i_1 i_2 i_3} - u_{i_1} - v_{i_2} - w_{i_3} \leq 0 \\ -\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Le dual s'écrit alors

$$\max \left\{ \sum_{i_1} \rho_{i_1} u_{i_1} + \sum_{i_2} \rho_{i_2} v_{i_2} + \sum_{i_3} \rho_{i_3} w_{i_3} \mid u_{i_1} + v_{i_2} + w_{i_3} \leq C_{i_1 i_2 i_3}, u, v, w \in \mathbb{R}^N \text{ et } i_1 i_2 i_3 \in \{1, \dots, N\} \right\}$$

5.2 Problème de Monge-Kantorovich régularisé

$$\text{Soit } F(\gamma) = \sum_{i_1 i_2 i_3=1}^N C_{i_1 i_2 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} + \varepsilon \sum_{i_1 i_2 i_3=1}^N \gamma_{i_1 i_2 i_3} (\log(\gamma_{i_1 i_2 i_3}) - 1)$$

On utilise l'écriture simplifiée de F

$$F(\gamma) = \varepsilon \sum_{i_1 i_2 i_3=1}^N \gamma_{i_1 i_2 i_3} \left(\log \left(\frac{\gamma_{i_1 i_2 i_3}}{\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}} \right) - 1 \right)$$

$$\text{où } \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} = \exp \frac{-C_{i_1 i_2 i_3}}{\varepsilon}$$

Le lagrangien se réécrit alors

$$l(\gamma, u, v, w) = \varepsilon \sum_{i_1 i_2 i_3=1}^N \gamma_{i_1 i_2 i_3} \left(\log \left(\frac{\gamma_{i_1 i_2 i_3}}{\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}} \right) - 1 \right) - \sum_{i_1} \left(\sum_{i_2 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} - \rho_{i_1} \right) u_{i_1} - \sum_{i_2} \left(\sum_{i_1 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3} - \rho_{i_2} \right) v_{i_2} - \sum_{i_3} \left(\sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2 i_3} - \rho_{i_3} \right) w_{i_3}$$

Le lagrangien étant différentiable, on peut écrire les conditions d'optimalité

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{\gamma} l(\gamma^*, u, v, w) = 0 \\ \sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2}^* = \rho_{i_3} \\ \sum_{i_1 i_3} \gamma_{i_1 i_3}^* = \rho_{i_2} \\ \sum_{i_2 i_3} \gamma_{i_2 i_3}^* = \rho_{i_1} \end{array} \right\} \iff \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon \log \left(\frac{\gamma_{i_1 i_2 i_3}^*}{\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}} \right) - u_{i_1} - v_{i_2} - w_{i_3} = 0 \\ \sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2}^* = \rho_{i_3} \\ \sum_{i_1 i_3} \gamma_{i_1 i_3}^* = \rho_{i_2} \\ \sum_{i_2 i_3} \gamma_{i_2 i_3}^* = \rho_{i_1} \end{array} \right.$$

5.2.1

En utilisant la première condition d'optimalité

$$\begin{aligned} \nabla_{\gamma} l(\gamma^*, u, v, w) = 0 &\iff \varepsilon \log \left(\frac{\gamma_{i_1 i_2 i_3}^*}{\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}} \right) = u_{i_1} + v_{i_2} + w_{i_3} \\ &\iff \gamma_{i_1 i_2 i_3}^* = \exp \frac{u_{i_1} + v_{i_2} + w_{i_3} - C_{i_1 i_2 i_3}}{\varepsilon} \\ &\iff \boxed{\gamma_{i_1 i_2 i_3}^* = a_{i_1} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}} \end{aligned}$$

Avec $a_{i_1} = \exp \frac{u_{i_1}}{\varepsilon}$, $b_{i_2} = \exp \frac{v_{i_2}}{\varepsilon}$ et $c_{i_3} = \exp \frac{w_{i_3}}{\varepsilon}$.

5.2.2

En imposant que γ_{ij} satisfasse les contraintes marginales, on détermine a_{i_1}, b_{i_2} et c_{i_3} en remplaçant γ_{ij}^* par l'expression obtenue précédemment :

$$\rho_{i_1} = \sum_{i_2 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3}^* \iff \rho_{i_1} = \sum_{i_2 i_3} a_{i_1} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} \iff a_{i_1} = \frac{\rho_{i_1}}{\sum_{i_2 i_3} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}}$$

De même,

$$\rho_{i_2} = \sum_{i_1 i_3} \gamma_{i_1 i_2 i_3}^* \iff \rho_{i_2} = \sum_{i_1 i_3} a_{i_1} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} \iff b_{i_2} = \frac{\rho_{i_2}}{\sum_{i_1 i_3} a_{i_1} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}}$$

$$\rho_{i_3} = \sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2 i_3}^* \iff \rho_{i_3} = \sum_{i_1 i_2} a_{i_1} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} \iff c_{i_3} = \frac{\rho_{i_3}}{\sum_{i_1 i_2} a_{i_1} b_{i_2} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}}$$

5.2.3 Problème dual

Le dual du problème s'écrit

$$(\mathcal{MKd}) \quad \sup_{u, v, w} \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N^3}} l(\gamma, u, v, w)$$

On a

$$\inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N \times N}} l(\gamma, u, v, w) = \sum_{i_1} \rho_{i_1} u_{i_1} + \sum_{i_2} \rho_{i_2} v_{i_2} + \sum_{i_3} \rho_{i_3} w_{i_3} + \inf_{\gamma \in \mathbb{R}^N} \sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2} \left(\varepsilon \log \left(\frac{\gamma_{i_1 i_2 i_3}}{\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}} \right) - \varepsilon - u_{i_1} - v_{i_2} - w_{i_3} \right)$$

On introduit comme précédemment la fonction $h(x) = \varepsilon x \log\left(\frac{x}{\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}}\right) - \varepsilon x - x(u_{i_1} + v_{i_2} + w_{i_3})$, h est convexe car sa dérivée seconde est positive et on a

$$h'(x) = 0 \iff \varepsilon \log\left(\frac{x}{\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}}\right) - u_{i_1} + v_{i_2} - w_{i_3} = 0 \iff x = \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} e^{\frac{u_{i_1} + v_{i_2} + w_{i_3}}{\varepsilon}}$$

Donc h atteint son minimum en $x = \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} e^{\frac{u_{i_1} + v_{i_2} + w_{i_3}}{\varepsilon}}$ tel que

$$h(\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} e^{\frac{u_{i_1} + v_{i_2} + w_{i_3}}{\varepsilon}}) = -\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} a_{i_1} b_{i_2} c_{i_3}$$

D'où

$$\inf_{\gamma \in \mathbb{R}^{N^3}} l(\gamma, u, v, w) = \sum_{i_1} \rho_{i_1} u_{i_1} + \sum_{i_2} \rho_{i_2} v_{i_2} + \sum_{i_3} \rho_{i_3} w_{i_3} - \varepsilon \sum_{i_1 i_2} a_{i_1} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}$$

Le dual s'écrit alors

$$\max \left\{ \sum_{i_1} \rho_{i_1} u_{i_1} + \sum_{i_2} \rho_{i_2} v_{i_2} + \sum_{i_3} \rho_{i_3} w_{i_3} - \varepsilon \sum_{i_1 i_2} \gamma_{i_1 i_2 i_3}^* \mid u, v, w \in \mathbb{R}^N \text{ et } i_1 i_2 i_3 \in \{1, \dots, N\} \right\}$$

5.2.4 Algorithme de Sinkhorn

L'algorithme consiste à construire trois suites $\{a^n\}$, $\{b^n\}$ et $\{c^n\}$ en utilisant les équations de Bernstein-Schrödinger. On obtient :

$$a_{i_1}^{n+1} = \frac{\rho_{i_1}}{\sum_{i_2 i_3} b_{i_2}^n c_{i_3}^n \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}}, \quad b_{i_2}^{n+1} = \frac{\rho_{i_2}}{\sum_{i_1 i_3} a_{i_1}^{n+1} c_{i_3}^n \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}} \quad \text{et} \quad c_{i_3}^{n+1} = \frac{\rho_{i_3}}{\sum_{i_1 i_2} a_{i_1}^{n+1} b_{i_2}^{n+1} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}}$$

5.2.5

On souhaite à présent décomposer $\bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3}$ tel que les sommes des équations de Bernstein-Schrödinger peuvent s'écrire comme des produits matrices-vecteurs.

$$\begin{aligned} \sum_{i_2 i_3} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} &= \sum_{i_2 i_3} b_{i_2} c_{i_3} \exp\left(-\frac{2}{\varepsilon} \left(\frac{1}{|x_{i_1} - x_{i_2}|} + \frac{1}{|x_{i_1} - x_{i_3}|} + \frac{1}{|x_{i_2} - x_{i_3}|} \right)\right) \\ &= \sum_{i_2} b_{i_2} \exp\left(-\frac{2}{\varepsilon |x_{i_1} - x_{i_2}|}\right) \sum_{i_3} c_{i_3} \exp\left(-\frac{2}{\varepsilon |x_{i_2} - x_{i_3}|}\right) \exp\left(-\frac{2}{\varepsilon |x_{i_1} - x_{i_3}|}\right) \end{aligned}$$

On introduit $\tilde{\gamma}_{ij} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ tel que $\tilde{\gamma}_{ij} = \exp\left(-\frac{2}{\varepsilon |x_i - x_j|}\right)$. On a alors

$$\sum_{i_2 i_3} b_{i_2} c_{i_3} \bar{\gamma}_{i_1 i_2 i_3} = (b \cdot \tilde{\gamma}_{i_1})^T \tilde{\gamma} c \cdot (\tilde{\gamma}_{i_1})$$

où $\tilde{\gamma}_{i_1} = \cdot \tilde{\gamma}_{i_1, j}$ avec i_1 fixé, $b \cdot \tilde{\gamma}_{i_1}$ et $c \cdot \tilde{\gamma}_{i_1}$ sont des produits termes à termes.

5.3 Q4.4

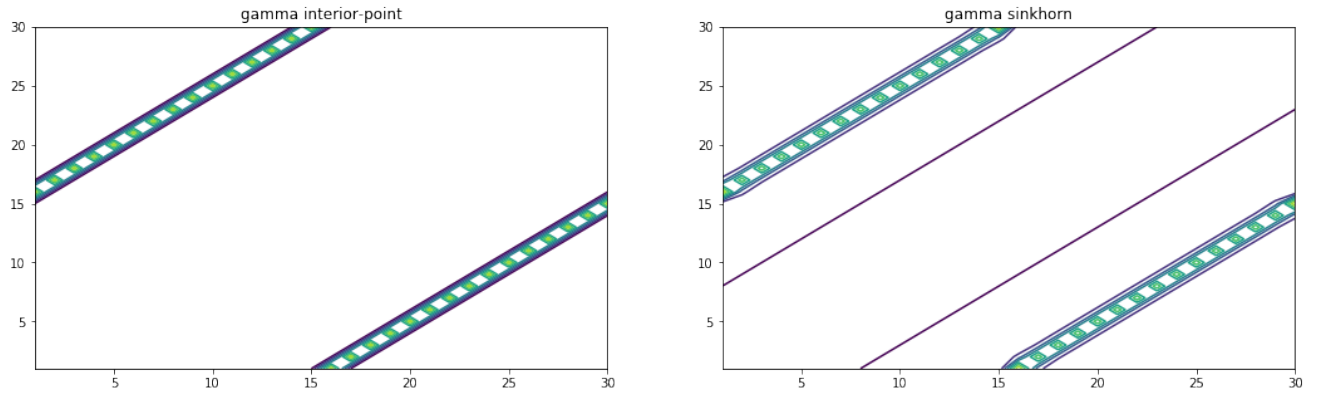


FIGURE 8 – Coût de Coulomb

En utilisant le coût de Coulomb, on obtient un couplage déterministe. La solution obtenue avec l'algorithme de Sinkhorn tend bien vers celle obtenue avec la méthode interior-point.

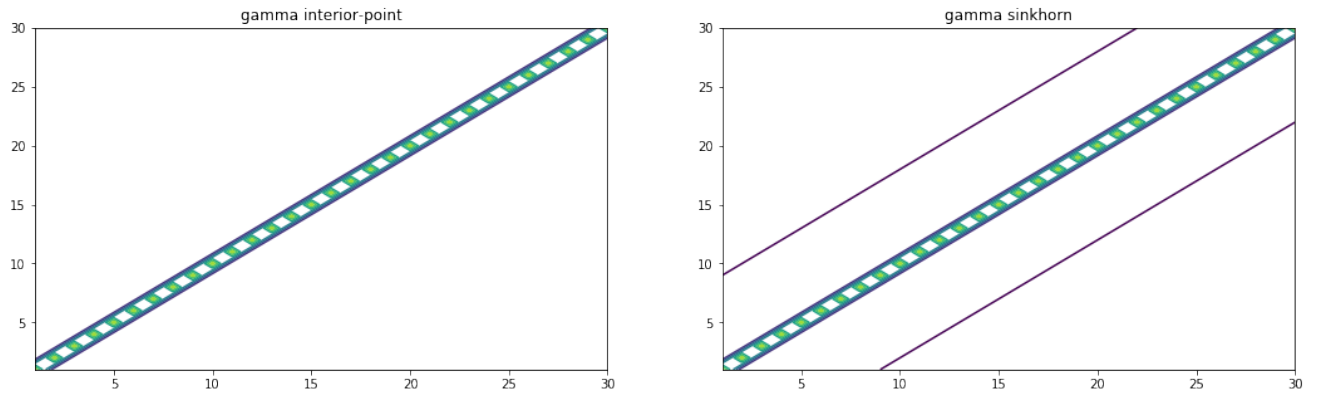


FIGURE 9 – Coût non de Coulomb

En utilisant le coût utilisé dans la première partie, on obtient aussi un couplage déterministe. Etant donné qu'on utilise la même masse ρ de production et de consommation, la nouvelle solution est différente.

5.4 Q4.5

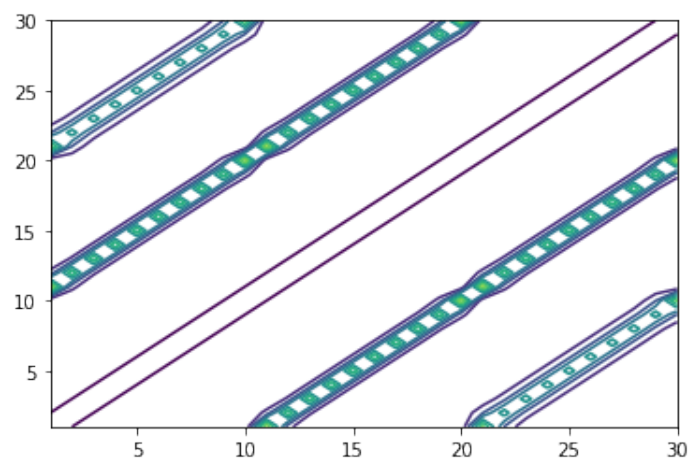


FIGURE 10 – Lignes de niveau

Dans ce cas de transport à deux marges, on obtient un couplage présentant des structures fractales.