

Implementación de un Esquema de Aproximación para el Problema de Transferencia de Masas

Miríam G. Báez-Hernández¹, M. Lorena Avendaño-Garrido¹, J. Rigoberto Gabriel-Argüelles¹

Resumen En este artículo se presentan resultados numéricos de la implementación de un esquema de aproximación para problemas de programación lineal infinita. En particular, este esquema es aplicado al Problema de Transferencia de Masas de Monge-Kantorovich. Se ilustra el esquema con ejemplos en el intervalo $[0, 1]$, los cuales tienen solución exacta, lo cual permite comparar los resultados del esquema.

Abstract

Palabras Clave

Esquema de Aproximación — Programación Lineal — Transferencia de Masas

¹Facultad de Matemáticas, Univesidad Veracruzana, México, miriam.baez.hdez@gmail.com, maravendano@uv.mx, jgabriel@uv.mx

Introducción

En 1781 el matemático francés Gaspard Monge planteó el problema de transferencia de masas, el cual consiste en encontrar un plan óptimo de transporte para mover un montículo de tierra a un hoyo. Para ello, Monge dividió el montículo en granos de tierra, así el problema se redujo a encontrar una función que proporcionara la posición del granito en el hoyo. Hoy, esto es conocido como el Problema de Monge y la función de transferencia se conoce como acoplamiento óptimo [19].

Más tarde, en 1942 el matemático ruso Leonid V. Kantorovich estudió el Problema de Translocación de Masas [14], el cual consiste en minimizar el trabajo de translocación del movimiento de una distribución de masa inicial a una distribución de masa final. Para su estudio Kantorovich consideró espacios métricos compactos, conjuntos de Borel y una función de costo no negativa. Posteriormente, en 1948 observó que si en el Problema de Translocación se consideraba a la función de costo como la distancia, este resultaba una generalización del Problema de Monge [15], desde entonces a este problema se conoce como el Problema de Transferencia de Masas de Monge-Kantorovich. Éste es un problema muy conocido en diferentes áreas como: Probabilidad, Análisis Funcional, Geometría Diferencial, Estadística, Economía, Sistema Dinámicos, Computación [20]. Entre las aplicaciones más importantes que tiene el Problema de Transferencia de Masas podemos mencionar a la métrica de Kantorovich [20], en los últimos años la métrica se ha empleado para registro de imágenes [11] y control de radioterapia de cáncer [12].

La métrica de Kantorovich también ha sido empleada para comparar imágenes [13], a una imagen digitalizada se le puede asociar una función de distribución de probabilidad y esta a su vez una medida de probabilidad. Por lo tanto, para comparar imágenes se requiere de una métrica probabilística, sin embargo, calcular numéricamente esta métrica no ha sido

una tarea sencilla. Por ejemplo, la métrica de Kantorovich es un problema complicado de resolver, en virtud que es un problema de optimización en espacios de medidas. En la literatura existen algoritmos de aproximación que se pueden emplear para la métrica de Kantorovich, como en [9], donde se desarrolla un algoritmo numérico para aproximar el valor del Problema de Transferencia de Masas en espacios compactos. Diversos autores han estudiado esquemas de aproximación para el Problema de Transferencia de Masas, por ejemplo Hernández-Lerma y Lasserre proponen en [16] un esquema de aproximación general basado en problemas de programación lineal infinita, el cual se puede aplicar a un problema de control de Markov, programación semi-infinita y al problema de transferencia de masas, entre otros esquemas para el Problema de Transferencia de Masas han sido estudiados por Benamou y Brenier [6], Caffarelli [8], Benamou [5] y Guittet [10]. Recientemente por Bocs [7] y Mérigot [18].

1. El Problema de Transferencia de Masas de Monge-Kantorovich

Sean \mathcal{X} y \mathcal{Y} dos espacios métricos compactos, con σ -álgebras de Borel $\mathbb{B}(\mathcal{X})$ y $\mathbb{B}(\mathcal{Y})$ respectivamente, consideremos además una función medible definida en $c : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$, tomemos medidas de probabilidad ν_1 en \mathcal{X} y ν_2 en \mathcal{Y} , y una medida de probabilidad μ en $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, denotamos por $\Pi_1\mu$ y $\Pi_2\mu$ las marginales o proyecciones de μ en \mathcal{X} y \mathcal{Y} , respectivamente. Entonces el problema de transferencia de masas MT está definido por

$$\text{MT : Minimizar } \langle \mu, c \rangle := \int c d\mu, \quad (1)$$

sujeto a:

$$\Pi_1\mu = \nu_1, \quad \Pi_2\mu = \nu_2, \quad \mu \geq 0. \quad (2)$$

Con su respectivo problema dual

$$MT^* : \text{Maximizar } \int f_1 dv_1 + \int_Y f_2 dv_2$$

sujeto a:

$$f_1(x) + f_2(y) \leq c(x, y), \quad (3)$$

donde $f_1 : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ y $f_2 : \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$.

Ver [16].

Diremos que μ es una solución factible para el problema MT si satisface las restricciones (1), además se dice que el programa es consistente si tiene al menos una solución factible. El programa es soluble si existe una solución factible que alcanza su valor óptimo. En la literatura una de las hipótesis requeridas para que el problema sea soluble es la presentado a continuación.

Suposición 1 (a) El programa \mathbb{P} es consistente.

(b) El programa \mathbb{P} tiene una solución factible x_0 con $\langle x_0, c \rangle > 0$ y, más aún, el conjunto

$$\mathcal{X}_0 := \{x \in X_+ | \langle x, c \rangle \leq \langle x_0, c \rangle\}$$

es débilmente, secuencialmente compacto.

Ver [16].

Decimos que no hay abertura de dualidad, si el valor del programa primal y el valor del programa dual coinciden. Algunos ejemplos, donde se cumple esta condición se pueden ver en [1].

Teorema 1 Si la Suposición 1 se cumple, entonces

(a) \mathbb{P} es un programa soluble.

(b) No hay abertura de dualidad.

Ver [16].

2. Esquema de Aproximación

El esquema mostrado a continuación es una aplicación del propuesto en [16], el cual consiste de tres pasos: el primero nos asegurará que el programa de programación lineal infinita es soluble, después se agregan restricciones finitas al programa y se relajan las restricciones, finalmente se discretiza la variable de interés.

Denotemos como $\text{sp}(E)$ al espacio generado por el conjunto E , el cual es un subconjunto de un espacio vectorial, y $\text{coc}(E)$ es el cono convexo generado por E .

Requerimos lo siguiente:

Suposición 2

(a) X y Y son espacios métricos compactos.

(b) La función $c(x, y)$ es continua.

Ver [9]

Consideremos $X = Y = [0, 1]$, además $(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ y $(\mathcal{Z}, \mathcal{W})$ dos parejas duales, tal que $\mathcal{X} = M([0, 1] \times [0, 1])$, $\mathcal{Y} = C([0, 1] \times [0, 1])$, $\mathcal{Z} = (M([0, 1]) \times M([0, 1]))$ y $\mathcal{W} = (C([0, 1]) \times C([0, 1]))$, donde $M([0, 1])$ es el espacio vectorial de las medidas signadas en $[0, 1]$, y $C([0, 1])$ es el espacio de funciones continuas en $[0, 1]$.

Denotamos $M_+([0, 1])$ el cono positivo definido como

$$M_+([0, 1]) := \{\mu \in M([0, 1]) | \mu \geq 0\},$$

y

$$M_1([0, 1]) := \{\mu \in M([0, 1])_+ | \mu([0, 1]) = 1\},$$

la familia de medidas de probabilidad.

Como $[0, 1]$ es un espacio métrico compacto, \mathcal{X} es el dual topológico de \mathcal{Y} , así $M_1([0, 1] \times [0, 1])$ es secuencialmente compacto en la topología débil $\sigma - (\mathcal{X}, \mathcal{Y})$, lo cual implica que la Suposición 1 se cumple. Además, el espacio $\mathcal{W} = C([0, 1]) \times C([0, 1])$ es separable.

Sea W_∞ un subconjunto denso numerable de \mathcal{Y} , y sea $\{W_k\}$ una sucesión creciente de conjuntos finitos tal $W_k \uparrow W_\infty$.

Para cada k , consideremos la agregación

$$MT(W_k) : \text{Minimizar } \langle \mu, c \rangle := \int cd\mu,$$

sujeto a:

$$\langle (\pi_1\mu, \pi_2\mu) - (v_1, v_2), w_k \rangle = 0 \quad (4)$$

$$\forall w_k := (w_i^k, w_j^k) \in W_k, \quad y \quad \mu \in M_+([0, 1] \times [0, 1]).$$

Ahora, las restricciones de igualdad serán relajadas a desigualdades. Sea $\{\varepsilon_k\}$ una sucesión de números positivos tal que $\varepsilon_k \downarrow 0$. Entonces para cada $k = 1, 2, \dots$ consideramos el siguiente problema en programación lineal infinita

$$MT(W_k, \varepsilon_k) : \text{Minimizar } \langle \mu, c \rangle,$$

sujeto a:

$$|\langle (\pi_1\mu, \pi_2\mu) - (v_1, v_2), w_k \rangle| \leq \varepsilon_k \quad (5)$$

$$\forall w_k \in W_k, \quad y \quad \mu \in M_+([0, 1] \times [0, 1]).$$

Finalmente, sea X_+^∞ un subconjunto denso numerable de $\mathcal{X}_+ := M([0, 1] \times [0, 1])_+$, y $\{X_n\}$ una sucesión creciente de conjuntos finitos, tal que $X_n \uparrow X_+^\infty$. Consideremos el programa en programación lineal finita

$$\overline{MT} := MT(X_n, W_k, \varepsilon_k) : \text{Minimizar } \sum_x n^* \lambda_x \langle \mu, c \rangle,$$

sujeto a:

$$\left| \left\langle \sum_x^{n^*} (\pi_1\mu, \pi_2\mu) - (v_1, v_2), w_k \right\rangle \right| \leq \varepsilon_k \quad (6)$$

$$\forall w_k \in W_k, \quad \mu \in M_+([0, 1] \times [0, 1]) \quad y \quad n^* := |X_n|.$$

A continuación se realizará la implementación del esquema. Sea $X = Y = [0, 1]$ con la topología usual, y $v_1, v_2 = m$ la media de Lebesgue. Consideremos las siguientes parejas duales $(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ y $(\mathcal{Z}, \mathcal{W})$.

Además, consideremos los siguientes conjuntos

$$W_k = \left\{ (B_i^k, B_j^k) \mid B_{i,j}^k \in \{B_0^k, B_1^k, \dots, B_k^k\} \right\},$$

donde B_i^k denota un polinomio de Bernstein de grado k , el cual satisface

$$B_i^k(x) = \binom{k}{i} x^i (1-x)^{k-i} \quad \text{y} \quad \int_0^1 B_i^k(x) dx = \frac{1}{k+1}$$

Luego, $W_\infty := \bigcup_{k=1}^{\infty} \text{sp}\{W_k\}$ es débilmente denso en $C([0, 1]) \times C([0, 1])$, y la cardinalidad del conjunto W_k es $(k+1)^2$.

Para cada $n \in \mathbb{N}$, consideremos el siguiente conjunto

$$X_n = \{ \delta_{(a,b)}(\cdot) \},$$

de medidas de Dirac, para a y b en

$$\left\{ \frac{j}{2^n} \mid j = 0, \dots, 2^n \right\},$$

Entonces, $\mathcal{X}_+^\infty := \bigcup_{n=1}^{\infty} \text{coc}(X_n)$ es débilmente denso en \mathcal{X}_+ , y la cardinalidad del conjunto X_n es 2^{2n} . Entonces, el esquema de aproximación es

$$\overline{MT} : \text{Minimizar} \sum_{(a,b)} \lambda_{(a,b)} c(a,b), \quad (7)$$

sueto a:

$$\sum_{(a,b)} \lambda_{(a,b)} \left[B_i^k(a) + B_j^k(b) \right] \leq \frac{2}{k+1} + \varepsilon, \quad (8)$$

$$\sum_{(a,b)} \lambda_{(a,b)} \left[B_i^k(b) + B_j^k(a) \right] \geq \frac{2}{k+1} + \varepsilon, \quad (9)$$

donde $c(a,b) = c(a,b)$.

Teorema 2 Si la Suposición 1 se cumple, entonces para cada k existe $n(k)$ tal que para cada $n \geq n(k)$, $\text{MT}(X_n, W_k, \varepsilon)$ es soluble y

$$\min \text{MT}(W_k, \varepsilon_k) \leq \min \text{MT}(X_n, W_k, \varepsilon_k) \leq \min \text{MT} + \varepsilon_k.$$

Ver [16].

3. Ejemplos Numéricos

A continuación mostramos ejemplos a los cuales le aplicamos el esquema, estos fueron tomados de [2], de los cuales se conoce el valor óptimo del programa.

Ejemplo 1 Consideremos la función de costo $c(a,b) = ab(a-b)$, en el Problema de Transferencia de Masas, que sabemos tiene valor óptimo $-\frac{9}{256} \approx -0,03515625$ y tiene soporte en el conjunto

$$\text{Graph}(g) = \{(t, g(t)) \mid t \in [0, 1]\},$$

con

$$g(t) = \begin{cases} \frac{1}{4} + t & \text{if } 0 \leq t < \frac{3}{4}, \\ 1 - t & \text{if } \frac{3}{4} \leq t \leq 1, \end{cases}$$

y consideramos $\varepsilon_k^n = \frac{1}{10^{n-2} \sqrt{k}}$.

Variamos el parámetro k desde 2 a 9, y para cada k movemos a n desde 4 a 9. De lo cual obtuvimos los siguientes resultados, los cuales indican los errores de aproximación del esquema al valor óptimo del programa.

	$n = 4$	$n = 5$
$k = 2$	0,017380600	0,0176040700
$k = 3$	0,011528550	0,0108222500
$k = 4$	0,004827046	0,0026806390
$k = 5$	0,004427841	0,0020611890
$k = 6$	0,003936912	0,0019239340
$k = 7$	0,002954513	0,0009981689
$k = 8$	0,002777794	0,0009861557
$k = 9$	0,002719209	0,0009109657

	$n = 6$	$n = 7$
$k = 2$	0,01890373000	0,019683010
$k = 3$	0,01139729000	0,011758030
$k = 4$	0,00247768000	0,002455755
$k = 5$	0,00186624500	0,001852651
$k = 6$	0,00183779700	0,001826349
$k = 7$	0,00081778760	0,0008197949
$k = 8$	0,00098615560	0,0008114302
$k = 9$	0,00069509160	0,0006775082

	$n = 8$	$n = 9$
$k = 2$	0,0200872300	0,0202909700
$k = 3$	0,0119523300	0,0120497000
$k = 4$	0,0024566440	0,0024564520
$k = 5$	0,0018515210	0,0018524900
$k = 6$	0,0018300650	0,0018318280
$k = 7$	0,0008302774	0,0008358459
$k = 8$	0,0008186530	0,0008224715
$k = 9$	0,0006760644	0,0006761160

De los resultados obtenidos por el esquema, por cada fila se muestra el mejor resultado, y por cada conjunto de datos se muestra el mejor resultado del esquema, el cual se obtuvo en $k = 9$ y $n = 8$. Con un error de 0,0006760644 y cuyo valor de aproximación es $-0,03583231$.

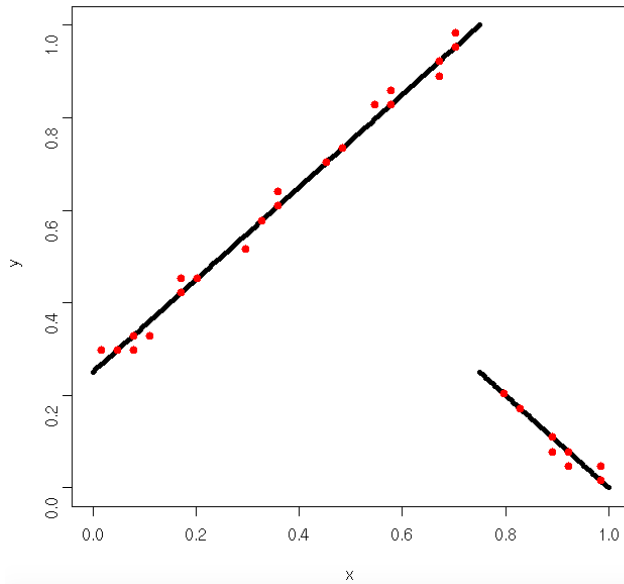


Figura 1. Soporte de la solución óptima a \overline{MT} con $k = 9$ y $n = 8$.

La Figura 1 muestra la gráfica del soporte solución y los puntos rojos muestran el soporte para la medida de aproximación en el caso $n = 8$ y $k = 9$.

Ejemplo 2 Consideremos la función de costo $c(a, b) = (2b - a - 1)^2(2b - a)^2$, en el Problema de Transferencia de Masas, sabemos que tiene valor óptimo 0 y soporte en el conjunto

$$\text{Graph}(h) = \{(t, h(t)) | t \in [0, 1]\},$$

con $h : [0, 1] \times [0, 1]$ tal que

$$h(t) = \begin{cases} \frac{1}{2}t & \text{si } 0 \leq t \leq 1, \\ \frac{1}{2}t + \frac{1}{2} & \text{si } 0 \leq t \leq 1, \end{cases}$$

y consideramos $\varepsilon_k^n = \frac{1}{10(n-2)\sqrt{k}}$.

Variamos el parámetro k desde 2 a 10, y para cada k movemos a n desde 4 a 10. De lo cual obtuvimos los siguientes resultados, los cuales indican los errores de aproximación del esquema al valor óptimo del programa.

	$n = 5$	$n = 6$
$k = 2$	0,0002363199	0,00006007883
$k = 3$	0,0002362977	0,00006007827
$k = 4$	0,0002362751	0,00006007770
$k = 5$	0,0002362534	0,00006007715
$k = 6$	0,0002362328	0,00006007662
$k = 7$	0,0002362132	0,00006007975
$k = 8$	0,0002361945	0,00006007689
$k = 9$	0,0002361778	0,00006007810
$k = 10$	0,0002361673	0,00006007816

	$n = 7$	$n = 8$
$k = 2$	0,00001513965	0,0000037998070
$k = 3$	0,00001513964	0,0000037998060
$k = 4$	0,00001513962	0,0000037998065
$k = 5$	0,00001513961	0,0000038160170
$k = 6$	0,00001516782	0,0000038280000
$k = 7$	0,00001528733	0,0000038113430
$k = 8$	0,00001529179	0,0000038179810
$k = 9$	0,00001516529	0,0000038174210
$k = 10$	0,00001527237	0,0000038147230

	$n = 9$	$n = 10$
$k = 2$	0,0000009518125	0,0000002381858
$k = 3$	0,0000009518126	0,0000002384716
$k = 4$	0,0000009523129	0,0000002382365
$k = 5$	0,0000009530545	0,0000002384016
$k = 6$	0,0000009520117	0,0000002383636
$k = 7$	0,0000009528386	0,0000002383380
$k = 8$	0,0000009531212	0,0000002384158
$k = 9$	0,0000009537839	0,0000002384849
$k = 10$	0,0000009540616	0,0000002384848

De los resultados obtenidos por el esquema, por cada fila se muestra el mejor resultado, y por cada conjunto de datos se muestra el mejor resultado del esquema, el cual se obtuvo en $k = 10$ y $n = 10$. Con un error de 0,0000002384848 y cuyo valor de aproximación es 0,0000002384848.

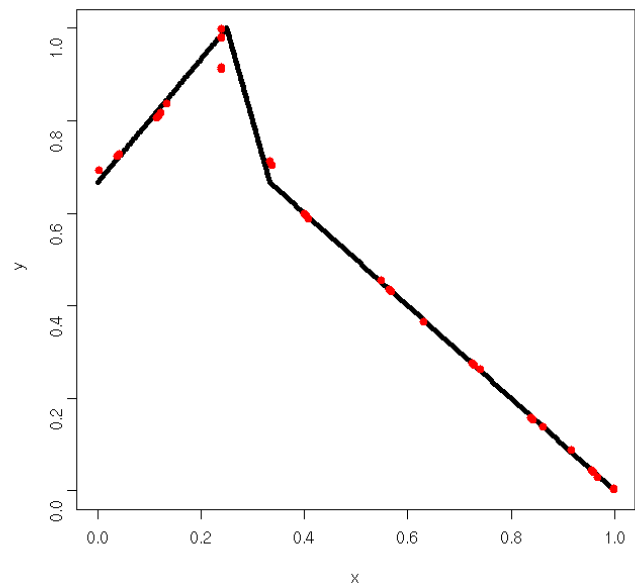


Figura 2. Soporte de la solución óptima a \overline{MT} con $k = 10$ y $n = 10$.

La Figura 2 muestra la gráfica del soporte solución y los puntos rojos muestran el soporte para la medida de aproximación en el caso $n = 10$ y $k = 10$.

4. Conclusiones

La aplicación del esquema propuesto en [16], al Problema de Transferencia de Masas de Monge-Kantorovich es eficiente, y el tiempo computacional es corto, pero los valores de los parámetros están limitados por la capacidad de la computadora, ya que el número de variables es muy grande, incluso si n y k son pequeños. Una continuación a este esquema sería aplicar una meta-heurística con el fin de reducir el número de variables y así aumentar los valores de n y k para obtener una mejor aproximación. Además de encontrar un orden de convergencia.

Referencias

- [1] Anderson, E., Nash P. (1987): Linear programming in infinite-dimensional spaces: theory and applications. Wiley, Chichester.
- [2] Anderson, E., Philpott, A. (1984): Duality and an algorithm for a class of continuous transportation problems. *Mathematics of Operations Research*, 9, 222-231.
- [3] Avendaño-Garrido M.L., Gabriel J.R., Quintana-Torres L., and González-Hernández J. (2017): An Approximation Scheme for the Kantorovich-Rubinstein Problem on Compact Spaces. *International Journal of Numerical Methods and Applications*, 16, pp 107-125.
- [4] Avendaño-Garrido M.L., Gabriel J.R., Quintana-Torres L., and Mezura-Montes E. (2016): A metaheuristic for a numerical approximation to the mass transfer problem. *Journal of Optimization Int. J. Appl. Math Computa. Sci.*, 26(4), pp. 757-766.
- [5] Benamou, J. (2003): Numerical resolution of an unbalanced mass transport problem. *ESAIM Mathematical Modelling and Numerical Analysis* 37, pp. 851-868.
- [6] Benamou, J., Brenier, Y.: (2000): A computational fluid mechanics solution to the Monge-Kantorovich mass transfer problem. *Numerische Mathematik* 84, pp. 375-393.
- [7] Bosc, D. (2010): Numerical approximation of optimal transport maps. SSRN.
- [8] Caffarelli, L., Feldman, M., McCann, R. (2002): Constructing optimal maps for Monge's transport problem as a limit of strictly convex costs. *Journal of the American Mathematical Society* 15, pp. 1-26.
- [9] Gabriel J.R., González-Hernández J. and López-Martínez R.R. (2010): Numerical approximations to the mass transfer problem on compact spaces. *IMA. J. Numer. Anal.*, 30(4), pp. 1121-1136.
- [10] Guittet, K. (2003): On the time-continuous mass transport problem and its approximation by augmented lagrangian techniques. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 41, pp. 382-399.
- [11] Haker S., Zhu L. and Tannenbaum A. (2004): Optimal mass transport for registration and warping. *Int. J. Comput. Vis.*, 63, pp. 225-240.
- [12] Hanin, L., Rachev, S.T. and Yakolev A.Y. (1993): On optimal control of cancer radiotherapy for nonhomogeneous cell populations. *Adv. Appl. Prob.*, 25, pp. 1-23.
- [13] Kaijset T. (1998): Computing the Kantorovich distance for images. *Int. J. Comput. Vis.*, 9, pp. 173-191.
- [14] Kantorovich L.V. (2006): On the translocation of masses. *J. Math. Sci. (N.Y.)*, 133(4), pp. 1383.
- [15] Kantorovich L.V. (2006): On a problem of Monge. *J. Math. Sci. (N.Y.)*, 133(4), pp. 1383.
- [16] Hernández-Lerma, O., Lasserre, J. (1998): Approximation schemes for infinite linear programs. *SIAM Journal on Optimization* 8, pp. 973-988.
- [17] Levin, V.L. (1975): On the mass transfer problem. *Soviet Math. Dokl.* 16 (5), pp. 1349-1353.
- [18] Mérigot, Q. (2011): A multiscale approach to optimal transport. *Computer Graphics Forum* 30(5), pp. 1583-1592.
- [19] Monge, G. (1781): Mémoire sur la théorie des déblais et rémbais. *Mém. Acad. Sci., Paris*.
- [20] Rachev, S.T. and Rüschendorf, L. (1998): *Mass Transportation Problems Vol. 1 and 2*, Springer, New York.