

Transporte Ótimo para Redes Neurais

Autor: Davi Sales Barreira

1. Introdução

2. Teoria de Transporte Ótimo

2.1 Monge & Kantorovich

2.2 Distância de Wasserstein

2.3 Distância de Wasserstein

2.4 Variações da Distância de Wasserstein

3. Aplicações de OT em Redes Neurais

3.1 Wasserstein GAN

Transporte Ótimo (OT) é uma área da matemática que estuda o problema de transportar “massa” em uma configuração para outra enquanto se minimiza o custo de transporte.

Apesar de parecer um problema bastante específico, a ideia de se transportar objetos de maneira ótima é bastante ubíqua e possui diversas utilidades.

OT tem aparecido em diversas aplicações recentes de Machine Learning, como: **transfer learning**, **clustering**, **redução de dimensionalidade**, **modelos generativos**, entre outros.

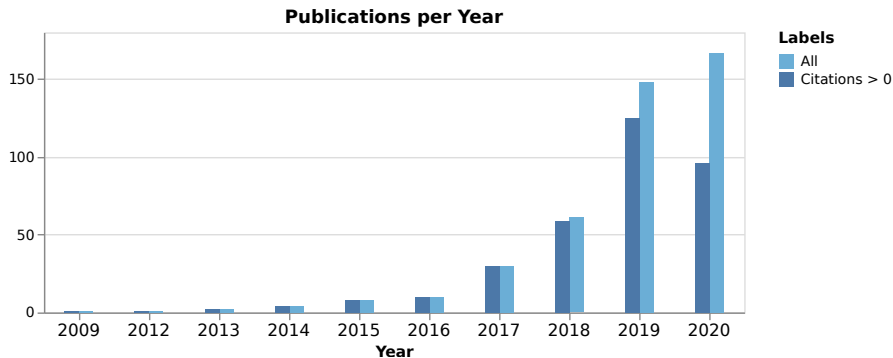


Figure 1: Gráficos com a evolução do número de publicações ao relacionadas a Transporte Ótimo com Machine Learning [19].

A solução de um problema de Transporte Ótimo sempre resulta em dois subprodutos, o **plano (mapa)** ótimo de transporte e o **custo mínimo** para realizar o transporte.

A maioria das aplicações em ML utiliza o custo mínimo para definir uma métrica de distância (e.g. Wasserstein). Porém, existem aplicações como Transfer Learning que utilizam os mapas ótimos [19].

Nesta apresentação vamos focar em duas aplicações:

1. Wasserstein Generative Neural Networks [3];
2. DeepJDOT para Transfer Learning [8].

Problema de Monge - Qual a maneira ótima de transporta massa de uma configuração para outra?

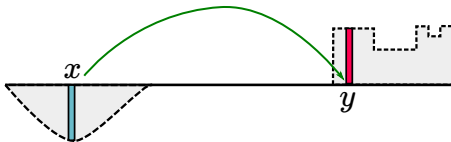


Figure 2: Massa não pode ser separada.

Kantorovich Problem - Relaxação do problema original de Monge.

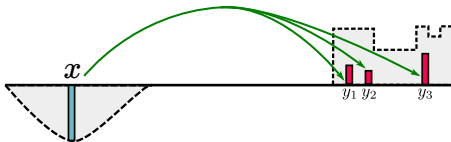


Figure 3: Massa pode ser separada.

Definition (Problema de Monge)

Dadas duas medidas de probabilidade $\mu \in \mathcal{P}(X)$, $\nu \in \mathcal{P}(Y)$ e uma função de custo $c : X \times Y \rightarrow [0, +\infty]$, resolva:

$$(MP) \quad \inf \left\{ \int_X c(x, T(x)) d\mu \quad : \quad T_{\#}\mu = \nu \right\} \quad (1)$$

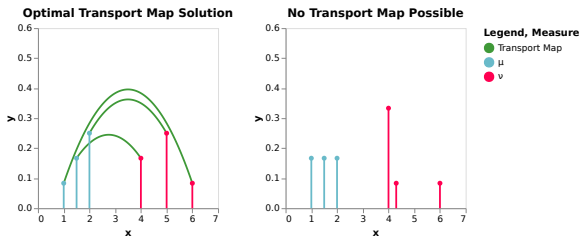


Figure 4: Exemplo de dois problemas de Transporte Ótimo.

Definition (Acoplamento)

Sejam (X, μ) e (Y, ν) espaços de probabilidade. Para $\gamma \in \mathcal{P}(X \times Y)$, dizemos que γ é um acoplamento de (μ, ν) se $(\pi_X)_\# \gamma = \mu$ e $(\pi_Y)_\# \gamma = \nu$. Chamamos $\Pi(\mu, \nu)$ do conjunto de **Planos de Transporte**:

$$\Pi(\mu, \nu) := \{\gamma \in \mathcal{P}(X \times Y) : (\pi_X)_\# \gamma = \mu \text{ and } (\pi_Y)_\# \gamma = \nu\} \quad (2)$$

Definition (Problema de Kantorovich)

Dadas duas medidas de probabilidade $\mu \in \mathcal{P}(X)$, $\nu \in \mathcal{P}(Y)$ e a função de custo $c : X \times Y \rightarrow [0, +\infty]$, resolva:

$$(KP) \quad \inf \left\{ \int_{X \times Y} c(x, y) d\gamma : \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\} \quad (3)$$

O Problema de Kantorovich tem uma formulação dual, que para certas condições de regularidade possui a mesma solução ótima que o problema primal (dualidade forte).

Definition (Problema Dual)

Dadas $\mu \in \mathcal{P}(X)$, $\nu \in \mathcal{P}(Y)$ e custo $c : X \times Y \rightarrow \mathbb{R}_+$. O Problema Dual é

$$(DP) \quad \sup \left\{ \int_X \phi \, d\mu + \int_Y \psi \, d\nu : \phi \in C_b(X), \psi \in C_b(Y), \phi \oplus \psi \leq c \right\} \quad (4)$$

Funções ϕ, ψ são chamadas de **Potenciais de Kantorovich**.

Definition (Distância de Wasserstein)

Seja (X, d) um espaço métrico polonês, com $c : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $c(x, y) = d(x, y)^p$, e $p \in [1, +\infty)$. Para $\mu, \nu \in \mathcal{P}_p(X)$, a distância de Wasserstein é dada por:

$$W_p(\mu, \nu) := \left(\inf_{\gamma \in \Pi(\mu, \nu)} \int_{X \times X} d(x, y)^p d\gamma \right)^{1/p} \quad (5)$$

$\mathcal{P}_p(X)$ é o espaço de medidas de probabilidade com p -ésimo momento.

A distância de Wasserstein preserva a geometria do espaço no qual está definida a medida.

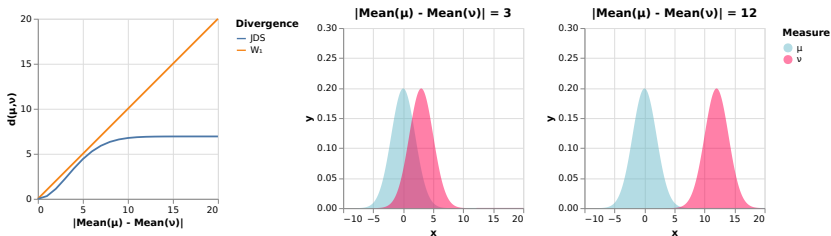


Figure 5: Comparação entre a distância de Wasserstein e Jensen-Shannon.

Calcular a distância de Wasserstein em espaços de alta dimensão (e.g. imagens) é bastante custoso.

Assim, variações da distância de Wasserstein foram desenvolvidas, como por exemplo:

1. Entropic Wasserstein;
2. Sliced Wasserstein.

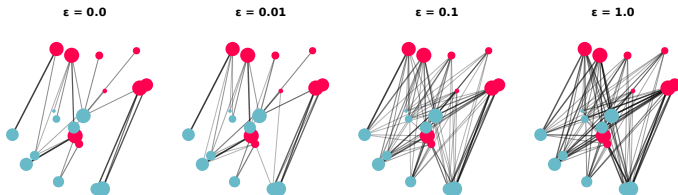


Figure 6: Exemplo de solução de OT com regularização entrópica [19].

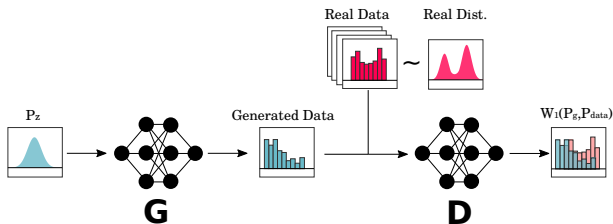


Figure 7: Massa pode ser separada.

- [1] L. Ambrosio, N. Gigli, and G. Savaré. *Gradient flows: in metric spaces and in the space of probability measures*. Springer Science & Business Media, 2008.
- [2] Luigi Ambrosio, Elia Brué, and Daniele Semola. Lectures on optimal transport, 2021.
- [3] Martin Arjovsky, Soumith Chintala, and Léon Bottou. Wasserstein gan. *arXiv preprint arXiv:1701.07875*, 2017.
- [4] H.H. Bauschke and P.L. Combettes. *Convex analysis and monotone operator theory in Hilbert spaces*, volume 408. Springer, 2011.
- [5] R.I. Bot. *Conjugate duality in convex optimization*, volume 637. Springer Science & Business Media, 2009.
- [6] G. Carlier and C. Poon. On the total variation wasserstein gradient flow and the tv-jko scheme. *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 25:42, 2019.
- [7] Antonin Chambolle, Vicent Caselles, Daniel Cremers, Matteo Novaga, and Thomas Pock. An introduction to total variation for image analysis. *Theoretical foundations and numerical methods for sparse recovery*, 9(263-340):227, 2010.
- [8] Bharath Bhushan Damodaran, Benjamin Kellenberger, R émi Flamary, Devis Tuia, and Nicolas Courty. Deepjdot: Deep joint distribution optimal transport for unsupervised domain adaptation. In *Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV)*, pages 447–463, 2018.
- [9] L.C. Evans and R.F. Gariepy. *Measure theory and fine properties of functions*. CRC press, 2015.
- [10] Rémi FLAMARY. *Transport optimal pour l'apprentissage statistique*. PhD thesis, Télécom Paristech, 2019.
- [11] Rémi Flamary. Optimal transport for machine learning. page 97, November 2019.
- [12] David JH Garling. *Analysis on Polish spaces and an introduction to optimal transportation*, volume 89. Cambridge University Press, 2018.
- [13] Ishaan Gulrajani, Faruk Ahmed, Martin Arjovsky, Vincent Dumoulin, and Aaron Courville. Improved training of wasserstein gans. *arXiv preprint arXiv:1704.00028*, 2017.
- [14] R. Jordan, D. Kinderlehrer, and F. Otto. The variational formulation of the fokker-planck equation. *SIAM journal on mathematical analysis*, 29(1):1–17, 1998.
- [15] Grégoire Montavon, Klaus-Robert Müller, and Marco Cuturi. Wasserstein training of restricted boltzmann machines. In D. Lee, M. Sugiyama, U. Luxburg, I. Guyon, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 29, pages 3718–3726. Curran Associates, Inc., 2016. URL <https://proceedings.neurips.cc/paper/2016/file/728f206c2a01bf572b5940d7d9a8fa4c-Paper.pdf>.

- [16] Gabriel Peyré, Marco Cuturi, et al. Computational optimal transport: With applications to data science. *Foundations and Trends® in Machine Learning*, 11(5-6):355–607, 2019.
- [17] R.T. Rockafellar. *Conjugate duality and optimization*. SIAM, 1974.
- [18] R. Rossi and G. Savaré. Tightness, integral equicontinuity and compactness for evolution problems in banach spaces. *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa-Classe di Scienze*, 2(2):395–431, 2003.
- [19] Davi Sales Barreira. *Optimal Transport for Machine Learning: Theory and Applications*. PhD thesis, 2021.
- [20] Filippo Santambrogio. Optimal transport for applied mathematicians. *Birkhäuser, NY*, 55(58-63):94, 2015.
- [21] Filippo Santambrogio. {Euclidean, metric, and Wasserstein} gradient flows: an overview. *Bulletin of Mathematical Sciences*, 7(1): 87–154, 2017.
- [22] user125646 (<https://math.stackexchange.com/users/125646/user125646>). How to show that the set of all lipschitz functions on a compact set x is dense in $c(x)$? Mathematics Stack Exchange. URL <https://math.stackexchange.com/q/665686>. URL: <https://math.stackexchange.com/q/665686> (version: 2014-02-07).
- [23] Cédric Villani. *Optimal transport: old and new*, volume 338. Springer Science & Business Media, 2008.
- [24] Larry Wasserman. Statistical methods for machine learning - lecture notes, 2018.