Preuve Projet Cassiopée

Pierre Chambet, Léo Ritchie, Mael Spangenberger

2024

Ce document présente les différentes preuves des résultats obtenus dans le cadre du projet Cassiopée.

Plusieurs de ces preuves redémontrent les résultats admis par l'article scientifique de référence "Differentiable Particle Filtering via Entropy-Regularized Optimal Transport" écrit par Adrien Corenflos, James Thornton, George Deligiannidis et Arnaud Doucet.

Sommaire

La première preuve est la démonstration de la forme dual du problème du transport optimal. Celle-ci permet de transformer le problème primal en un problème dual plus simple à résoudre.

La seconde preuve est la preuve annexe de l'existence d'un point de selle dans le problème du transport optimal afin de valider une hypothèse de la preuve n°1.

La troisième preuve est la démonstration de la nouvelle forme du problème du transport optimal en ajoutant un terme d'entropie. Ce terme d'entropie permet de rendre le problème plus simple à résoudre. On appelle cela la régularisation entropique.

Preuve 1 : Dualité du problème du transport optimal

Le problème initial du transport optimal (OT) est le suivant :

$$OT = \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} \right\}$$

Ceci est la forme primal du problème. Comme tout problème d'optimisation, il existe une forme dual plus adapté car moins couteûse en puissance de calcul.

La forme dual du problème du transport optimal proposée par l'article est la suivante :

$$OT = \sup_{f,g \in \mathcal{R}(C)} a^t f + b^t g$$

$$\text{où } f = (f_i)\,, g = (g_i)\,, \mathbf{C} = \left(c_{i,j}\right) \text{ et } \mathcal{R}(\mathbf{C}) = \{f, g \in \mathbb{R}^N \mid f_i + g_j \leq c_{i,j}, i, j \in [N]\}$$

La preuve consiste à retrouver cette forme dual.

Reprenons le problème initial du transport optimal :

$$OT = \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} \right\}$$

où :

1. **Matrice de coût** $c_{i,j}$:

$$c_{i,j} = \|u_i - v_j\|^2$$

Cela représente la distance euclidienne au carré entre les vecteurs u_i et v_j. Les vecteurs u et v sont les distributions de probabilité à transporter de a à b.

2. **Matrice P** :

$$\mathbf{P} = (p_{i,j})_{i,j \in [N]}$$

C'est une matrice $N \times N$ où chaque élément $p_{i,j}$ se situe dans l'intervalle $[0, 1]$. Les composantes de la matrice représentent les probabilités de transport entre les éléments des vecteurs a et b. **P** représente un plan de transport entre deux distributions caractérisées par les vecteurs a et b.

3. **Ensemble** $S(a, b)$:

$$S(a,b) = \left\{ \mathbf{P} \in [0,1]^{N \times N} : \sum_{j=1}^{N} p_{i,j} = a_i, \sum_{i=1}^{N} p_{i,j} = b_j \right\}$$

C'est l'ensemble de toutes les matrices $N \times N$ avec des entrées dans $[0, 1]$ telles que :

- La somme de chaque ligne i dans **P** est égale à a_i.
- La somme de chaque colonne j dans **P** est égale à b_j.

L'ensemble $S(a, b)$ définit les plans de transport faisables satisfaisant les contraintes marginales données par a et b.

Début de la preuve :

L'étape clé est l'introduction d'une fonction indicatrice qui permet de reformuler le problème primal en termes de contraintes duales. Ensuite, en appliquant la propriété du point de selle, on peut transformer le problème de minimisation en un problème de maximisation.

D'une part on pose :

$$I(P) = \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} \right\}$$

D'autre part on définit la fonction indicatrice $K(P)$:

$$K(P) = \sup_{f,g \in \mathbb{R}^n} \left\{ \sum_i f_i a_i + \sum_j g_j b_j - \sum_{i,j} (f_i + g_j) p_{ij} \right\}$$

$$K(P) = \begin{cases} 0 & \text{si } P \in \mathcal{S}(a,b) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Le problème du transport optimal devient alors :

$$OT = \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \{I(P) + k(P)\}$$

Développons son expression :

$$OT = \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ I(P) + \sup_{f,g \in \mathbb{R}^n} \left\{ a^\top f + b^\top y - \sum_{i,j} (f_i + g_j) p_{ij} \right\} \right\}$$

$$= \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ \sup_{f,g \in \mathbb{R}^n} \left\{ a^T f + b^T g - \sum_{i,j} (p_{ij}(f_i + g_j)) + \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} \right\} \right\}$$

Au point de selle de la fonction indicatrice, on a la propriété suivante :

$$\sup_{y \in B} \inf_{x \in A} f(x,y) = \inf_{x \in A} \sup_{y \in B} f(x,y) = f(\bar{x}, \bar{y})$$

$$= \sup_{f,g \in \mathbb{R}^n} \left\{ \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ a^T f + b^T g - \sum_{i,j} (p_{ij}(f_i + g_j)) + \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} \right\} \right\}$$

$$= \sup_{f,g \in \mathbb{R}^n} \left\{ a^T f + b^T g + \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ - \sum_{i,j} (p_{ij}(f_i + g_j)) + \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} \right\} \right\}$$

$$= \sup_{f,g \in \mathbb{R}^n} \left\{ a^T f + b^T g + \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ \sum_{i,j} (c_{ij} - f_i - g_j) p_{ij} \right\} \right\}$$

$\rightarrow$ On pose la nouvelle fonction indicatrice :

$$K'(P) = \inf_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \left\{ \sum_{i,j} (c_{ij} - f_i - g_j) p_{ij} \right\} = \begin{cases} 0 & \text{si } (f_i + g_j) \leq c_{ij} \\ -\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

En choisissant f et g sont dans un ensemble $R(C)$ défini par la contrainte $f_i + g_j \leq c_{ij}$ qui impose qui impose que $K'(P) = 0$, le problème du transport optimal devient :

$$OT = \sup_{f,g \in \mathcal{R}(C)} \quad a^t f + b^t g$$

$$\text{où } f = (f_i)\,, g = (g_i)\,, \mathbf{C} = \left(c_{i,j}\right) \text{ et } \mathcal{R}(\mathbf{C}) = \{f, g \in \mathbb{R}^N \mid f_i + g_j \leq c_{i,j}, i, j \in [1, N]^2\}$$

Nous avons donc retrouvé la forme dual du problème du transport optimal.

Cependant nous avons utilisé une propriété de point de selle pour retrouver le problème dual. Il est donc nécessaire de prouver l'existence d'un point de selle et de valider la démonstration de la propriété utilisée.

Preuve du point de selle : (ou point col)

Soit f une fonction concave-convexe définie sur un produit cartésien $X \times Y$ tel que :

$$\forall (x,y) \in X \times Y, \quad f(x,\bar{y}) \leq f(\bar{x},\bar{y}) \leq f(\bar{x},y)$$

Alors $(\bar{x},\bar{y})$ est appelé "point de selle" et on a la propriété suivante :

$$\max_{y \in Y} \min_{x \in X} f(x,y) = \min_{x \in X} \max_{y \in Y} f(x,y) = f(\bar{x},\bar{y})$$

Prouvons cette propriété.

Montrons en premier l'inegalité suivante :

$$\max_{y \in B} \min_{x \in A} f(x,y) \leq \min_{x \in A} \max_{y \in B} f(x,y)$$

On a déjà que :

$$\min_{x \in A} f(x,y) \leqslant f(x,y) \leqslant \max_{y \in B} f(x,y)$$

Or, pour tout $x \in A$ on a:

$$\max_{y \in B} \min_{x \in A} f(x,y) \leq \max_{y \in B} f(x,y)$$

En prenant le minimum de cette inégalité sur $x \in A$, on obtient :

$$\max_{y \in B} \min_{x \in A} f(x,y) \leq \min_{x \in A} \max_{y \in B} f(x,y)$$

On retrouve ainsi l'inégalité voulue.

En deuxième, montrons que :

$$\min_{x \in A} \max_{y \in B} \leq (\bar{x},\bar{y})$$

Pour cela, il faut revenir à la définition du point de selle, à savoir :

$$\max_{y \in B} f(x,y) = f(\bar{x},\bar{y}) \Longrightarrow f(\bar{x},\bar{y}) \geq \min_{x \in A} \max_{y \in B} f(x,y)$$

De même, on a :

$$\min_{x \in A} f(x,y) = f(\bar{x},\bar{y}) \Longrightarrow f(\bar{x},\bar{y}) \leq \max_{y \in B} \min_{x \in A} f(x,y)$$

En recollant les morceaux on obtient :

$$f(\bar{x},\bar{y}) \leqslant \max_{y \in B} \min_{x \in A} f(x,y) \leqslant \min_{x \in A} \max_{y \in B} f(x,y) \leqslant f(\bar{x},\bar{y})$$

Ainsi, on retrouve la propriété du point de selle :

$$\max_{y \in B} \min_{x \in A} f(x,y) = \min_{x \in A} \max_{y \in B} f(x,y)$$

Preuve 3 : Régularisation entropique du problème

Pour la troisième preuve, il s'agit de démontrer la nouvelle forme du problème du transport optimal en ajoutant un terme d'entropie. On appelle cela la régularisation entropique.

La régularisation entropique ajoute un terme d'entropie à la fonction objectif, rendant le problème plus facile à résoudre numériquement.

La régularisation entropique est une technique fiable car elle garantit l'existence et l'unicité de la solution du problème de transport optimal. De plus, elle permet de contrôler la complexité de la solution en ajustant le paramètre de régularisation.

Cette technique est également viable car les solutions régularisées convergent vers la solution du problème initial lorsque le paramètre de régularisation tend vers 0. Cela garantit que les solutions obtenues sont proches de la solution optimale du problème de transport optimal.

Mise en place :

Posons la distance solution du problème de transport optimal :

$$\mathcal{L}(a,b) = \inf_{P \in S(a,b)} \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} = \inf_{P \in S(a,b)} \langle c, P \rangle$$

avec S(a, b) l'ensemble des couplages admissibles entre les distributions a et b définis précédemment.

On définit alors une nouvelle distance solution du problème de transport optimal régularisé tel que :

$$\mathcal{L}^{\varepsilon}(a,b) = \inf_{P \in S(a,b)} \{\langle c, P \rangle - \varepsilon H(P)\}$$

Avec $\varepsilon > 0$ et $H(P)$ étant l'entropie de la matrice P définie par :

$$H(P) = -\sum_{i,j} p_{ij} \left(\log(p_{ij}) - 1\right)$$

Par convention, $H(P) = +\infty$ si $p_{ij} = 0$.

L'idée est donc d'utiliser $-H$ comme fonction de régularisation pour obtenir des approximations de la solution.

Pour assurer l'unicité de la solution, il est nécessaire de vérifier que la fonction de régularisation est convexe.

D'après l'expression de $\mathcal{L}^{\varepsilon}(a,b)$, comme $\langle c, . \rangle$ est convexe, il faut donc que H soit concave, c'est-à-dire que sa matrice hessienne soit négative définie.

Étudions alors la matrice hessienne de H :

$$\frac{\partial H}{\partial p_{ij}} = -\log(p_{ij})$$

$$\frac{\partial^2 H}{\partial p_{ij}^2} = -\text{diag}\left(\frac{1}{p_{ij}}\right)$$

Les coefficients p_{ij} sont compris entre 0 et 1, donc la matrice hessienne de H est négative définie. Ainsi, H est concave, donc la fonction de régularisation est convexe.

Maintenant que nous savons qu'il existe une solution unique, il faut maximiser H pour minimiser $\mathcal{L}^{\varepsilon}(a,b)$ afin de s'en rapprocher.

Il reste également à démontrer que cette solution converge vers la solution du problème de transport optimal initial lorsque ε tend vers 0.

Il faut donc montrer la convergence de $\mathcal{L}^{\varepsilon}(a,b)$ vers $\mathcal{L}(a,b)$ lorsque ε tend vers 0, ie :

$$\lim_{\varepsilon \to 0^+} \mathcal{L}^{\varepsilon}(a,b) = \mathcal{L}(a,b)$$

Pour cela, on pose la matrice $P^{\varepsilon} \in S(a,b)$ solution du problème entropique tel que :

$$P^{\varepsilon} = \arg \min_{P \in S(a,b)} \{\langle c, P\rangle - \varepsilon H(P)\}$$

Dans ce cas,

$$\lim_{\varepsilon \to 0^+} P^{\varepsilon} = \arg \max_{P \in S(a,b)} \{H(P) \mid \langle c, P\rangle = \mathcal{L}(a,b)\}$$

On pose ensuite $\varepsilon_n \to 0$ avec $\varepsilon_n > 0$ pour n $\in \mathbb{N}$.

En utilisant la propriété de compacité de $S(a,b)$, on peut extraire une sous-suite de P^{ε_n} qui converge vers une matrice $P^* \in S(a,b)$ tel que :

$$P^{\varepsilon_n} \to P^*$$

Désormais, on choisit une matrice $P \in S(a,b)$ qui satifasse le problème initial. Autrement dit, P minimise la fonction objectif du problème de transport optimal tel que $\langle c, P\rangle = \mathcal{L}(a,b)$.

On utilise ensuite les conditions d'optimalité de la fonction de régularisation dans l'inégalité suivante :

$$\begin{gathered} 0 \leq \langle c, P^{\varepsilon_m}\rangle - \langle c, P\rangle \\ 0 \leq \langle c, P\rangle - \varepsilon_n H(P) + \varepsilon_n H(P^{\varepsilon_n}) - \langle c, P\rangle \\ 0 \leq \varepsilon_n \left(H(P^{\varepsilon_n}) - H(P)\right) \end{gathered}$$

Comme P^{ε_n} cherche à maximiser l'entropie, on a que H(P^{ε_n}) $\geq$ H(P).

Mais H(P^{ε_n}) est majoré, donc bornée, donc H(P^{ε_n}) $\to$ H(P) lorsque $\varepsilon_n \to 0$.

Ainsi, on a :

$$\begin{gathered} \lim_{\varepsilon_n \to 0} \left(\langle c, P^{\varepsilon_n}\rangle - \langle c, P\rangle\right) = 0 \\ \langle c, P^*\rangle = \mathcal{L}(a,b) \end{gathered}$$

Autrement dit, P^* est la solution du problème de transport optimal initial et maximise l'entropie parmi tous les plans optimaux de transport.

De plus, la solution P^ε converge vers P^* lorsque ε tend vers 0.

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \mathcal{L}^\varepsilon(a,b) = \mathcal{L}(a,b)$$
$$\lim_{\varepsilon \to 0} P^\varepsilon = \arg \max_{P \in S(a,b)} \{H(P) \mid \langle c, P \rangle = \mathcal{L}(a,b)\}$$

Définissons maintenant la distribution de Gibbs appliquée à la matrice de coût c_{ij} est définie par :

$$k_{ij} = \exp\left(-\frac{c_{ij}}{\varepsilon}\right)$$

Le paramètre k_{ij} peut être vu comme une distribution de probabilité entre les points u_i et v_j. Autrement dit, k_{ij} est la probabilité de transporter une unité de masse de a_i à b_j.

L'idée enuite consiste à réduire la distance entre k_{ij} and $S(a,b)$ afin de réduire la distance entre les distributions a et b et donc de trouver le chemin le plus court entre les deux distributions.

Mais comment définir la métrique, la distance entre ces deux distributions ?

On introduit pour cela la divergence de Kullback-Leibler entre les couplages P et K pour définir la distance appelée "entropie relative" :

$$KL(P\|K) = \sum_{i,j} p_{ij} \log\left(\frac{p_{ij}}{k_{ij}}\right) - p_{ij} + k_{ij}$$

Cette mesure n'est pas symétrique, ce qui signifie que $KL(P\|K) \neq KL(K\|P)$. Elle est utilisée pour quantifier la différence entre deux distributions de probabilité. Autrement dit, elle mesure la distance entre les distributions P et K.

Cherchons donc la matrice P qui minimise cette distance.

Reprenons $P^\varepsilon = \arg\min_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \{\langle c, P\rangle - \epsilon H(P)\}$

Soit une matrice $P \in S(a,b)$ qui satifasse le problème initial :

$$0 \leq \frac{1}{\epsilon}\left[\langle c, P\rangle - \epsilon H(P)\right] - \left[\langle c, P^\varepsilon\rangle - \epsilon H(P^\varepsilon)\right]$$

$$= \sum_{i,j}\left[\frac{c_{ij}P_{ij}}{\epsilon} + P_{ij}\log(P_{ij}) - P_{ij} - \frac{c_{ij}P^\varepsilon_{ij}}{\epsilon} - P^\varepsilon_{ij}\log(P^\varepsilon_{ij}) + P^\varepsilon_{ij}\right]$$

$$= \sum_{i,j}\left[P_{ij}\left(\frac{c_{ij}}{\epsilon} + \log(P_{ij}) - 1\right) - P^\varepsilon_{ij}\left(\frac{c_{ij}}{\epsilon} + \log(P^\varepsilon_{ij}) - 1\right)\right]$$

$$= \sum_{i,j}\left[P_{ij}\log\left(\frac{P_{ij}}{\exp(-c_{ij}/\epsilon)}\right) - P^\varepsilon_{ij}\log\left(\frac{P^\varepsilon_{ij}}{\exp(-c_{ij}/\epsilon)}\right)\right]$$

$$0 \leq \mathrm{KL}(P\|K) - \mathrm{KL}(P^\varepsilon\|K)$$

$$\Rightarrow \mathrm{KL}(P^\varepsilon \| K) \leq \mathrm{KL}(P \| K) \quad \forall P \in \mathcal{S}(a,b)$$

Donc P^ε est le minimiseur. De pus, on sait que la solution du problème régularisé converge vers la solution du problème initial lorsque le paramètre de régularisation ε tend vers 0 car :

$$\lim_{\varepsilon \to 0} P^\varepsilon = P^*$$

Pour démontrer maintenant la formulation duale du problème de transport optimal régularisé considérons le problème primal régularisé et introduisons les multiplicateurs de Lagrange afin de dériver la forme duale.

Problème Primal Régularisé par l'Entropie

Nous avons vu que le problème primal de transport optimal régularisé est :

$$\min_{P \in \mathcal{S}(a,b)} \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} - \epsilon H(P)$$

où $H(P) = -\sum_{i,j} p_{ij}(\log p_{ij} - 1)$ etg $\epsilon > 0$.

Formulation du Problème Primal avec les Contraintes de Marges

Le problème primal s'écrit donc :

$$\min_{P \geq 0} \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} - \epsilon \sum_{i,j} p_{ij}(\log p_{ij} - 1)$$

avec les contraintes :

$$\sum_j p_{ij} = a_i \quad \forall i$$
$$\sum_i p_{ij} = b_j \quad \forall j$$

Introduction des Multiplicateurs de Lagrange

Introduisons les multiplicateurs de Lagrange f et g :

$$L(P, f, g) = \sum_{i,j} c_{ij} p_{ij} - \epsilon \sum_{i,j} p_{ij}(\log p_{ij} - 1) + \sum_i f_i \left(\sum_j p_{ij} - a_i \right) + \sum_j g_j \left(\sum_i p_{ij} - b_j \right)$$

Simplification du Lagrangien

Le Lagrangien devient alors :

$$L(P, f, g) = \sum_{i,j} \left[c_{ij} p_{ij} - \epsilon p_{ij}(\log p_{ij} - 1) + f_i p_{ij} + g_j p_{ij} \right] - \sum_i f_i a_i - \sum_j g_j b_j$$

$$L(P, f, g) = \sum_{i,j} \left[(c_{ij} + f_i + g_j) p_{ij} - \epsilon p_{ij} \log p_{ij} + \epsilon p_{ij} \right] - \sum_i f_i a_i - \sum_j g_j b_j$$

Calcul du Dual

Pour trouver le dual, nous devons minimiser le Lagrangien par rapport à P. Cela se fait en égalisant à 0 la dérivée partielle de L par rapport à p_{ij}.

$$\frac{\partial L}{\partial p_{ij}} = c_{ij} + f_i + g_j - \epsilon \log p_{ij} = 0$$

$$\epsilon \log p_{ij} = c_{ij} + f_i + g_j$$

$$p_{ij} = \exp\left(\frac{f_i + g_j - c_{ij}}{\epsilon}\right)$$

Ensuite, en substituant p_{ij} dans le Lagrangien, nous obtenons :

$$L(P, f, g) = \sum_{i,j} \left[(c_{ij} + f_i + g_j) \exp\left(\frac{f_i + g_j - c_{ij}}{\epsilon}\right) - \epsilon \exp\left(\frac{f_i + g_j - c_{ij}}{\epsilon}\right) + \epsilon \exp\left(\frac{f_i + g_j - c_{ij}}{\epsilon}\right)\right] - \sum_i f_i a_i - \sum_j g_j b_j$$

Ce qui simplifie à :

$$L(P, f, g) = \sum_{i,j} \epsilon \exp\left(\frac{f_i + g_j - c_{ij}}{\epsilon}\right) - \sum_i f_i a_i - \sum_j g_j b_j$$

En passant à la formulation duale, nous maximisons cette expression par rapport à f et g :

$$\max_{f,g} \left(\sum_i f_i a_i + \sum_j g_j b_j - \epsilon \sum_{i,j} \exp\left(\frac{f_i + g_j - c_{ij}}{\epsilon}\right)\right)$$

Formulation Duale Finale

La formulation duale du problème de transport optimal régularisé par l'entropie est donc :

$$OT_\epsilon = \max_{f,g} \left(\sum_i f_i a_i + \sum_j g_j b_j - \epsilon \sum_{i,j} \exp\left(\frac{f_i + g_j - c_{ij}}{\epsilon}\right)\right)$$

On retrouve bien la forme duale du problème de transport optimal régularisé par l'entropie énoncée dans l'article. Cette formulation montre comment les variables duales f et g jouent un rôle clé dans la détermination de la solution optimale du problème régularisé.

Maintenant que le problème est simplifié, comment calculer et trouver le plan de transport optimal ? C'est là qu'intervient l'algorithme de Sinkhorn, qui permet de résoudre numériquement efficacement le problème de transport optimal régularisé. Cet algorithme consiste à mettre à jour les multiplicateurs de Lagrange f et g pour converger vers la solution optimale.

Implementation de l'Algorithme de Sinkhorn

L'algorithme de Sinkhorn commence avec une matrice de coût K définie par la distribution de Gibbs :

$$K_{ij} = \exp\left(-\frac{c_{ij}}{\epsilon}\right)$$

Ensuite, il procède par les étapes suivantes:

Initialisation :

Initialiser f et g.

Mise à jour itérative :

Alternativement mettre à jour f et g tels que :

$$\mathbf{f_{k+1}} \leftarrow \frac{a}{K\mathbf{g_k}}$$

$$\mathbf{g_{k+1}} \leftarrow \frac{b}{K^T\mathbf{f_k}}$$

Construction de la solution :

La matrice de transport P est obtenue par:

$$P = \text{diag}(f)K\text{diag}(g)$$

Notons ici que P est caractérisé par les vecteurs f et g, c'est à dire avec n + m paramètres (et non n*m comme dans le problème primal). P représente le plan de transport optimal.