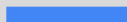


# Problèmes Inverses

## Introduction au Transport Optimal



# SOMMAIRE

## I. Notions de Transport Optimal

- A. Problématique
- B. Distance et Barycentres de Wasserstein

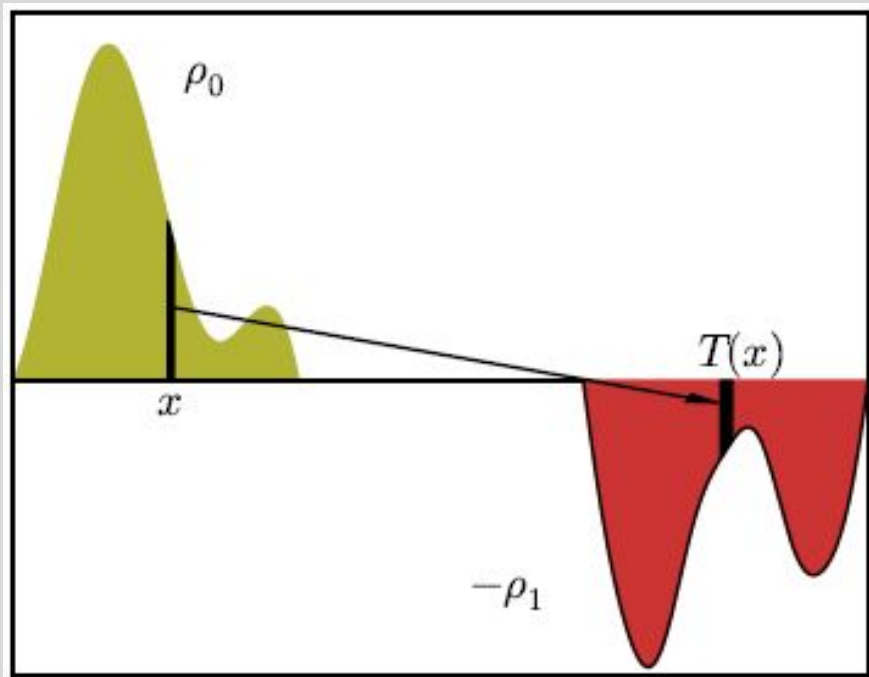
## II. Résolution et Applications

- A. Régularisation entropique
- B. Noyau des distances
- C. Application à la distance de Wasserstein
- D. Application aux barycentres de Wasserstein

# **Notions de Transport Optimal**

**Problématique**

Déplacer un objet d'un endroit à un autre de la façon la plus économe possible



$$\int_{\Omega} \rho_0(x) dx = 1$$

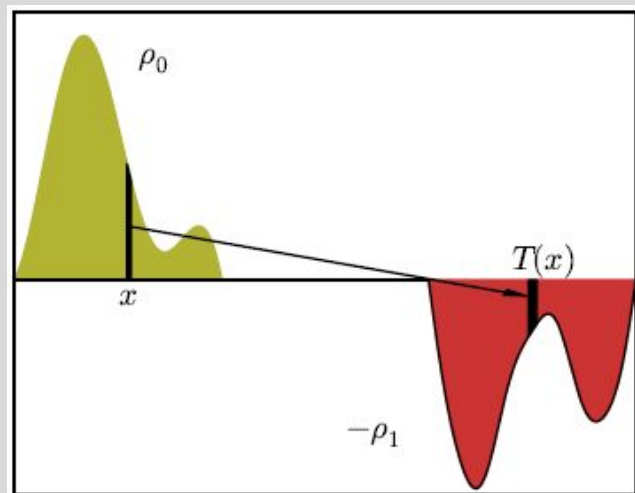
$$\int_{\Omega} \rho_1(x) dx = 1$$

# **Notions de Transport Optimal**

**Distance et Barycentres de Wasserstein**

# Formulation de Monge

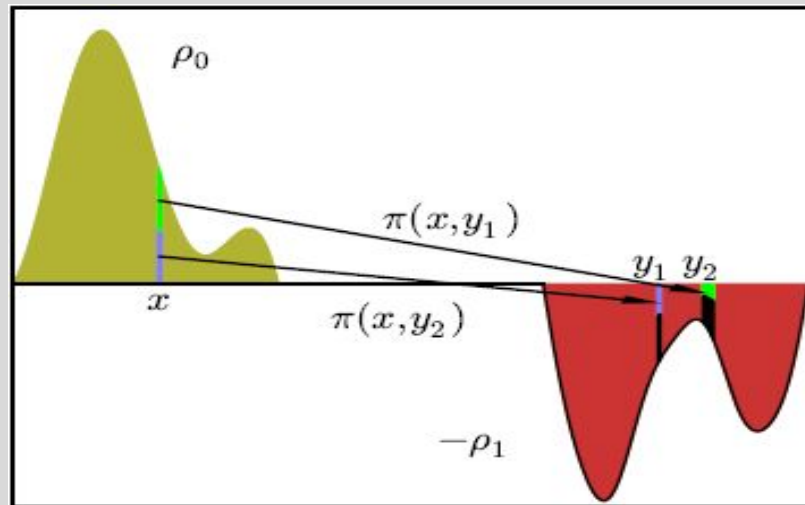
$$\begin{array}{ll} \min_T & \frac{1}{2} \int_{\Omega} |x - T(x)|^2 \rho_0(x) dx \\ \text{s.t} & T \in V \end{array}$$



$$V = \{T(x), \quad \rho_1(T(x)) | \det(\nabla T)(x) = \rho_0(x)\}$$

# Formulation de Kantorovich

La distance de Wasserstein est une métrique sur la position de l'information mais elle n'est pas sensible aux détails de l'information donc à sa forme exacte.

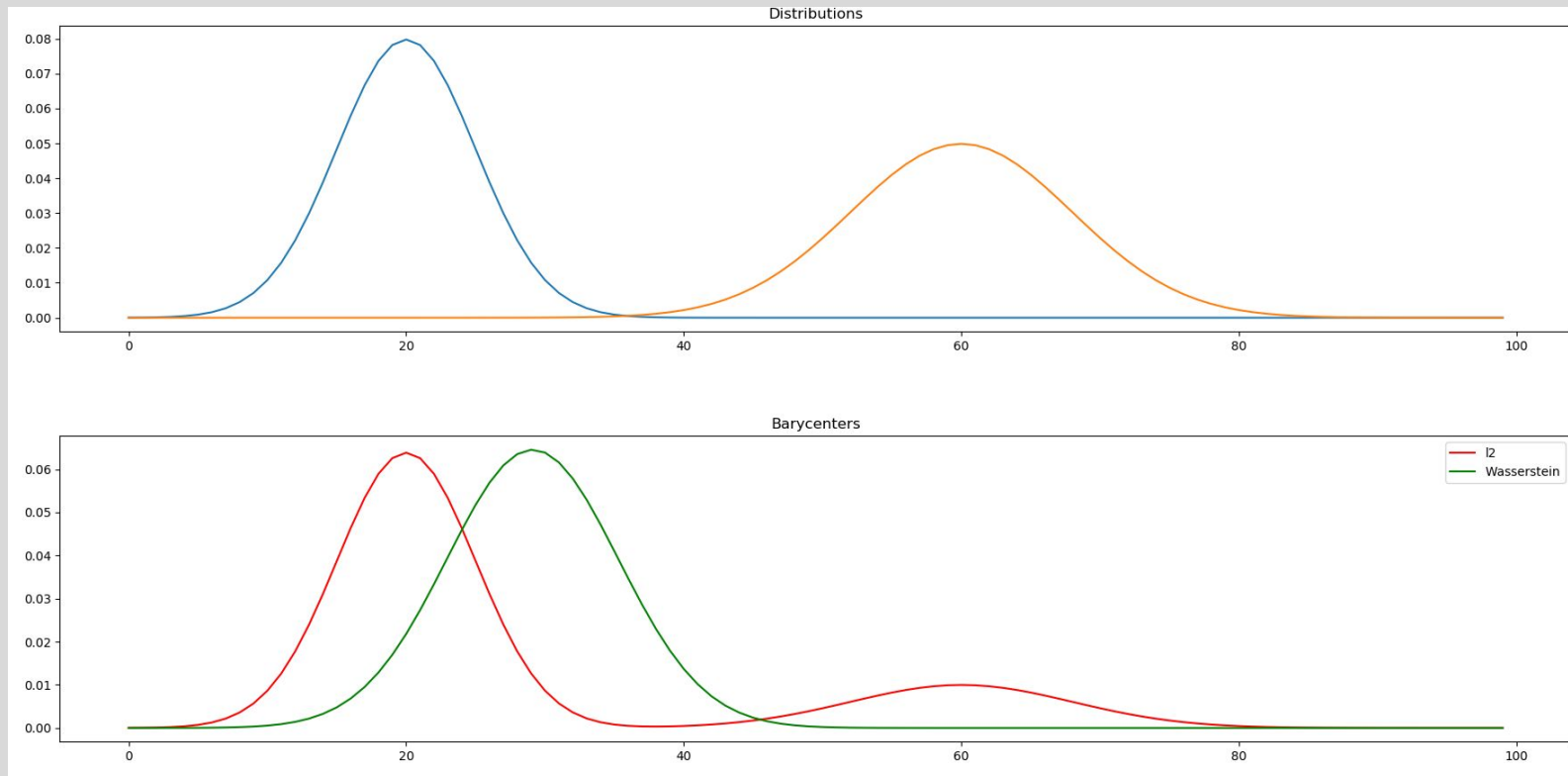


$$W_2(\rho_0, \rho_1) = \left( \inf_{\pi \in \Pi(\rho_0, \rho_1)} \int \int_{M \times M} d(x, y)^2 d\pi(x, y) \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\Pi(\rho_0, \rho_1) = \{ \pi \in P(M \times M) \text{ tel que } \pi(\cdot, M) = \rho_0 \text{ et } \pi(M, \cdot) = \rho_1 \}$$

# Barycentres de Wasserstein

$$\min_{\rho} \sum_{i=1}^k \alpha_i W_2^2(\rho, \rho_i)$$





# Résolution & Applications

Régularisation Entropique et Noyau des Distances

# Régularisation entropique

$$\min_x f(x) \longrightarrow \min_x (f(x) + \gamma g(x))$$

Petit terme

Kullback-Leibler divergence :

$$KL(\pi|\mathcal{K}) = \int \int_{M \times M} \pi(x, y) \left( \ln \frac{\pi(x, y)}{\mathcal{K}} - 1 \right) dx dy$$

Entropie d'un plan de transport :

$$H(\pi) = - \int \int_{M \times M} \pi(x, y) \ln \pi(x, y) dx dy$$

# Noyau des distances

*Problème strictement convexe =  
Existence et unicité d'un minimiseur*

$$W_{2,\gamma}^2(\rho_0, \rho_1) = \inf_{\pi \in \Pi} \left( \int \int_{M \times M} d(x, y)^2 \pi(x, y) dx dy - \gamma H(\pi) \right)$$

opérations algébriques

$$\mathcal{K}_\gamma(x, y) = \exp \frac{-d(x, y)^2}{\gamma}$$

$$\longrightarrow d(x, y) = |x - y|$$

$$W_{2,\gamma}^2(\rho_0, \rho_1) = \gamma \left( 1 + \min_{\pi \in \Pi} KL(\pi | \mathcal{K}_\gamma) \right)$$

# Problèmes

- Besoin de calculer la matrice des distances
  - Sur domaine cartésien 1D avec peu de points → OK
  - Sur un domaine géométrique complexe → PAS OK
- Une idée serait d'utiliser la résolution de l'équation de la chaleur sur un court intervalle de temps
- On a quelques problèmes de diffusion avec notre noyau

# Résolution & Applications

Application distance de Wasserstein

# Discrétisation et algorithme de Sinkhorn

$$\left\{ \begin{array}{l} W_{2,H_t}^2(\rho_0, \rho_1) = \gamma \left( 1 + \min_{\pi \in \Pi} KL(\pi | H_t) \right) \\ \pi a = \mu_0 \\ \pi^T a = \mu_1 \end{array} \right.$$

```
function CONVOLUTIONAL-WASSERSTEIN( $\mu_0, \mu_1; \mathbf{H}_t, \mathbf{a}$ )  
    // Sinkhorn iterations  
     $\mathbf{v}, \mathbf{w} \leftarrow \mathbf{1}$   
    for  $i = 1, 2, 3, \dots$   
         $\mathbf{v} \leftarrow \mu_0 \otimes \mathbf{H}_t(\mathbf{a} \otimes \mathbf{w})$   
         $\mathbf{w} \leftarrow \mu_1 \otimes \mathbf{H}_t(\mathbf{a} \otimes \mathbf{v})$   
  
    // KL divergence  
    return  $\gamma \mathbf{a}^\top [(\mu_0 \otimes \ln \mathbf{v}) + (\mu_1 \otimes \ln \mathbf{w})]$ 
```

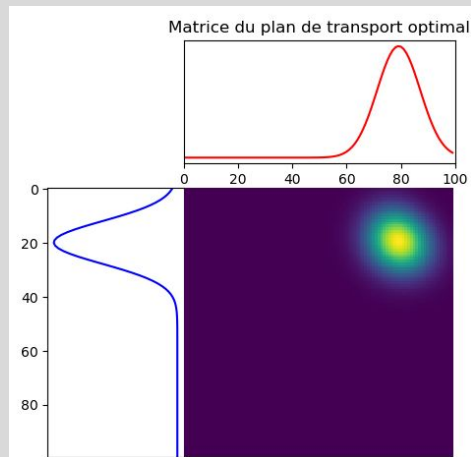
## Contraintes :

- La somme des lignes de la matrice  $\pi$  doit être égale à la première densité
- La somme des colonnes de la matrice  $\pi$  doit être égale à la seconde densité

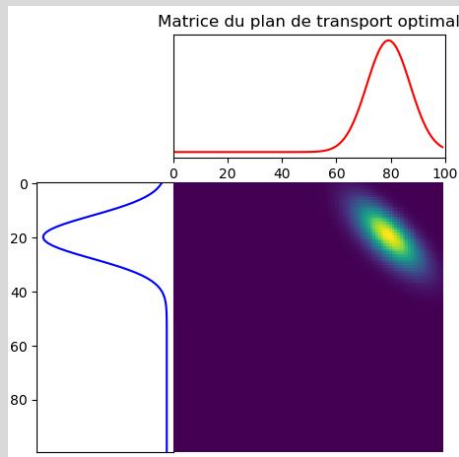
## Algorithme de Sinkhorn :

- Projeter la solution sur chaque contrainte l'une après l'autre

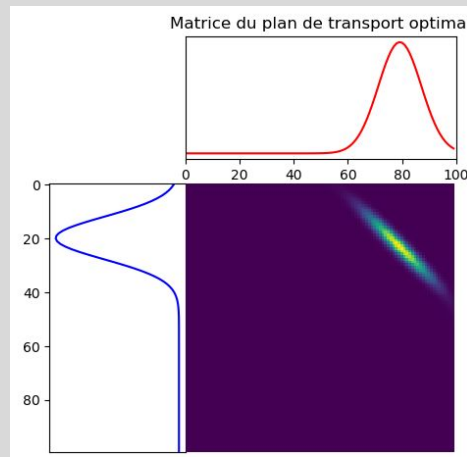
# Plans de transport optimaux



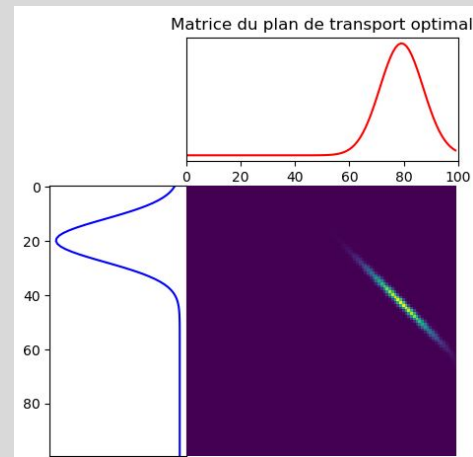
$$\gamma = 0.1$$



$$\gamma = 0.01$$



$$\gamma = 0.001$$



$$\gamma = 0.0001$$

# Barycentres de Wasserstein

$$\min_{\rho} \sum_{i=1}^k \alpha_i W_2^2(\rho, \rho_i)$$



$$\begin{aligned} \min_{\pi_i} \quad & \sum_{i=1}^k \alpha_i KL(\pi_i | H_t) \\ \text{s.t.} \quad & \pi_i^T a = \rho_i \quad \forall i \in \{1, \dots, k\} \\ & \pi_i a = \pi_1 a \quad \forall i \in \{1, \dots, k\} \end{aligned}$$

```
function WASSERSTEIN-BARYCENTER( $\{\mu_i\}, \{\alpha_i\}; \mathbf{H}_t, \mathbf{a}$ )
```

```
  // Initialization
```

```
   $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k \leftarrow \mathbf{1}$ 
```

```
   $\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_k \leftarrow \mathbf{1}$ 
```

```
  // Iterate over  $\mathcal{C}_i$ 's
```

```
  for  $j = 1, 2, 3, \dots$ 
```

```
     $\mu \leftarrow \mathbf{1}$ 
```

```
    for  $i = 1, \dots, k$ 
```

```
      // Project onto  $\mathcal{C}_1$ 
```

```
       $\mathbf{w}_i \leftarrow \mu_i \odot \mathbf{H}_t(\mathbf{a} \otimes \mathbf{v}_i)$ 
```

```
       $\mathbf{d}_i \leftarrow \mathbf{v}_i \otimes \mathbf{H}_t(\mathbf{a} \otimes \mathbf{w}_i)$ 
```

```
       $\mu \leftarrow \mu \otimes \mathbf{d}_i^{\alpha_i}$ 
```

```
  // Optional
```

```
   $\mu \leftarrow \text{ENTROPIC-SHARPENING}(\mu, H_0; \mathbf{a})$ 
```

```
  // Project onto  $\mathcal{C}_2$ 
```

```
  for  $i = 1, \dots, k$ 
```

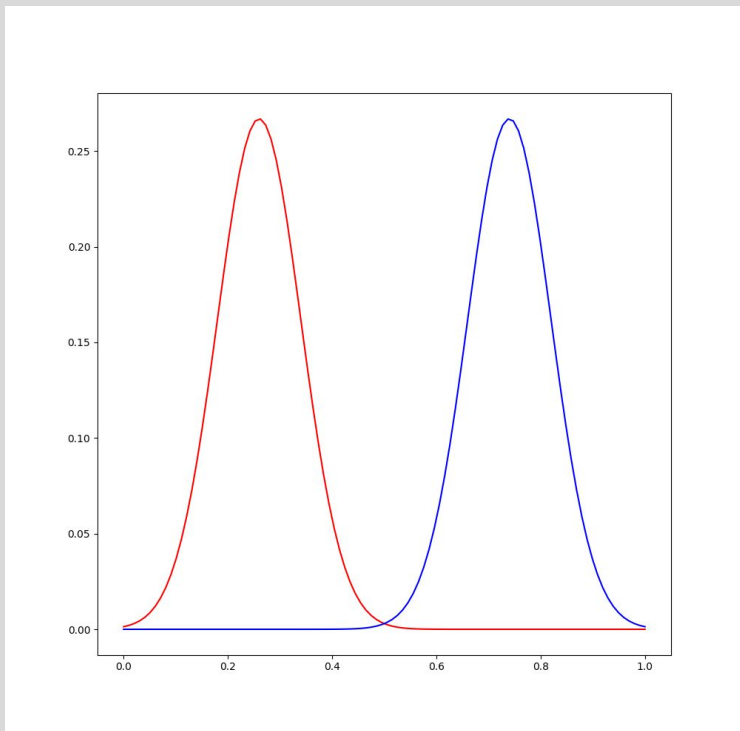
```
     $\mathbf{v}_i \leftarrow \mathbf{v}_i \otimes \mu \odot \mathbf{d}_i$ 
```

```
  return  $\mu$ 
```

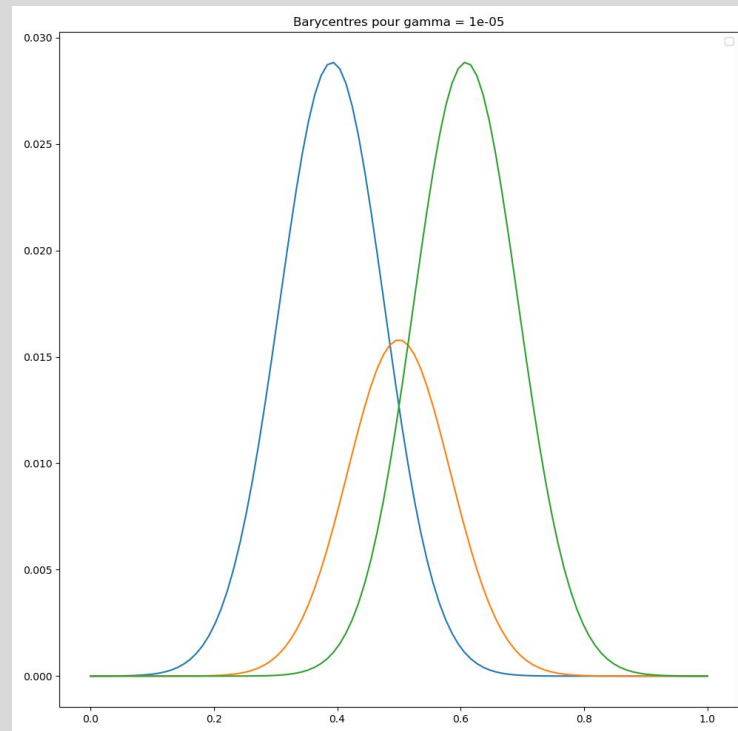
- La première contrainte impose que la  $i$ -ème densité soit la loi marginale du  $i$ -ème  $\pi$  dans une direction.
- La seconde contrainte impose qu'une seule densité soit la loi marginale de tous les  $i$ -ème  $\pi$  dans la direction opposée.



# Résultat dimension 1



$$\omega_0 = \{0.25, 0.5, 0.75\}$$

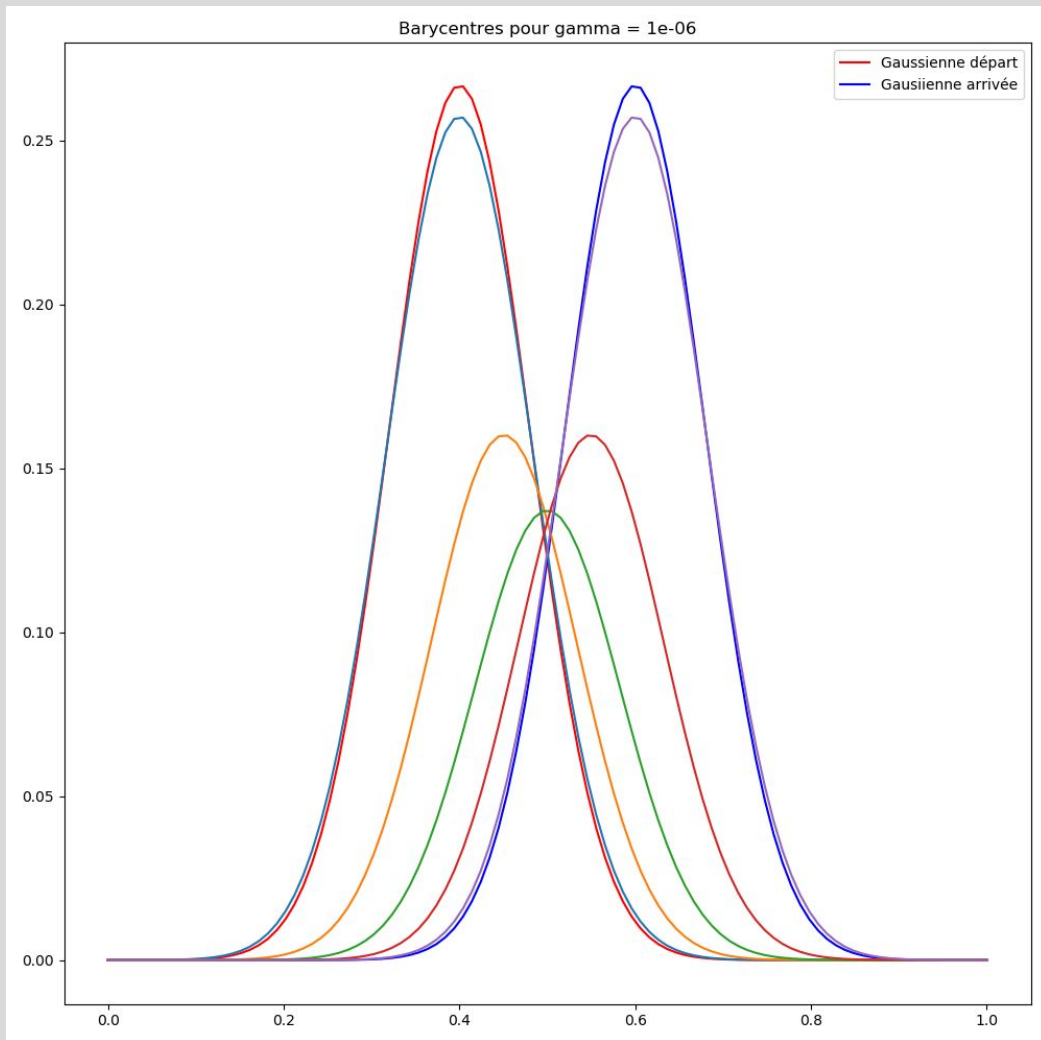


$$\omega_1 = 1 - \omega_0$$

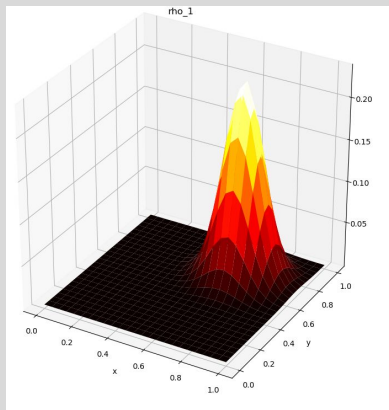
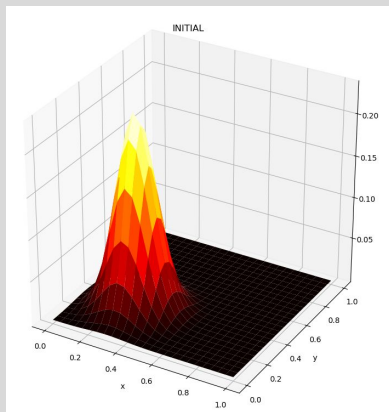
$$\omega_0 \in [0, 1]$$

$$\omega_1 = 1 - \omega_0$$

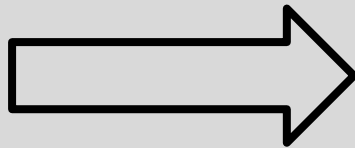
$$\gamma = 10^{-6}$$



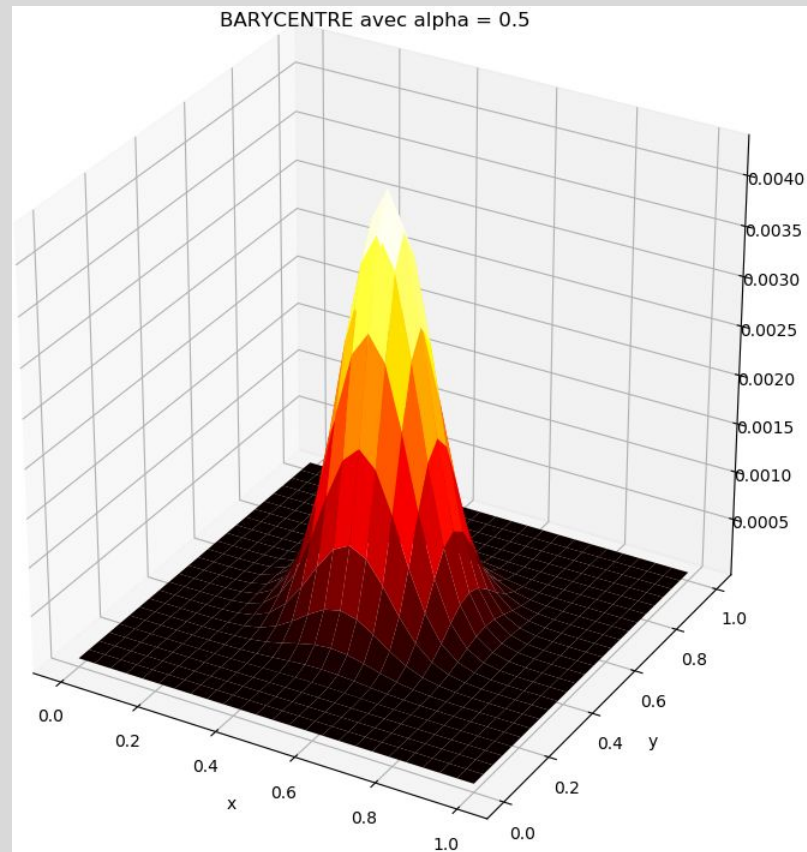
# Résultat dimension 2

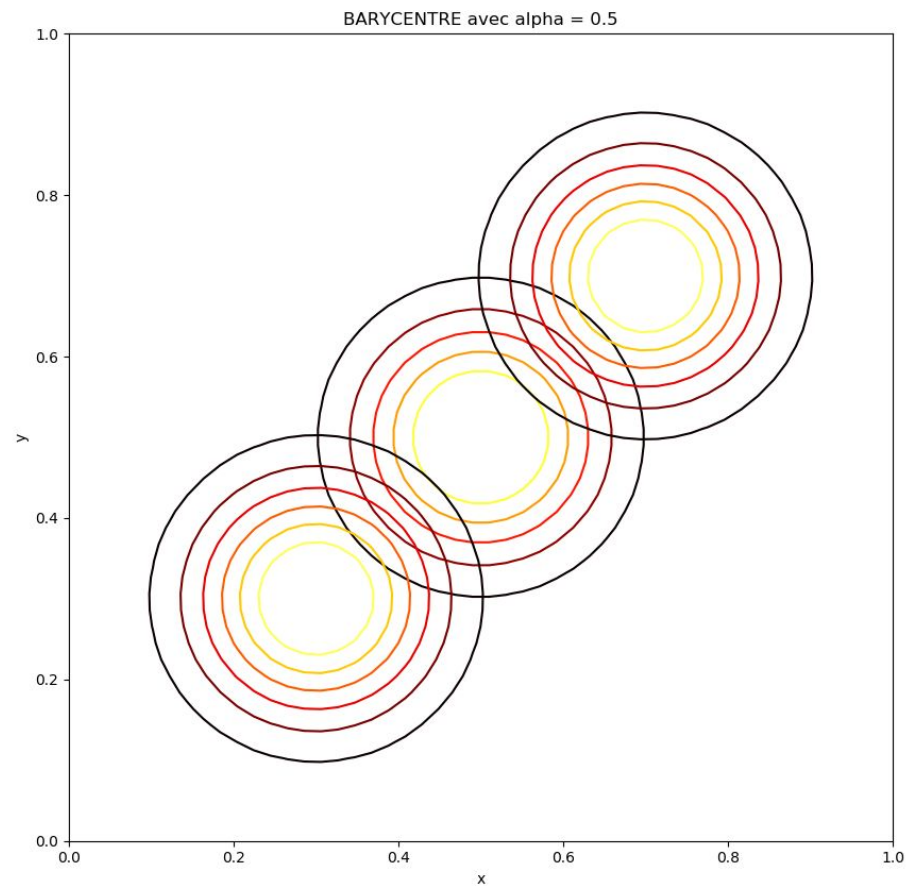


$$\gamma = 10^{-5}$$



$$\omega_0 = \omega_1 = 0.5$$





**MERCI POUR VOTRE ATTENTION**

QUESTIONS ?