



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

TÍTULO DE LA MEMORIA/TESIS

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA, MENCIÓN MATEMÁTICAS
APLICADAS

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO

FRANCISCO MUÑOZ GUAJARDO

PROFESOR GUÍA:
JOAQUÍN FONTBONA TORRES

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
NOMBRE COMPLETO UNO
NOMBRE COMPLETO DOS
NOMBRE COMPLETO TRES

SANTIAGO DE CHILE
2024

Resumen

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. In hac habitasse platea dictumst. Integer tempus convallis augue. Etiam facilisis. Nunc elementum fermentum wisi. Aenean placerat. Ut imperdiet, enim sed gravida sollicitudin, felis odio placerat quam, ac pulvinar elit purus eget enim. Nunc vitae tortor. Proin tempus nibh sit amet nisl. Vivamus quis tortor vitae risus porta vehicula.

Una dedicatoria corta.

Agradecimientos

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Tabla de Contenido

1. Transporte Óptimo de Masas	1
1.1. Notación	1
1.2. El Problema de Transporte	2
1.3. La Distancia y el Espacio de Wasserstein	8
1.4. El Baricentro de Wasserstein Bayesiano	10
1.5. Baricentro	11
 Bibliografía	 13
 Apéndice A. Anexo	 15

Índice de Tablas

Índice de Ilustraciones

- 1.1. Representación de la montaña de arena, representada en rojo por la medida μ , y el pozo, representada en azul por la medida ν . Imagen obtenida de [2]. 3
- 1.2. Representación de como la función T ha de preservar la masa total de la arena. Imagen obtenida de [2]. 4
- 1.3. Izquierda: coupling óptimo entre dos medidas 1-D continuas con densidad. El coupling está localizado a lo largo del grafo del mapa de transporte óptimo $(x, T(x))$. Derecha: coupling óptimo entre dos medidas discretas. El radio del disco negro es proporcional a la masa transportada en esa coordenada. Imagen obtenida de [6]. 6

Lista de tareas pendientes

■ Un comentario	1
■ Agregar alguna intro para lo que es una medida de probabilidad? para aquellas personas que vienen de otras áreas?	1
■ Se podría dejar notación probabilística?	1
■ Se podría agregar una definición de función Lipschitz?	1
■ Tenía pensado en poner el teorema de Brenier (teo 2.1 de [6]), pág 27 para explicar la equivalencia Kantorovich-Monge.	8
■ Incluir subsections para la distancia, espacio, y convergencia débil?	8
■ Se podría poner algún ejemplo con una imagen.	11
■ Mencionar las geodésicas en el espacio de Wasserstein	11
■ Baricentro de Wasserstein Bayesiano	11
■ Se podría agregar una sección de baricentro de Wasserstein Bayesiano?	11

Capítulo 1

Transporte Óptimo de Masas

En este capítulo se abordará el problema de transporte óptimo, la distancia de Wasserstein, y el problema de los baricentros de Wasserstein. Además, se presentarán algunas propiedades de la distancia de Wasserstein, las cuales serán de utilidad en el desarrollo de este trabajo. La notación y definiciones utilizadas en este capítulo se encuentran basadas en [7] y [6]. Sin embargo, antes de empezar a enunciar definiciones y propiedades, se sentarán la notación y definiciones básicas que se utilizarán a lo largo de este trabajo.

Joaquín

Un comentario

1.1. Notación

Francisco: Agregar alguna intro para lo que es una medida de probabilidad? para aquellas personas que vienen de otras áreas?

Definición 1.1.1.

Francisco: Se podría dejar notación probabilística?

Se definen los siguientes espacios:

- (\mathcal{X}, d) es un espacio Polaco, si \mathcal{X} es un espacio métrico, completo y separable.
- $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ denotará al conjunto de medidas de probabilidad en \mathcal{X} , utilizando la σ -álgebra de Borel.
- $\mathcal{P}_{ac}(\mathcal{X})$ denotará al conjunto de medidas de probabilidad absolutamente continuas con respecto a una medida de referencia λ (como por ejemplo, la de Lebesgue o la cuenta puntos), utilizando la σ -álgebra de Borel.
- $\mathcal{C}(\mathcal{X})$ denotará al conjunto de funciones continuas en \mathcal{X} .
- $\text{Lip}_k(\mathcal{X})$ denotará al conjunto de funciones k -Lipschitz en \mathcal{X} . Mientras que se asumirá que $\text{Lip}(\mathcal{X})$ denotará al conjunto de funciones 1-Lipschitz en \mathcal{X} .

Francisco: Se podría agregar una definición de función Lipschitz?

Definición 1.1.2. Se definirá el *simplex* de dimension n como el conjunto de vectores de \mathbb{R}^n cuyas componentes suman 1, es decir,

$$\Sigma_n \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ x \in [0, 1]^n : \sum_{i=1}^n x_i = 1 \right\}, \quad (1.1)$$

y a los elementos pertenecientes al simplex se les llamará *vectores de probabilidad*.

Definición 1.1.3. Dados $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ y $\nu \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$, se denotará por $\text{Cpl}(\mu, \nu)$ al conjunto de medidas de probabilidad en $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ cuyas proyecciones marginales sean μ y ν , es decir,

$$\text{Cpl}(\mu, \nu) \stackrel{\text{def}}{=} \{ \gamma \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y}) : \gamma(A \times \mathcal{Y}) = \mu(A), \gamma(\mathcal{X} \times B) = \nu(B), \forall A \subseteq \mathcal{X}, B \subseteq \mathcal{Y} \}. \quad (1.2)$$

Definición 1.1.4. Para una función medible $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ se define el *operador push-forward* de T como la aplicación $T_{\#} : \mathcal{P}(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ que satisface la siguiente relación:

$$\int_{\mathcal{X}} f(x) dT_{\#}\mu(x) = \int_{\mathcal{Y}} f(T(x)) d\mu(x), \quad \forall f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y}), \quad (1.3)$$

para toda $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$. Adicionalmente, el operador push-forward se puede definir como aquel operador que satisface la siguiente relación:

$$\forall A \subseteq \mathcal{Y} \text{ medible}, \quad T_{\#}\mu(A) = \mu(T^{-1}(A)). \quad (1.4)$$

Observación 1.1.5. Se puede notar que $T_{\#}$ preserva la positividad y la masa total, es decir, si $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, entonces $T_{\#}\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$.

Observación 1.1.6. Para el caso en que la medida $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ sea una medida discreta¹, entonces el operador $T_{\#}$ lo que hará será intercambiar la masa de cada punto de \mathcal{X} a su imagen en \mathcal{Y} , es decir,

$$T_{\#}\mu = \sum_{i=0}^n m_i \delta_{T(x_i)}. \quad (1.5)$$

1.2. El Problema de Transporte

El problema de Monge

En esta sección, se tomará la introducción realizada en el libro *An Invitation to Statistics in Wasserstein Space*, de V. Panaretos y Y. Zemel [5]. En 1781, Monge [4] se hizo la siguiente pregunta: dada una pila de arena y un pozo de igual volumen, ¿Cuál es la forma óptima de transportar la arena al pozo?

Utilizando términos matemáticos, el problema se puede formular de la siguiente manera: dado un espacio de arena \mathcal{X} , un espacio de pozo \mathcal{Y} y una función de costo $c : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$ que encapsula el esfuerzo de transportar una unidad de arena en el punto $x \in \mathcal{X}$ a una posición $y \in \mathcal{Y}$ en el pozo. La distribución de la arena es representada por una medida $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$,

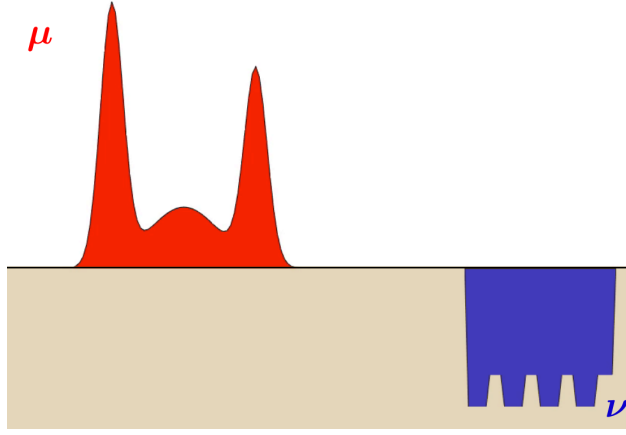


Figura 1.1: Representación de la montaña de arena, representada en rojo por la medida μ , y el pozo, representada en azul por la medida ν . Imagen obtenida de [2].

y la forma del pozo es descrito por una medida $\nu \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$. Una representación gráfica de la montaña de arena y el pozo se puede apreciar en la Figura 1.1.

La decisión de cómo transportar la arena es representada por una función $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, que asigna a cada punto $x \in \mathcal{X}$ una posición $T(x) \in \mathcal{Y}$ en el pozo. El costo total de transportar la arena al pozo es representado por la siguiente expresión:

$$C(T) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mu(x). \quad (1.6)$$

Se puede observar que una propiedad que ha de cumplir la función T es que debe de preservar la masa total de la arena: para cualquier conjunto $B \subseteq \mathcal{Y}$ representando una región en el pozo de volumen $\nu(B)$, debe de ser exactamente el mismo volumen de arena que debe de ir a B . La cantidad de arena que está situada en B es $\{x \in \mathcal{X} : T(x) \in B\} = T^{-1}(B)$, y por tanto, la condición de preservación de masa requiere que se cumpla que $\mu(T^{-1}(B)) = \nu(B)$ para toda $B \subseteq \mathcal{Y}$. Esta condición se puede observar gráficamente en la Figura 1.2, y se formula más formalmente a través de la siguiente definición:

Definición 1.2.1 (Operator push-forward). Sea una función medible $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, se define el *operador push-forward* de T como la aplicación $T_{\#} : \mathcal{P}(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ que satisface la siguiente relación:

$$T_{\#}\mu(B) \stackrel{\text{def}}{=} \mu(T^{-1}(B)) = \nu(B), \quad \forall B \subseteq \mathcal{Y} \text{ medible.} \quad (1.7)$$

En este contexto, el problema de Monge consiste en encontrar una función $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, que minimice el costo total de transporte. Formalmente, este problema se define de la siguiente manera:

Definición 1.2.2 (Problema de Monge, [4]). Dadas dos medidas $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ y $\nu \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ y una función de coste $c : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$, se define el *problema de transporte óptimo de Monge* como el problema de encontrar una función medible $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ que minimice el costo total

¹i.e. $\mu = \sum_{i=0}^n m_i \delta_{x_i}$ con $m \in \Sigma_n$, $x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$ y δ_x la medida de Dirac en x

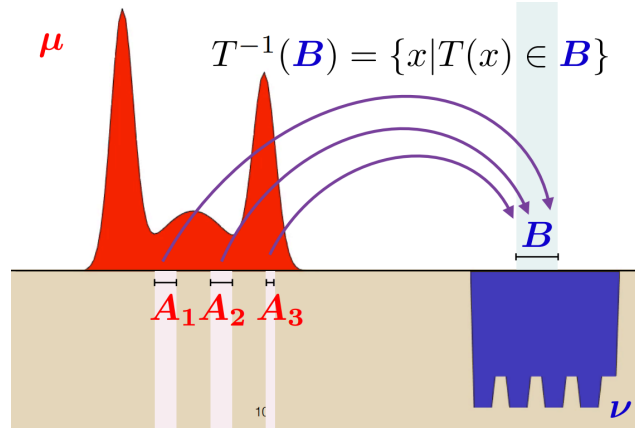


Figura 1.2: Representación de como la función T ha de preservar la masa total de la arena. Imagen obtenida de [2].

de transporte $C(T)$. Es decir, que minimice la siguiente expresión:

$$\inf_{T: T_{\#}\mu = \nu} \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mu(x). \quad (1.8)$$

Aquella función T que resuelva este problema se le llamará *función de transporte* o *mapa de transporte*, y se denotará por $T_{\mu \rightarrow \nu}$.

El problema introducido por Monge [4] es un problema muy difícil, principalmente porque el conjunto de mapas de transporte $\{T : T_{\#}\mu = \nu\}$ es intratable. Además, puede que no exista solución alguna, o en caso de haberla, puede que este no sea única, como veremos en los siguientes ejemplos:

Ejemplo 1.2.3. Consideremos $\mathcal{X} = \{-1, 1\}$, $\mathcal{Y} = \{0\}$, con $\mu = \frac{1}{2}\delta_{-1} + \frac{1}{2}\delta_1$ y $\nu = \delta_0$. En este caso, la función de transporte óptima que minimiza (1.8) es

$$T_{\mu \rightarrow \nu}(-1) = 0 \quad T_{\mu \rightarrow \nu}(1) = 0.$$

Sin embargo, se puede notar que no existe transporte óptimo $T_{\nu \rightarrow \mu}$ que transporte la masa de ν a μ , dado que la masa de ν está concentrada en un único punto, mientras que la masa de μ está distribuida en dos puntos, y no se puede “dividir” la masa. Este correspondería a un ejemplo en el que el problema de Monge no tiene solución.

Ejemplo 1.2.4. Consideremos ahora $\mathcal{X} = \{(1, 1), (-1, -1)\}$, $\mathcal{Y} = \{(-1, 1), (1, -1)\}$, con $\mu = \frac{1}{2}\delta_{(1,1)} + \frac{1}{2}\delta_{(-1,-1)}$ y $\nu = \frac{1}{2}\delta_{(-1,1)} + \frac{1}{2}\delta_{(1,-1)}$. Este ejemplo correspondería a uno en que los puntos de \mathcal{X} y \mathcal{Y} forman un cuadrado. En este caso, se puede notar que existen dos funciones de transporte óptimo que minimizan (1.8), las cuales son

$$\begin{aligned} T_{\mu \rightarrow \nu}^1(1, 1) &= (1, -1) & T_{\mu \rightarrow \nu}^1(-1, -1) &= (-1, 1) \\ T_{\mu \rightarrow \nu}^2(1, 1) &= (-1, 1) & T_{\mu \rightarrow \nu}^2(-1, -1) &= (1, -1), \end{aligned}$$

comprobando que en este caso, el problema de Monge tiene más de una solución.

El problema de Kantorovich

Como se pudo apreciar en los Ejemplos 1.2.3 y 1.2.4, el problema de Monge no siempre tiene solución, y en caso de tenerla, puede que esta no sea única. Motivado por esto, en 1942 Kantorovich [3] propuso una formulación relajada del problema de Monge.

La idea principal de Kantorovich es el de relajar la naturaleza determinista del mapa de transporte, digamos, del hecho de que la masa de un punto x sea transportada a un único punto $T(x)$. Kantorovich, en cambio, propone que la masa de un punto x puede ser potencialmente transportada a múltiples destinos.

Para representar formalmente esta idea, consideremos una medida de probabilidad $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$. En este caso, la cantidad $\pi(A \times B)$ correspondería a la cantidad de arena transportada desde el conjunto $A \subseteq \mathcal{X}$ a la región del pozo representado por el conjunto $B \subseteq \mathcal{Y}$. La masa total enviada desde A sería $\pi(A \times \mathcal{Y})$ y la masa total enviada a B sería $\pi(\mathcal{X} \times B)$. En este contexto, π estaría preservando la masa total si, y sólo si se cumple que

$$\begin{aligned}\pi(A \times \mathcal{Y}) &= \mu(A), \quad \forall A \subset \mathcal{X} \text{ medible}; \\ \pi(\mathcal{X} \times B) &= \nu(B), \quad \forall B \subset \mathcal{Y} \text{ medible}.\end{aligned}$$

Las medidas π que cumplen esta condición se les llama *coupling*, las cuales se pueden definir más formalmente de la siguiente manera:

Definición 1.2.5 (Coupling). Sean (\mathcal{X}, μ) y (\mathcal{Y}, ν) dos espacios de probabilidad. Un *coupling* entre μ y ν es una medida de probabilidad $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ tal que sus proyecciones marginales sean μ y ν , es decir, que cumpla que

$$\pi(A \times \mathcal{Y}) = \mu(A), \quad \pi(\mathcal{X} \times B) = \nu(B), \quad \forall A \subseteq \mathcal{X}, B \subseteq \mathcal{Y} \text{ medibles.} \quad (1.9)$$

Al conjunto de couplings entre μ y ν se le denotará por $\text{Cpl}(\mu, \nu)$. Usualmente se les llama a μ y ν como la primera y segunda *distribución marginal*, o simplemente *marginales* de π .

Una primera observación, es que el conjunto de couplings es no vacío: basta tomar $\pi = \mu \otimes \nu$, es decir, el producto de las medidas μ y ν . Sin embargo, este coupling no es muy interesante, dado que vagamente existe un intercambio de información entre μ y ν . Otro caso extremo es cuando hay un intercambio de información total entre μ y ν . Este caso correspondería a que existe una función T tal que si $(X, Y) \sim \pi$, entonces $Y = T(X)$, donde esta función T funciona de intermediaria entre las variables aleatoria X y Y . En este caso, se cumple además que $\pi = (\text{id}, T)_\# \mu$, y se dice que el coupling es *determinista*.

Ahora que se ha definido el concepto de coupling, se puede asociar el costo total de un coupling $\pi \in \text{Cpl}(\mu, \nu)$ por medio de:

$$C(\pi) = \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) \, d\pi(x, y). \quad (1.10)$$

Y por tanto, se puede definir el problema de transporte óptimo de Kantorovich de la siguiente manera:

Definición 1.2.6 (Problema de Kantorovich, [3]). Dadas dos medidas $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ y $\nu \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ y una función de coste $c : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$, se define el *problema de transporte óptimo de Kantorovich* como el problema de encontrar un coupling $\pi \in \text{Cpl}(\mu, \nu)$ que minimice el costo total de transporte, es decir, que minimice la siguiente expresión:

$$\inf_{\pi \in \text{Cpl}(\mu, \nu)} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y). \quad (1.11)$$

Al conjunto de couplings que resuelven este problema se le llama *planes de transporte o couplings óptimos*, y dado un plan de transporte π entre μ y ν , se denotará por $\pi_{\mu \rightarrow \nu}$.

Ejemplos de couplings óptimos se pueden apreciar en la Figura 1.3.

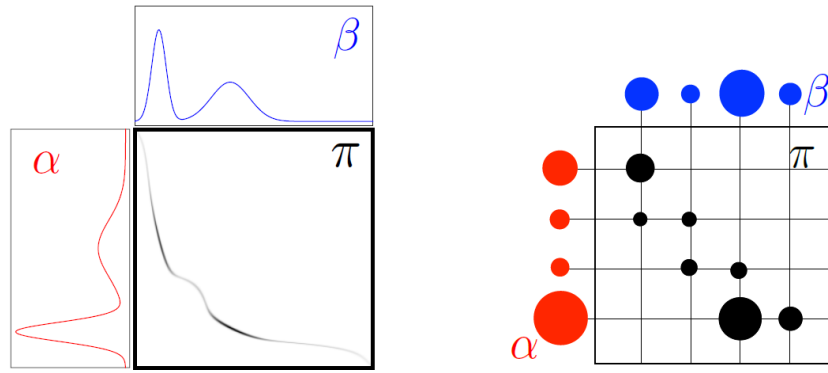


Figura 1.3: Izquierda: coupling óptimo entre dos medidas 1-D continuas con densidad. El coupling está localizado a lo largo del grafo del mapa de transporte óptimo $(x, T(x))$. Derecha: coupling óptimo entre dos medidas discretas. El radio del disco negro es proporcional a la masa transportada en esa coordenada. Imagen obtenida de [6].

En diferencia con el problema de Monge, el problema de Kantorovich siempre tiene solución, si es que $(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ son espacios compactos y c es continuo. En efecto, $\text{Cpl}(\mu, \nu)$ es compacto para la topología débil de las medidas, $\pi \mapsto \int c d\pi$ es una función continua para esta topología, y la restricción $\pi \in \text{Cpl}(\mu, \nu)$ es no vacía. Sigue que existe un coupling óptimo $\pi_{\mu \rightarrow \nu}$ que resuelve (1.11). Continuando con los ejemplos 1.2.3 y 1.2.4, podemos encontrar el coupling óptimo para estos problemas:

Ejemplo 1.2.7. Sean los espacios \mathcal{X} y \mathcal{Y} y las medidas μ y ν como en el Ejemplo 1.2.3. En este caso, el coupling óptimo entre μ y ν corresponde a:

$$\pi_{\mu \rightarrow \nu} \{(-1, 0)\} = \frac{1}{2} \quad \pi_{\mu \rightarrow \nu} \{(1, 0)\} = \frac{1}{2}.$$

Del mismo modo, el coupling óptimo entre ν y μ corresponde a:

$$\pi_{\nu \rightarrow \mu} \{(0, -1)\} = \frac{1}{2} \quad \pi_{\nu \rightarrow \mu} \{(0, 1)\} = \frac{1}{2}.$$

Ejemplo 1.2.8. Del mismo modo, Sean los espacios \mathcal{X} y \mathcal{Y} y las medidas μ y ν como en el Ejemplo 1.2.4. En este caso, el coupling óptimo entre μ y ν corresponde a:

$$\begin{aligned}\pi_{\mu \rightarrow \nu} \{((1, 1), (-1, 1))\} &= \frac{1}{4} & \pi_{\mu \rightarrow \nu} \{((1, 1), (1, -1))\} &= \frac{1}{4} \\ \pi_{\mu \rightarrow \nu} \{((-1, -1), (-1, 1))\} &= \frac{1}{4} & \pi_{\mu \rightarrow \nu} \{((-1, -1), (1, -1))\} &= \frac{1}{4}.\end{aligned}$$

Francisco: Tenía pensado en poner el teorema de Brenier (teo 2.1 de [6]), pág 27 para explicar la equivalencia Kantorovich-Monge.

1.3. La Distancia y el Espacio de Wasserstein

Francisco

Incluir subsections para la distancia, espacio, y convergencia débil?

En esta sección se demostrará que, al evaluar la expresión (1.11) para una función de coste con distancia, se obtiene una distancia entre medidas de probabilidad. Revisaremos algunas propiedades de esta distancia, para concluir que esta distancia metriza la convergencia débil entre medidas de probabilidad.

Definición 1.3.1 (La distancia de Wasserstein). Sea (\mathcal{X}, d) un espacio Polaco y sea $p \geq 1$. Para dos medidas μ, ν sobre \mathcal{X} , la distancia de Wasserstein de orden p entre μ y ν es definida por medio de la fórmula

$$W_p(\mu, \nu) \stackrel{\text{def}}{=} \left(\inf_{\gamma \in \text{Cpl}(\mu, \nu)} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{X}} d(x, y)^p d\gamma(x, y) \right)^{\frac{1}{p}}. \quad (1.12)$$

Ejemplo 1.3.2. $W_1(\delta_x, \delta_y) = d(x, y)$. Notemos que en este ejemplo, se puede interpretar que la distancia de Wasserstein metriza el “esfuerzo” de llevar la masa del punto x al punto y .

Notemos que, en estricto rigor, W_p no es una distancia en sí, dado que puede tomar valores de $+\infty$, sin embargo, se puede demostrar que W_p satisface los axiomas de ser una distancia. No se demostrará este hecho, pero se puede encontrar una demostración en [7], pág 94.

Por tanto, resulta natural definir el espacio en el que la distancia de Wasserstein tome valores finitos.

Definición 1.3.3 (El espacio de Wasserstein). Con los mismos supuestos que en la Definición 1.3.1, se define el espacio de Wasserstein de orden p por medio de

$$\mathcal{W}_p(\mathcal{X}) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X}) : \int_{\mathcal{X}} d(x, x_0)^p d\mu(x) < \infty \right\}, \quad (1.13)$$

donde $x_0 \in \mathcal{X}$ es un punto fijo arbitrario. De esta forma, W_p define una distancia (finita) sobre $\mathcal{W}_p(\mathcal{X})$.

En palabras simples, el espacio de Wasserstein de orden p es el conjunto de medidas de probabilidad en \mathcal{X} cuyo momento de orden p es finito. Lo interesante del espacio de Wasserstein, es que su respectiva distancia lo metriza, como lo dice el siguiente teorema:

Teorema 1.3.4. Si (\mathcal{X}, d) es un espacio Polaco, entonces el espacio de Wasserstein $\mathcal{W}_p(\mathcal{X})$, metrizado por la distancia de Wasserstein W_p , es también un espacio Polaco.

DEMOSTRACIÓN. Revisar la demostración del Teorema 6.18 en [7, p. 105] □

A partir de ahora, se asumirá que el espacio $\mathcal{W}_p(\mathcal{X})$ siempre estará equipado con su respectiva distancia W_p .

Observación 1.3.5. A través de la desigualdad de Hölder, se puede demostrar que para $p \leq q$, se tiene que $W_p(\mu, \nu) \leq W_q(\mu, \nu)$, para toda $\mu, \nu \in \mathcal{W}_p(\mathcal{X})$. Y por tanto, las topologías inducidas por las distancias de Wasserstein se van encajonando.

En particular, la distancia de Wasserstein de orden 1, es la más débil de todas. Como norma general, la distancia W_1 es la más flexible y fácil de acotar, mientras que la distancia W_2 posee mejores propiedades geométricas, pero es más difícil de trabajar.

Vista la distancia y el espacio de Wasserstein, se presentará una caracterización de convergencia en este espacio. Para ello, se definirá la convergencia débil entre medidas de probabilidad.

Definición 1.3.6 (Convergencia Débil). Sea (\mathcal{X}, d) un espacio Polaco y sea $p \geq 1$. Se dice que una sucesión de medidas de probabilidad $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{W}_p(\mathcal{X})$ converge débilmente a $\mu \in \mathcal{W}_p(\mathcal{X})$ si

$$\forall \varphi \in \mathcal{C}_b(\mathcal{X}), \quad \int_{\mathcal{X}} \varphi(x) d\mu_n(x) \rightarrow \int_{\mathcal{X}} \varphi(x) d\mu(x). \quad (1.14)$$

y lo denotaremos por $\mu_n \Rightarrow \mu$.

Nota 1.3.7. Intuitivamente, que una sucesión de medidas de probabilidad converjan débilmente a una medida μ significa que es la forma “más fácil” que tiene la sucesión de converger a μ .

Teorema 1.3.8 (La Distancia de Wasserstein Metriza la Convergencia Débil). Sea (\mathcal{X}, d) un espacio Polaco y sea $p \geq 1$. Entonces, la distancia de Wasserstein W_p metriza la convergencia débil en $\mathcal{W}_p(\mathcal{X})$.

Observación 1.3.9. En otras palabras, si $(\mu_n)_{n \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de medidas de probabilidad en $\mathcal{W}_p(\mathcal{X})$ y $\mu \in \mathcal{W}_p(\mathcal{X})$ otra medida, entonces $\mu_n \Rightarrow \mu$ si y sólo si $W_p(\mu_n, \mu) \rightarrow 0$.

Ejemplo 1.3.10. Consideremos las siguientes distancias y divergencias entre medidas de probabilidad:

$$\begin{aligned} \text{TV}(\mu, \nu) &\stackrel{\text{def}}{=} \sup_{A \subseteq \mathcal{X}} |\mu(A) - \nu(A)|, \\ \text{KL}(\mu \mid \nu) &\stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{X}} \log \left(\frac{d\mu}{d\nu} \right) d\mu(x), \\ \text{JS}(\mu, \nu) &\stackrel{\text{def}}{=} \text{KL} \left(\mu \mid \frac{\mu + \nu}{2} \right) + \text{KL} \left(\nu \mid \frac{\mu + \nu}{2} \right), \end{aligned}$$

donde la primera es la distancia total variación, la segunda es la divergencia de Kullback-Leibler, y la tercera es la divergencia de Jensen-Shannon.

Si consideramos δ_θ y δ_0 medidas de Dirac centradas en θ y 0 respectivamente, entonces se puede demostrar que

$$\begin{aligned} W_1(\delta_\theta, \delta_0) &= |\theta| & \text{TV}(\delta_\theta, \delta_0) &= \begin{cases} 1 & \text{si } \theta \neq 0 \\ 0 & \text{si } \theta = 0 \end{cases} \\ \text{KL}(\delta_\theta \mid \delta_0) &= \begin{cases} +\infty & \text{si } \theta \neq 0 \\ 0 & \text{si } \theta = 0 \end{cases} & \text{JS}(\delta_\theta, \delta_0) &= \begin{cases} \log(2) & \text{si } \theta \neq 0 \\ 0 & \text{si } \theta = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Entonces, si tomamos $\theta = \frac{1}{n}$ y dejamos que $n \rightarrow \infty$, se tiene que $W_1(\delta_\theta, \delta_0) \rightarrow 0$, pero el resto de distancias y divergencias no convergen a 0. Por tanto, se puede notar que la distancia de Wasserstein es la única que es capaz de distinguir entre medidas de probabilidad que no tienen soporte en el mismo punto, gracias a que metriza la convergencia débil.

1.4. El Baricentro de Wasserstein Bayesiano

La Media de Fréchet

En esta sección se revisará el concepto de media de Fréchet, el cual es una generalización de la noción de promedio para espacios métricos. Este concepto será clave para definir el baricentro de Wasserstein.

Definición 1.4.1 (Funcional y Media de Fréchet). Sea (\mathcal{X}, d) un espacio Polaco. Sean x_1, \dots, x_n puntos en \mathcal{X} y sean $w_1, \dots, w_n \in \mathbb{R}$ pesos asociados a los puntos. Para cada $p \in \mathcal{X}$, se define el *funcional de Fréchet* por

$$\Psi(p) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^n w_i d(p, x_i)^2. \quad (1.15)$$

Y, en caso de que exista un punto $m \in \mathcal{X}$ que minimice el funcional Ψ , entonces este se definirá como la *media de Fréchet* de los puntos x_1, \dots, x_n . Es decir, es aquel punto tal que minimiza el siguiente problema:

$$m \stackrel{\text{def}}{=} \arg \min_{p \in \mathcal{X}} \sum_{i=1}^n w_i d(p, x_i)^2. \quad (1.16)$$

Ejemplo 1.4.2. Tomemos $x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}^2$ tres puntos en el plano, formando un triángulo. Si se define el promedio (o el *baricentro*, en el contexto de un triángulo) de estos puntos por $\bar{x} = \frac{1}{3}(x_1 + x_2 + x_3)$, entonces se puede comprobar fácilmente que este es el único que minimiza el funcional de Fréchet:

$$F(p) = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \|p - x_i\|^2. \quad (1.17)$$

Dado que este funcional se puede descomponer de la siguiente manera:

$$F(p) = F(\bar{x}) + \|p - \bar{x}\|^2, \quad (1.18)$$

se puede ver que la media de Fréchet generaliza la noción de promedio.

Observación 1.4.3. La razón por la que resulta interesante estudiar este concepto, es que sólo utiliza nociones métricas, y se desliga de la noción vectorial. Como se vió en el Ejemplo 1.4.2, el promedio utilizó nociones vectoriales (suma, ponderación) mientras que la media de Fréchet utilizó nociones métricas, resultando en el mismo promedio.

Sin embargo, el hecho de que se pueda cambiar la distancia, hace que el baricentro cambie, y dependa de ésta.

El Baricentro de Wasserstein

Como se vió en la sección anterior, la media de Fréchet permite definir una noción de promedio, en espacios métricos. El Teorema 1.3.4 nos dice que $(\mathcal{W}_p(\mathcal{X}), W_p)$ es un espacio métrico, y por tanto, se puede definir su respectivo “promedio”:

Definición 1.4.4. Sean $\mu_1, \dots, \mu_n \in \mathcal{W}_p(\mathcal{X})$ y sean $w = (w_1, \dots, w_n) \in \Sigma_n$ sus pesos asociados. El *baricentro de Wasserstein* se define por medio de

$$\bar{\mu} \stackrel{\text{def}}{=} \arg \inf_{\nu \in \mathcal{W}_p(\mathcal{X})} \sum_{i=0}^n w_i W_p(\nu, \mu_i)^p \quad (1.19)$$

Francisco: Se podría poner algún ejemplo con una imagen.

Es posible generalizar aún más la noción de baricentro de Wasserstein a una colección infinita de medidas. Esto se puede hacer considerando una medida $\Gamma \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\mathcal{X}))$, que cumplirá el rol de los pesos w_1, \dots, w_n en la definición anterior. Esto se puede formalizar en la siguiente definición:

Definición 1.4.5. Sea $\Gamma \in \mathcal{P}(\mathcal{P}(\mathcal{X}))$ una medida. El baricentro de Wasserstein se puede (re)-definir como aquel que minimice el siguiente problema:

$$\bar{\mu} \stackrel{\text{def}}{=} \arg \inf_{\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})} \int_{\mathcal{P}(\mathcal{X})} W_p(\mu, \nu)^p d\Gamma(\nu) \quad (1.20)$$

Francisco: Mencionar las geodésicas en el espacio de Wasserstein

Francisco: Baricentro de Wasserstein Bayesiano

1.5. Baricentro

Francisco: Se podría agregar una sección de baricentro de Wasserstein Bayesiano?

Bibliografía

- [1] Julio Backhoff-Veraguas, Joaquin Fontbona, Gonzalo Rios, and Felipe Tobar. Bayesian learning with wasserstein barycenters, 2018.
- [2] Marco Cuturi and Justin Solomon. A primer on optimal transport. In *Tutorial of 31st Conference on Neural Information Processing Systems*, 2017.
- [3] Leonid V Kantorovich. On the translocation of masses. In *Dokl. Akad. Nauk. USSR (NS)*, volume 37, pages 199–201, 1942.
- [4] Gaspard Monge. Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais. *Mem. Math. Phys. Acad. Royale Sci.*, pages 666–704, 1781.
- [5] Victor M Panaretos and Yoav Zemel. *An invitation to statistics in Wasserstein space*. Springer Nature, 2020.
- [6] Gabriel Peyré and Marco Cuturi. Computational optimal transport. *Foundations and Trends in Machine Learning*, 11(5-6):355–607, 2019.
- [7] Cédric Villani. *Optimal Transport: Old and New*, volume 338. Springer Berlin Heidelberg, 2009.

Apéndice A

Anexo

Quisque facilisis auctor sapien. Pellentesque gravida hendrerit lectus. Mauris rutrum sodales sapien. Fusce hendrerit sem vel lorem. Integer pellentesque massa vel augue. Integer elit tortor, feugiat quis, sagittis et, ornare non, lacus. Vestibulum posuere pellentesque eros. Quisque venenatis ipsum dictum nulla. Aliquam quis quam non metus eleifend interdum. Nam eget sapien ac mauris malesuada adipiscing. Etiam eleifend neque sed quam. Nulla facilisi. Proin a ligula. Sed id dui eu nibh egestas tincidunt. Suspendisse arcu.

Maecenas dui. Aliquam volutpat auctor lorem. Cras placerat est vitae lectus. Curabitur massa lectus, rutrum euismod, dignissim ut, dapibus a, odio. Ut eros erat, vulputate ut, interdum non, porta eu, erat. Cras fermentum, felis in porta congue, velit leo facilisis odio, vitae consectetur lorem quam vitae orci. Sed ultrices, pede eu placerat auctor, ante ligula rutrum tellus, vel posuere nibh lacus nec nibh. Maecenas laoreet dolor at enim. Donec molestie dolor nec metus. Vestibulum libero. Sed quis erat. Sed tristique. Duis pede leo, fermentum quis, consectetur eget, vulputate sit amet, erat.

Donec vitae velit. Suspendisse porta fermentum mauris. Ut vel nunc non mauris pharetra varius. Duis consequat libero quis urna. Maecenas at ante. Vivamus varius, wisi sed egestas tristique, odio wisi luctus nulla, lobortis dictum dolor ligula in lacus. Vivamus aliquam, urna sed interdum porttitor, metus orci interdum odio, sit amet euismod lectus felis et leo. Praesent ac wisi. Nam suscipit vestibulum sem. Praesent eu ipsum vitae pede cursus venenatis. Duis sed odio. Vestibulum eleifend. Nulla ut massa. Proin rutrum mattis sapien. Curabitur dictum gravida ante.

Phasellus placerat vulputate quam. Maecenas at tellus. Pellentesque neque diam, dignissim ac, venenatis vitae, consequat ut, lacus. Nam nibh. Vestibulum fringilla arcu mollis arcu. Sed et turpis. Donec sem tellus, volutpat et, varius eu, commodo sed, lectus. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Quisque enim arcu, suscipit nec, tempus at, imperdiet vel, metus. Morbi volutpat purus at erat. Donec dignissim, sem id semper tempus, nibh massa eleifend turpis, sed pellentesque wisi purus sed libero. Nullam lobortis tortor vel risus. Pellentesque consequat nulla eu tellus. Donec velit. Aliquam fermentum, wisi ac rhoncus iaculis, tellus nunc malesuada orci, quis volutpat dui magna id mi. Nunc vel ante. Duis vitae lacus. Cras nec ipsum.

Morbi nunc. Aliquam consectetur varius nulla. Phasellus eros. Cras dapibus porttitor risus. Maecenas ultrices mi sed diam. Praesent gravida velit at elit vehicula porttitor. Phasellus nisl mi, sagittis ac, pulvinar id, gravida sit amet, erat. Vestibulum est. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Curabitur id sem elementum leo rutrum hendrerit. Ut at mi. Donec tincidunt faucibus massa. Sed turpis quam, sollicitudin a, hendrerit eget, pretium ut, nisl. Duis hendrerit ligula. Nunc pulvinar congue urna.

Nunc velit. Nullam elit sapien, eleifend eu, commodo nec, semper sit amet, elit. Nulla lectus risus, condimentum ut, laoreet eget, viverra nec, odio. Proin lobortis. Curabitur dictum arcu vel wisi. Cras id nulla venenatis tortor congue ultrices. Pellentesque eget pede. Sed eleifend sagittis elit. Nam sed tellus sit amet lectus ullamcorper tristique. Mauris enim sem, tristique eu, accumsan at, scelerisque vulputate, neque. Quisque lacus. Donec et ipsum sit amet elit nonummy aliquet. Sed viverra nisl at sem. Nam diam. Mauris ut dolor. Curabitur ornare tortor cursus velit.

Morbi tincidunt posuere arcu. Cras venenatis est vitae dolor. Vivamus scelerisque semper mi. Donec ipsum arcu, consequat scelerisque, viverra id, dictum at, metus. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut pede sem, tempus ut, porttitor bibendum, molestie eu, elit. Suspendisse potenti. Sed id lectus sit amet purus faucibus vehicula. Praesent sed sem non dui pharetra interdum. Nam viverra ultrices magna.

Aenean laoreet aliquam orci. Nunc interdum elementum urna. Quisque erat. Nullam tempor neque. Maecenas velit nibh, scelerisque a, consequat ut, viverra in, enim. Duis magna. Donec odio neque, tristique et, tincidunt eu, rhoncus ac, nunc. Mauris malesuada malesuada elit. Etiam lacus mauris, pretium vel, blandit in, ultricies id, libero. Phasellus bibendum erat ut diam. In congue imperdiet lectus.

Aenean scelerisque. Fusce pretium porttitor lorem. In hac habitasse platea dictumst. Nulla sit amet nisl at sapien egestas pretium. Nunc non tellus. Vivamus aliquet. Nam adipiscing euismod dolor. Aliquam erat volutpat. Nulla ut ipsum. Quisque tincidunt auctor augue. Nunc imperdiet ipsum eget elit. Aliquam quam leo, consectetur non, ornare sit amet, tristique quis, felis. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae; Pellentesque interdum quam sit amet mi. Pellentesque mauris dui, dictum a, adipiscing ac, fermentum sit amet, lorem.

Ut quis wisi. Praesent quis massa. Vivamus egestas risus eget lacus. Nunc tincidunt, risus quis bibendum facilisis, lorem purus rutrum neque, nec porta tortor urna quis orci. Aenean aliquet, libero semper volutpat luctus, pede erat lacinia augue, quis rutrum sem ipsum sit amet pede. Vestibulum aliquet, nibh sed iaculis sagittis, odio dolor blandit augue, eget mollis urna tellus id tellus. Aenean aliquet aliquam nunc. Nulla ultricies justo eget orci. Phasellus tristique fermentum leo. Sed massa metus, sagittis ut, semper ut, pharetra vel, erat. Aliquam quam turpis, egestas vel, elementum in, egestas sit amet, lorem. Duis convallis, wisi sit amet mollis molestie, libero mauris porta dui, vitae aliquam arcu turpis ac sem. Aliquam aliquet dapibus metus.

Vivamus commodo eros eleifend dui. Vestibulum in leo eu erat tristique mattis. Cras at elit. Cras pellentesque. Nullam id lacus sit amet libero aliquet hendrerit. Proin placerat, mi non elementum laoreet, eros elit tincidunt magna, a rhoncus sem arcu id odio. Nulla eget leo a

leo egestas facilisis. Curabitur quis velit. Phasellus aliquam, tortor nec ornare rhoncus, purus urna posuere velit, et commodo risus tellus quis tellus. Vivamus leo turpis, tempus sit amet, tristique vitae, laoreet quis, odio. Proin scelerisque bibendum ipsum. Etiam nisl. Praesent vel dolor. Pellentesque vel magna. Curabitur urna. Vivamus congue urna in velit. Etiam ullamcorper elementum dui. Praesent non urna. Sed placerat quam non mi. Pellentesque diam magna, ultricies eget, ultrices placerat, adipiscing rutrum, sem.