

— Projet de Fin d'Études —
Théorie du Transport Optimal
Étude et Applications

Département de Génie Mathématique
Semestre 9 - 2017/2018

Auteur :
Timothée SCHMODERER

Référente :
Carole LE GUYADER
Vincent DUVAL

Table des matières

1	Introduction	3
2	Problème de Transport Optimal	4
2.1	Formulation du problème de Transport Optimal	4
2.2	Plan de Transport Optimal	5
2.3	Problème dual au plan de Transport Optimal	8
2.4	Existence du transport optimal	13
2.5	Le cas quadratique sur \mathbb{R}^n	14
2.6	Formulation de J.D. Benamou et Y. Brenier	18
2.7	Conclusion	21
3	Opérateurs proximaux	22
4	Méthode numérique	30
4.1	Grilles centrées et décalées	30
4.2	Opérateurs discrétisés	31
4.3	Problème discrétisé	32
4.4	Opérateur proximal de \mathcal{J}	33
4.5	Projection sur \mathcal{C}	34
4.6	Projection sur \mathcal{C}_s	34
5	Variations	34
6	Exemples numériques	36
6.1	Cas 1D	36
6.2	Cas 2D	36
7	Pour aller plus loin	36
	Références	37
	Annexes	38
A	Calcul des variations	38
	Table des figures	41
	Liste des Codes	41

1 Introduction

Le problème de transport optimal fut étudié dans sa forme primitive par *Gaspard Monge* dans son *Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais* de 1781 [5]. Il s'intéressait au déplacement de tas de matériaux d'un site d'extraction à un site de construction en minimisant le coût de transport (le coût de déplacement d'une unité est le produit de la charge déplacée par la distance).

La formulation moderne a été introduite par *Leonid Kantorovitch*, prix Nobel d'économie en 1975 pour sa contribution aux allocations optimales.

Nous essaierons d'être le plus exhaustif possible dans la présentation des résultats, la plupart des énoncés seront démontrés.

Rendons à Santambrogio ce qui lui appartient, la première section vient en quasi-entièreté de son livre [8], agrémenté de quelques précisions qui faciliteront la compréhension.

Le plan de rapport est le suivant, nous commencerons par présenter les notions liées au transport optimal, puis nous ferons un court aparté sur les opérateurs proximaux. Enfin,

Nous attaquerons la discrétisation et la mise en œuvre numérique. Plan :

- 1 - Théorie sur le transport optimal
- 2 - Théorie sur les opérateurs proximaux
- 3 - Numérique
 - 3.1 - Idées générales de l'implémentation
 - 3.2 - Implémentation Grosse matrice
 - 3.3 - Implémentation centrée
 - 3.3.1 - 1D
 - 3.3.2 - 2D
 - 3.4 - Implémentation staggered FFT
- 4 - Galerie du Fun

2 Problème de Transport Optimal

Dans cette section, nous nous attachons à décrire le problème de transport optimal. Nous donnerons des preuves de l'existence de solutions à ce problème. Nous finirons par donner la formulation du problème par Benamou et Brenier, que nous nous attacherons de résoudre numériquement dans la partie 4.

2.1 Formulation du problème de Transport Optimal

Intuitivement, le problème de transport optimal consiste à trouver une méthode pour déplacer un tas de matériaux d'un endroit à un autre, de façon à minimiser un coût, lié au transport de ces matériaux par exemple. C'est l'approche initiale de Monge.

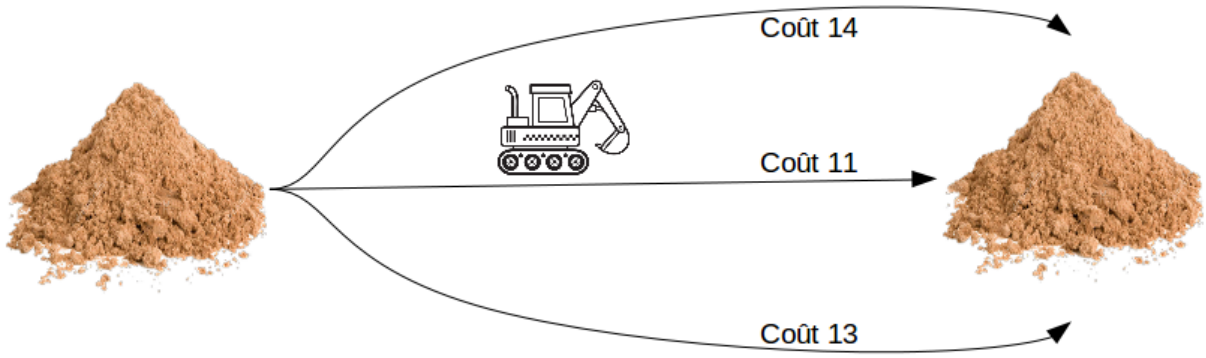


FIGURE 1 – Le transport optimal dans sa version vulgarisée

Dans des termes plus formels et modernes, les tas de sables représentent des ensembles mesurables dans des espaces métriques, le tractopelle est l'application de transport et le coût est la "distance" entre un ensemble de départ et un ensemble d'arrivée.

Définition 2.1 : *Transport*

Soient deux mesures de probabilité μ sur $(\mathcal{X}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$ et ν sur $(\mathcal{Y}, \mathcal{B}(\mathcal{Y}))$ munis de leur tribu borélienne. Un **transport** est une application $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ qui envoie la mesure μ sur la mesure ν . C'est à dire :

$$\forall B \in \mathcal{B}(\mathcal{Y}), \quad \mu(T^{-1}(B)) = \nu(B) \quad (1)$$

Cela signifie que ν est la mesure image de μ par l'application T . Nous noterons $T_{\#}\mu = \nu$, une application T vérifiant (1).

Pour présager du théorème de Benamou et Brenier, remarquons que la relation (1) traduit la conservation de la masse par l'application T . La figure 2 illustre cette relation dans le cas où les mesures possèdent des densités. Pour cela, définissons une application permettant de quantifier cette notion de coût de transport.

Bien sur, l'application de transport n'est pas unique, il nous faut une manière de sélectionner un transport qui serait "meilleur" que les autres.

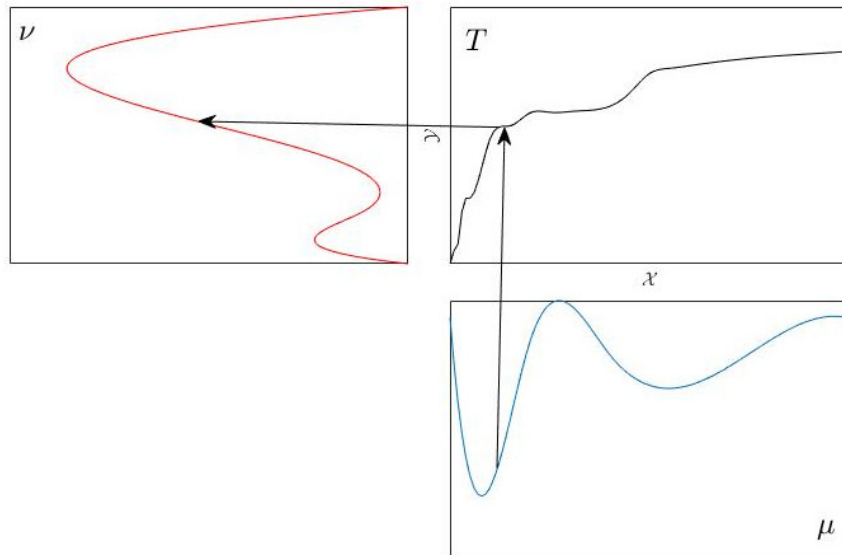


FIGURE 2 – Illustration de l'application de transport

Définition 2.2 :

Le coût est une application

$$C : \begin{cases} \mathcal{X} \times \mathcal{Y} & \longrightarrow [0, +\infty] \\ (x, y) & \longmapsto C(x, y) \end{cases}$$

Cette application représente le coût d'affecter x en y . Ces deux définitions nous amènent au problème de transport optimal :

Étant données deux mesures de probabilités μ sur \mathcal{X} , ν sur \mathcal{Y} et une application coût C , trouver une application de transport T réalisant le

$$\inf \left\{ M(T) := \int_{\mathcal{X}} C(x, T(x)) d\mu(x), \quad T_{\#}\mu = \nu \right\} \quad (\text{MP})$$

L'existence du transport optimal n'est absolument pas triviale, nous suivrons la présentation du livre de Santambrogio [8] pour démontrer l'existence d'une application de transport optimal.

2.2 Plan de Transport Optimal

Le problème (MP) est difficile à résoudre du fait de la contrainte. Oublions ce problème pour un temps, et regardons une forme généralisée donnée par Kantorovitch.

Étant données deux mesures de probabilités μ et ν et un coût C , trouver la mesure π réalisant le

$$\inf \left\{ K(\pi) := \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} C(x, y) d\pi(x, y), \quad \pi \in \Pi(\mu, \nu) \right\} \quad (\text{KP})$$

Où, $\Pi(\mu, \nu)$ est l'ensemble des plans de transports :

$$\Pi(\mu, \nu) = \left\{ \begin{array}{l} \pi \text{ une probabilité sur } \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \\ \forall A \in \mathcal{B}(\mathcal{X}), \quad \pi(A \times \mathcal{Y}) = \mu(A) \\ \forall B \in \mathcal{B}(\mathcal{Y}), \quad \pi(\mathcal{X} \times B) = \nu(B), \end{array} \right. \quad (2)$$

La valeur de $\pi(A \times B)$ décrit la quantité de matière transportée de A en B . Cette description permet des déplacements plus généraux qu'un transport classique. En effet, à partir d'un point x , les particules peuvent être transportées en plusieurs destinations. Si c'est le cas, alors cela ne peut pas être décrit au travers d'une application de transport T , car localement il n'y a pas conservation de la masse.

Remarquons que les contraintes (2) sont des contraintes de marginales sur la mesure de probabilité π , cela signifie que nous restreignons notre attention aux plans de transports qui déplacent des particules distribuées selon μ sur des particules distribuées selon ν .

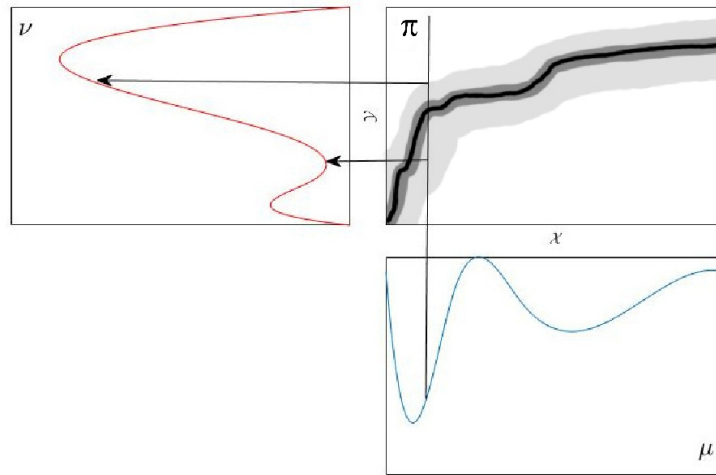


FIGURE 3 – Illustration de la notion de plan de transport

La figure 3 illustre la notion de plan de transport. Le dégradé de couleur montre que la mesure π peut envoyer un point $x \in \mathcal{X}$ sur plusieurs points de \mathcal{Y} dans différentes proportions.

Les minimiseurs de ce problème sont appelés plans de transport optimal entre μ et ν . Ce problème est bien une généralisation de (MP), puisque si $\pi = (Id, T)$ pour une certaine fonction mesurable $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, alors l'application T serait un transport optimal entre μ et ν .

Nous allons montrer l'existence de solutions pour le problème relaxé (KP) à l'aide du calcul des variations. Les outils principaux de cette méthode sont rappelés à l'annexe A.

Théorème 2.3 :

Soit \mathcal{X} et \mathcal{Y} des espaces métriques compacts. Supposons que le coût $C : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow [0, +\infty]$ soit continue. Alors le problème (KP) admet une solution.

Preuve :

Il s'agit de montrer que l'ensemble $\Pi(\mu, \nu)$ est compact et que l'application $\pi \rightarrow K(\pi)$ est continue, puis d'appliquer le théorème de Weierstrass (A.3).

Nous choisissons la notion de convergence donnée par la convergence faible des mesures de probabilités (voir (A.9) pour la dualité avec $C_b(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ ce qui ici, est la même chose que $C(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ ou $C_0(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ car \mathcal{X} et \mathcal{Y} sont compacts). Cela nous donne la continuité de K puisque $C \in C(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$.

Soit une suite $\pi_n \in \Pi(\mu, \nu)$. Ce sont des mesures de probabilités, donc de masse 1 et sont donc bornées dans le dual de $C(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$. Ainsi, la compacité faible - * dans les espaces duaux, garanti l'existence d'une sous suite π_{n_k} convergeant faiblement vers une probabilité π . Vérifions que $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$.

Fixons $\phi \in C(\mathcal{X})$, comme $\int \phi d\pi_{n_k} = \int \phi d\mu$, par passage à la limite, nous avons : $\int \phi d\pi = \int \phi d\mu$. De même nous montrons que la seconde contrainte de marginale (2) est vérifiée.

Ainsi, l'espace $\Pi(\mu, \nu)$ est compact et le théorème de Weierstrass s'applique. \square

Allons vers plus de généralités.

Proposition 2.1 :

Supposons que l'application de coût soit semi continue inférieurement et bornée inférieurement. Alors le problème (KP) admet une solution.

Preuve :

La seule différence avec le cas précédent est que K n'est plus continue mais semi continue inférieurement pour la convergence faible des mesures de probabilités. Cela vient du lemme suivant appliqué à $f = C$ et $\Omega = \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$.

Lemme :

Si $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est une fonction semi-continue inférieurement, bornée inférieurement sur un espace métrique Ω . Alors la fonctionnel $J : \mathcal{M}_+(\Omega) \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ définie sur les mesures de Radon positives par $J(\lambda) = \int f d\lambda$ est semi continue inférieurement pour la convergence faible des mesures.

Preuve :

Soit une suite (f_k) de fonctions continues, bornées convergeant vers f par valeurs croissantes. Soit $J_k(\lambda) = \int f_k d\lambda$, $J_k \rightarrow J$ par convergence monotone. Nous pouvons alors écrire $J(\lambda) = \sup_k J_k(\lambda)$. Alors J est semi-continue inférieurement comme le sup de fonctionnelles continues. \square

Et donc, le théorème de Weierstrass (A.3) s'applique. \square

Proposition 2.2 :

Supposons que \mathcal{X} et \mathcal{Y} soient des espaces métriques complets et séparables (i.e. polonais) et que le coût C est semi-continue inférieurement et bornée inférieurement. Alors le problème (KP) admet une solution.

Preuve :

Cette fois, c'est la compacité de $\Pi(\mu, \nu)$ qui est moins évidente. Nous allons utiliser le théorème de Prokhorov (A.9). Ce qui revient à montrer que toute suite de $\Pi(\mu, \nu)$ est tendue.

Soient $\epsilon > 0$ et deux compact $K_{\mathcal{X}} \subset \mathcal{X}$ et $K_{\mathcal{Y}} \subset \mathcal{Y}$ tels que $\mu(\mathcal{X} \setminus K_{\mathcal{X}}), \nu(\mathcal{Y} \setminus K_{\mathcal{Y}}) < \frac{1}{2}\epsilon$. Cela est possible par la réciproque du théorème de Prokhorov, car une mesure seule est toujours tendue. Alors l'ensemble $K_{\mathcal{X}} \times K_{\mathcal{Y}}$ est compact dans $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, et pour toute suite $\pi_n \in \Pi(\mu, \nu)$, nous avons

$$\begin{aligned} \pi_n((\mathcal{X} \times \mathcal{Y}) \setminus (K_{\mathcal{X}} \times K_{\mathcal{Y}})) &\leq \pi_n((\mathcal{X} \setminus K_{\mathcal{X}}) \times \mathcal{Y}) + \pi_n(\mathcal{X} \times (\mathcal{Y} \setminus K_{\mathcal{Y}})) \\ &\leq \mu(\mathcal{X} \setminus K_{\mathcal{X}}) + \nu(\mathcal{Y} \setminus K_{\mathcal{Y}}) < \epsilon \end{aligned}$$

Ce qui montre la tension et donc la compacité de toute suite de $\Pi(\mu, \nu)$. \square

2.3 Problème dual au plan de Transport Optimal

Maintenant que nous avons démontré l'existence de solution au problème de Kantorovitch, nous souhaiterions savoir sous quelles conditions nous pouvons remonter au problème de Monge. Comme le problème (KP) est un problème d'optimisation linéaire sous contraintes d'égalité, il est donc naturel d'étudier le problème dual.

Toujours suivant la présentation du livre de Santambrogio [8], cherchons en premier lieu le problème dual formellement.

La contrainte $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ peut s'exprimer sous la forme :

$$\begin{aligned} \sup_{(\phi, \psi) \in C_b(\mathcal{X}) \times C_b(\mathcal{Y})} \int_{\mathcal{X}} \phi(x) d\mu(x) + \int_{\mathcal{Y}} \psi(y) d\nu(y) - \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} \phi(x) + \psi(y) d\pi(x, y) \quad (3) \\ = \begin{cases} 0 & \text{si } \pi \in \Pi(\mu, \nu) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned}$$

Ainsi nous pouvons supprimer la contrainte dans le problème (KP) en ajoutant l'expression (3), puisque si la contrainte est satisfaite, rien n'est ajoutée, si elle ne l'est pas nous obtenons $+\infty$ ce qui sera évité par la minimisation.

$$\inf_{\pi} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} C d\pi + \sup_{(\phi, \psi) \in C_b(\mathcal{X}) \times C_b(\mathcal{Y})} \int_{\mathcal{X}} \phi d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi d\nu - \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} \phi(x) + \psi(y) d\pi(x, y)$$

Il n'est pas toujours possible d'échanger le sup et l'inf, mais supposons pour le moment que cela soit possible :

$$\sup_{(\phi, \psi) \in C_b(\mathcal{X}) \times C_b(\mathcal{Y})} \int_{\mathcal{X}} \phi d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi d\nu + \inf_{\pi} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} (C(x, y) - \phi(x) + \psi(y)) d\pi(x, y) \quad (4)$$

Avec ce problème de maximisation sur les variables (ϕ, ψ) , l'infimum en π peut être réécrit comme une contrainte sur (ϕ, ψ) :

$$\inf_{\pi} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} (C - \phi \oplus \psi) d\pi = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi \oplus \psi \leq C \text{ sur } \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \\ -\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (5)$$

Où la fonction, $\phi \oplus \psi$ est définie par $(\phi \oplus \psi)(x, y) = \phi(x) + \psi(y)$. L'égalité précédente est justifiée car, si $\phi \oplus \psi > C$ quelque part alors en utilisant des mesures π concentrées en cet endroit et de masse croissante, l'intégrale tend vers $-\infty$. Ce qui nous amène au problème suivant :

Étant données deux mesures de probabilités μ et ν et un coût C , trouver deux fonctions continues, bornées ϕ et ψ réalisant le

$$\sup \left\{ \int_{\mathcal{X}} \phi d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi d\nu, \quad (\phi, \psi) \in C_b(\mathcal{X}) \times C_b(\mathcal{Y}), \quad \phi \oplus \psi \leq C \right\} \quad (\text{DKP})$$

Remarquons que le $\sup(\text{DKP}) \leq \min(\text{KP})$, en intégrant la condition $\phi \oplus \psi \leq C$ par rapport à π :

$$\int_{\mathcal{X}} \phi d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi d\nu = \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} \phi \oplus \psi d\pi \leq \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} C d\pi$$

Malheureusement le problème (DKP) n'admet pas trivialement l'existence de ses maximums, car l'espace des fonctions continues bornées n'est pas compact. Nous montrerons dans un premier temps l'existence de ces maximums, puis montrerons que le problème (DKP) est bien le dual de (DKP) au sens où $\max(\text{DKP}) = \min(\text{KP})$.

Définition 2.4 : C et \bar{C} -transformée, C et \bar{C} -concavité

Soit une fonction $\chi : \mathcal{X} \rightarrow [-\infty, +\infty]$. La C -transformée (ou parfois, C - conjuguée) de χ est définie par $\chi^C : \mathcal{Y} \rightarrow [-\infty, +\infty]$:

$$\chi^C(y) = \inf_{x \in \mathcal{X}} C(x, y) - \chi(x)$$

De même, la \bar{C} -transformée est définie pour une fonction $\tau : \mathcal{Y} \rightarrow [-\infty, +\infty]$ par

$$\tau^{\bar{C}}(x) = \inf_{y \in \mathcal{Y}} C(x, y) - \tau(y)$$

De plus, nous dirons qu'une fonction ψ définie sur \mathcal{Y} est \bar{C} -concave s'il existe $\chi : \mathcal{X} \rightarrow [-\infty, +\infty]$ telle que $\psi = \chi^C$. Respectivement, une fonction ϕ définie sur \mathcal{X} est dite C -concave s'il existe $\tau : \mathcal{Y} \rightarrow [-\infty, +\infty]$ telle que $\phi = \tau^{\bar{C}}$.

Nous noterons $C\text{-conc}(\mathcal{X})$ et $\bar{C}\text{-conc}(\mathcal{Y})$ les ensembles des fonctions C et \bar{C} -concaves.

Dans notre cas, C est continue sur un ensemble compact, et est donc uniformément continue. C'est à dire qu'il existe une fonction continue croissante $\omega : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ et $\omega(0) = 0$ (module de continuité) telle que

$$|C(x, y) - C(x', y')| \leq \omega(d(x, x') + d(y, y'))$$

En reprenant la définition de $\chi^C(y) = \inf_x g_x(y)$ avec $g_x(y) = C(x, y) - \chi(x)$ qui vérifie $|g_x(y) - g_x(y')| \leq \omega(d(y, y'))$. Ce qui montre que χ^C et C partagent le même module de continuité.

Ensuite remarquons qu'étant donnée une paire (ϕ, ψ) du problème (DKP), elle peut toujours être remplacée par la paire (ϕ, ϕ^C) puis par $(\phi^{C\bar{C}}, \phi^C)$, car les contraintes sont préservées et les intégrales augmentées. Nous pourrions espérer itérer ce processus, mais pour toute fonction ϕ , nous avons $\phi^{C\bar{C}C} = \phi$. Cependant les considérations précédentes nous amènent le théorèmes d'existence suivant.

Théorème 2.5 :

Supposons que \mathcal{X} et \mathcal{Y} soient compact et que C est continue. Alors il existe une solution (ϕ, ψ) au problème (DKP), de la forme $\phi \in C\text{-conc}(\mathcal{X})$, $\psi \in \bar{C}\text{-conc}(\mathcal{Y})$ et $\psi = \phi^C$. En particulier,

$$\max(\text{DKP}) = \max_{\phi \in C\text{-conc}(\mathcal{X})} \int_{\mathcal{X}} \phi \, d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \phi^C \, d\nu \quad (6)$$

Preuve :

Prenons une suite maximisante (ϕ_n, ψ_n) et améliorons la, par la C et la \bar{C} -transformée. Par les considérations précédentes, nous pouvons supposer une borne uniforme sur la continuité de ces fonctions (le même module de continuité que C). Gardons la notation (ϕ_n, ψ_n) pour désigner cette suite améliorée.

Vérifions que cette suite est équibornée pour appliquer le théorème d'Ascoli Arzelà (A.10). Remarquons qu'ajouter une constante à ϕ et la retirer à ψ ne change pas la valeur de la fonctionnelle et n'affecte pas les contraintes. Ainsi, comme ϕ_n est continue sur un ensemble compact, elle est donc bornée, quitte à ajouter le minimum, nous pouvons supposer que $\min \phi_n = 0$, nous avons aussi que $\max \phi_n \leq \omega(d(\mathcal{X}))$, car les oscillations d'une fonction sont toujours plus faible que son module de continuité appliqué à la plus grande distance possible dans l'ensemble.

Comme nous avons choisi $\psi_n = \phi_n^C$, nous avons également, $\psi_n(y) = \inf_x C(x, y) - \phi_n(x) \in [\min C - \omega(d(\mathcal{X})), \max C]$. Ce qui nous donne des bornes uniformes sur (ϕ_n, ψ_n) et nous permet d'appliquer le théorème d'Ascoli - Arzelà.

À une sous suite près, $\phi_n \rightarrow \phi$ et $\psi_n \rightarrow \psi$ avec convergence uniforme, de ce fait :

$$\int_{\mathcal{X}} \phi_n \, d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi_n \, d\nu \rightarrow \int_{\mathcal{X}} \phi \, d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi \, d\nu \quad (7)$$

De plus,

$$\phi_n(x) + \psi_n(y) \leq C(x, y) \Rightarrow \phi(x) + \psi(y) \leq C(x, y)$$

Ici la convergence simple aurait suffit. Cela montre que (ϕ, ψ) est une paire admissible pour (DKP) et donc optimale. \square

Avant de montrer que les problèmes (DKP) et (KP) sont bien duaux, introduisons un outil, la transformée de Legendre Fenchel et donnons quelques propriétés.

Définition 2.6 : *Transformée de Legendre Fenchel*

Pour toute fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ sa transformée de Legendre Fenchel est définie par :

$$f^* : \begin{cases} E^* & \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\} \\ y & \longmapsto \sup_{x \in E} \langle x, y \rangle - f(x) \end{cases} \quad (8)$$

Propriété :

1. Une fonction f est convexe et semi continue inférieurement si et seulement si il existe une fonction g telle que $f = g^*$.
2. Une fonction $f : E \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est convexe et semi continue inférieurement si et seulement si $f^{**} = f$.

Preuve :

1. \Leftarrow : Il est clair que $\sup_x \langle x, \cdot \rangle - g(x)$ est dans Γ_0 .
 \Rightarrow : Supposons que c'est faux, c'est à dire, $\exists \bar{x} \in \mathcal{D}(f)$ telle que $f(\bar{x}) > \bar{z} := \sup \{ \langle x_i, \bar{x} \rangle - g_i, i \in I \}$, où I représente les indices des fonctions qui minorent f .
 Alors le point, $\left(\begin{smallmatrix} \bar{x} \\ \bar{z} \end{smallmatrix} \right) \notin \text{epi}(f)$. On peut alors trouver un hyperplan séparant $\left(\begin{smallmatrix} \bar{x} \\ \bar{z} \end{smallmatrix} \right)$ et $\text{epi}(f)$ pour obtenir une minorante de f contredisant la définition de \bar{z} .
2. \Leftarrow : c'est le point précédent.
 \Rightarrow :

□

Montrons à présent que (DKP) est bien le problème dual associé à (KP).

Théorème 2.7 :

Les problèmes (KP) et (DKP) sont bien duaux l'un de l'autre :

$$\min (\text{KP}) = \max (\text{DKP}) \quad (9)$$

Preuve :

Pour tout $p \in C(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, posons

$$H(p) = - \max \left\{ \int_{\mathcal{X}} \phi \, d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi \, d\nu, \quad \phi \oplus \psi \leq C - p \right\}$$

C'est l'opposée de la valeur de (DKP) pour le coût $C - p$. Par le théorème 2.5, nous avons que, $H(p)$ est bien atteint et que le module de continuité de la paire optimale (ϕ, ψ) est le même que celui de $C - p$.

Lemme :

La fonction $H : C(\mathcal{X} \times \mathcal{Y}) \rightarrow \mathbb{R}$ est convexe et semi continue inférieurement pour la convergence uniforme.

Preuve :

Pour la convexité, prenons p_0 et p_1 associés avec leur paire optimale (ϕ_0, ψ_0) et (ϕ_1, ψ_1) . Pour $t \in [0, 1]$ posons, $p_t = (1-t)p_0 + tp_1$, $\phi_t = (1-t)\phi_0 + t\phi_1$ et $\psi_t = (1-t)\psi_0 + t\psi_1$. La paire (ϕ_t, ψ_t) est admissible dans le maximum définissant $H(p_t)$. Ainsi,

$$H(p_t) \leq - \left(\int_{\mathcal{X}} \phi_t d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi_t d\nu \right) = (1-t)H(p_0) + tH(p_1)$$

Ce qui montre la convexité.

Pour la semi continuité, prenons une suite (p_n) convergeant uniformément vers p . A une sous suite près, p_n réalise la \liminf de $H(p_n)$. De la convergence uniforme, la suite p_n est équicontinue et bornée (réciproque de théorème d'Ascoli - Arzelà (A.10)). Ainsi, les paires optimales correspondantes (ϕ_n, ψ_n) sont aussi équicontinues et bornées. A une sous suite près, supposons que $\phi_n \rightarrow \phi$ et $\psi_n \rightarrow \psi$ uniformément. Comme $\phi_n \oplus \psi_n \leq C - p_n$, nous avons $\phi \oplus \psi \leq C - p$, ainsi :

$$H(p) \leq - \left(\int_{\mathcal{X}} \phi d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi d\nu \right) = \lim_n H(p_n) = \liminf_n H(p_n)$$

ce qui montre la semi continuité inférieure. \square

Calculons à présent la transformée de Legendre Fenchel de H .

$H^* : \mathcal{M}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y}) \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Pour tout $\pi \in \mathcal{M}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, nous avons

$$H^*(\pi) = \sup_p \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} p d\pi + \sup \left\{ \int_{\mathcal{X}} \phi d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi d\nu, \quad \phi \oplus \psi \leq C - p \right\}$$

Ce qui se réécrit sous la forme d'un sup unique sur p , ϕ , ψ . Remarquons que, si $\pi \notin \mathcal{M}_+(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, alors il existe $p_0 \leq 0$ tel que $\int p_0 d\pi > 0$, en prenant $\phi \equiv 0$, $\psi \equiv 0$ et $p = C + np_0$ en faisant tendre n vers $+\infty$ nous obtenons $H^*(\pi) = +\infty$.

D'autre part, si $\pi \in \mathcal{M}_+(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, en prenant le p le plus grand possible i.e. $p = C - \phi - \psi$, nous obtenons

$$H^*(\pi) = \sup_{(\phi, \psi)} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} C d\pi + \int_{\mathcal{X}} \phi d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \psi d\nu - \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} \phi d\pi - \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} \psi d\pi$$

C'est exactement l'expression obtenue au (3) pour réécrire les contraintes de (KP).

$$H^*(\pi) = \begin{cases} K(\pi) & \text{si } \pi \in \Pi(\mu, \nu) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

La preuve est presque terminée, $\max(\text{DKP}) = -H(0) = -H^{**}(0)$ car H est convexe et semi continue inférieurement. De plus, $H^{**}(0) = \sup_{\pi} \langle 0, \pi \rangle - H^*(\pi) = -\inf H^* = -\min(\text{KP})$. \square

Ainsi, nous voyons que

$$\min(\text{KP}) = \max_{\phi \in C\text{-conc}(\mathcal{X})} \int_{\mathcal{X}} \phi \, d\mu + \int_{\mathcal{Y}} \phi^C \, d\nu$$

Ce qui montre que la valeur du minimum de (KP) est une fonction convexe de μ et ν , comme supremum de fonctionnelle linéaire.

Définition 2.8 : Potentiel de Kantorovitch

Les fonctions ϕ réalisant le maximum de (6) sont appelées potentiels de Kantorovitch pour le transport de μ sur ν .

2.4 Existence du transport optimal

A partir des résultats précédents sur le problème (KP) et son dual (DKP), nous allons montrer l'existence du transport optimal dans le cas où, $\mathcal{X} = \mathcal{Y} = \Omega \subset \mathbb{R}^n$ compact et $C(x, y) = h(x - y)$ pour une certaine fonction strictement convexe h .

Rappelons que pour une mesure π , son support est le plus petit ensemble fermé sur lequel π est concentré :

$$\text{supp } \pi = \bigcap \{A \mid A \text{ fermé}, \pi(\mathcal{X} \setminus A) = 0\}$$

De l'égalité entre le minimum de (KP) et le maximum de (DKP) et le fait que les deux soient atteints, considérons un plan de transport optimal π et un potentiel de Kantorovitch ϕ ,

$$\phi(x) + \phi^C(y) \leq C(x, y) \text{ sur } \Omega \times \Omega \quad (10)$$

$$\phi(x) + \phi^C(y) = C(x, y) \text{ sur } \text{supp } \pi \quad (11)$$

L'égalité vient de l'inégalité (qui est vraie partout) et de

$$\begin{aligned} \min(\text{KP}) &= \max(\text{DKP}) \\ \int_{\Omega \times \Omega} C \, d\pi &= \int_{\Omega} \phi \, d\mu + \int_{\Omega} \phi^C \, d\nu = \int_{\Omega \times \Omega} \phi \oplus \phi^C \, d\pi \end{aligned} \quad (12)$$

ce qui implique l'égalité π presque partout.

Proposition 2.3 :

Si $C \in C^1(\Omega \times \Omega, [0, +\infty])$, ϕ un potentiel de Kantorovitch pour le coût C pour le transport de μ vers ν . Soit $(x_0, y_0) \in \text{supp } \pi$. Alors, si ϕ est différentiable en x_0 , nous avons $\nabla \phi(x_0) = \frac{\partial C}{\partial x}(x_0, y_0)$.

En particulier les gradients de deux potentiels de Kantorovitch coïncident en tout point $x_0 \in \text{supp } \pi$ où ils sont tous les deux différentiables.

Preuve :

Soit $(x_0, y_0) \in \text{supp } \pi$ telle que ϕ soit différentiable en x_0 , des calculs précédents, nous déduisons que l'application $x \mapsto \phi(x) - C(x, y_0)$ atteint son minimum en $x = x_0$. Comme ϕ et $C(\cdot, y_0)$ sont différentiables, nous obtenons directement le résultat souhaité. \square

Théorème 2.9 : *Existence du transport optimal*

Soient μ et ν des mesures de probabilités sur un domaine compact Ω de \mathbb{R}^n , alors il existe un plan de transport optimal π pour le coût $C(x, t) = h(x - y)$, avec h strictement convexe. De plus, π est unique, de la forme $(Id, T)_{\#}\mu$ si μ est absolument continue et $\partial\Omega$ est μ -négligeable. Enfin, il existe un potentiel de Kantorovitch ϕ qui est lié à T par :

$$T(x) = x - (\partial h)^{-1}(\nabla \phi(x)) \quad (13)$$

Preuve :

Le théorème 2.7 nous donne l'existence d'un plan de transport optimal π et d'un potentiel de Kantorovitch ϕ .

ϕ partage le même module de continuité que C , c'est une fonction lipschitzienne sur $\Omega \times \Omega$ puisque h est localement lipschitzienne et bornée sur Ω . Ainsi, ϕ est aussi lipschitzienne.

Pour $C(x, y) = h(x - y)$, si h est différentiable, nous obtenons par la proposition précédente que $\nabla \phi(x_0) = \nabla h(x_0 - y_0)$, si ce n'est pas le cas, nous avons $\nabla \phi(x_0) \in \partial h(x_0 - y_0)$ le sous différentiel de h ¹. Comme h est strictement convexe, $(\partial h)^{-1}$ existe, et nous avons

$$x_0 - y_0 = (\partial h)^{-1}(\nabla \phi(x_0))$$

Comme μ est absolument continue, $\partial\Omega$ et l'ensemble des points où ϕ n'est pas différentiable sont négligeables (par le théorème de Rademacher).

Cela montre que le plan de transport optimal est induit par un transport, que ce transport est donné par $x \mapsto x - (\partial h)^{-1}(\nabla \phi(x_0))$. Ainsi il est uniquement déterminé, car ϕ ne dépend pas de π . En conséquence, π est également unique. \square

Ainsi, tous les coûts de la forme $C(x, y) = \|x - y\|^p$ avec $p > 1$ sont traités.

2.5 Le cas quadratique sur \mathbb{R}^n

Comme souvent le cas quadratique possède quelques propriétés supplémentaires qu'il convient d'exposer. Mettons nous dans \mathbb{R}^n avec le coût $C(x, y) = \frac{1}{2}\|x - y\|^2$.

Premièrement, si nous sommes sur un ensemble compact, nous pouvons préciser le théorème (2.9). Il existe une application de transport optimal qui s'exprime comme

$$T(x) = x - \nabla \phi(x) = \nabla \left(\frac{x^2}{2} - \phi(x) \right) = \nabla u(x)$$

Pour une certaine fonction convexe ϕ . Adaptons le résultat précédent aux domaines non bornés. Considérons pour cela une variante du problème (DKP) :

Étant donné deux mesures de probabilités μ et ν et un coût C , trouver deux fonctions ϕ et ψ réalisant le

$$\sup \left\{ \int_{\mathbb{R}^n} \phi \, d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} \psi \, d\nu, \quad (\phi, \psi) \in L^1(\mathbb{R}^n, \mu) \times L^1(\mathbb{R}^n, \nu), \quad \phi \oplus \psi \leq C \right\} \quad (\text{DKP - var})$$

Introduisons un lemme technique établissant un lien entre la C - concavité et la transformée de Legendre Fenchel dans le cas du coût quadratique.

Lemme :

Soit une fonction $\chi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Posons, $u_\chi : \begin{cases} \mathbb{R}^n & \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\} \\ x & \longmapsto \frac{1}{2}\|x\|^2 - \chi(x) \end{cases}$. Alors, $u_{\chi^C} = (u_\chi)^*$. En particulier, une fonction χ est C - concave si et seulement si $x \mapsto \frac{1}{2}\|x\|^2 - \chi(x)$ est convexe et semi continue inférieurement.

Preuve :

Pour le premier point, calculons

$$u_{\chi^C}(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2 - \chi^C(x) = \sup_y \left(\frac{1}{2}\|x\|^2 - \frac{1}{2}\|x-y\|^2 + \chi(y) \right) = \sup_y \langle x, y \rangle - \left(\frac{1}{2}\|y\|^2 - \chi(y) \right)$$

De plus, comme les fonctions C - concaves sont caractérisées par le fait qu'elles sont des C - transformée et des fonctions convexes semi continues inférieurement (comme le sup de fonctions affines). Ce qui montre le second point. \square

Nous pouvons à présent énoncer le résultat de dualité.

Théorème 2.10 :

Soient μ et ν des probabilités sur \mathbb{R}^n et $C(x, y) = \frac{1}{2}\|x - y\|^2$. Supposons que :

1. $\int \|x\|^2 dx, \int \|y\|^2 dy < +\infty$,
2. μ ne donne pas de masse aux hypersurfaces de classe C^2 .

Alors (DKP - var) admet une solution (ϕ, ψ) et les fonctions $x \mapsto \frac{1}{2}\|x\|^2 - \phi(x)$ et $y \mapsto \frac{1}{2}\|y\|^2 - \psi(y)$ sont conjuguées l'une de l'autre pour la transformation de Legendre Fenchel. De plus $\sup (\text{DKP - var}) = \inf (\text{KP})$.

Comme nous l'avons fait pour (DKP), remarquons que $\sup (\text{DKP - var}) \leq \min (\text{KP})$, en intégrant la condition $\phi \oplus \psi \leq C$ par rapport à π :

$$\int_{\mathbb{R}^n} \phi \, d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} \psi \, d\nu = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \phi \oplus \psi \, d\pi \leq \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} C \, d\pi$$

Preuve :

La continuité de C et les propriétés de complétude et de séparabilité de \mathbb{R}^n nous garantissent l'existence du min (KP) par la proposition (2.2). Soit π la mesure réalisant ce minimum.

Il existe alors une paire (ϕ, ψ) avec ϕ est C - concave et telle que $\phi(x) + \phi^C(y) = C(x, y)$ pour (x, y) dans le support du plan de transport optimal.

Alors, nous déduisons que $x \mapsto \frac{1}{2}\|x\|^2 - \phi(x)$ et $y \mapsto \frac{1}{2}\|y\|^2 - \psi(y)$ sont convexes, conjuguées l'une de l'autre. En particulier, $\frac{1}{2}\|x\|^2 - \phi(x)$ est bornée inférieurement par une fonction linéaire, et donc ϕ est bornée supérieurement par un polynôme du second degré. Cela montre que $\phi_+ \in L^1(\mu)$ par hypothèse sur μ , de même, nous montrons que $\psi_+ \in L^1(\nu)$.

Intégrons à présent $\phi \oplus \psi$ par rapport à π .

$$\int_{\mathbb{R}^n} \phi \, d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} \psi \, d\nu = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \phi \oplus \psi \, d\pi = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} C \, d\pi \geq 0$$

Ce qui prouve que $\int_{\mathbb{R}^n} \phi \, d\mu, \int_{\mathbb{R}^n} \psi \, d\nu > -\infty$ et donc $\phi \in L^1(\mu)$ et $\psi \in L^1(\nu)$.

Ainsi, nous pouvons utiliser (ϕ, ϕ^C) comme paire admissible pour (DKP - var).

$$(\text{DKP - var}) \geq \int_{\mathbb{R}^n} \phi \, d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} \phi^C \, d\nu = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} C \, d\pi = (\text{KP})$$

par l'optimalité de π .

Ainsi, $\max(\text{DKP - var}) = \min(\text{KP})$. □

Théorème 2.11 :

Soient μ et ν des probabilités sur \mathbb{R}^n et $C(x, y) = \frac{1}{2}\|x - y\|^2$. Supposons que :

1. $\int \|x\|^2 dx, \int \|y\|^2 dy < +\infty$
2. μ ne donne pas de masse aux hypersurfaces de classe C^2 .

alors il existe une unique application de transport optimal T , donnée par $T = \nabla u$ pour une fonction convexe u .

Preuve :

Il existe un plan de transport optimal π , et par le théorème précédent, une paire $(\phi, \psi) \in L^1(\mu) \times L^1(\nu)$ optimale.

Comme $\phi \in L^1(\mu)$, nous en déduisons que u est finie μ presque partout et comme u est convexe, $\text{supp } \pi \subset \{u < +\infty\}$, un ensemble convexe.

Remarquons que $\partial\{u < +\infty\}$ s'exprime comme le graphe d'une fonction concave, c'est donc une hypersurface de classe C^2 , qui est μ négligeable par hypothèse. Dans l'intérieur de $\partial\{u < +\infty\}$, u est différentiable μ presque partout par hypothèse sur μ et u convexes.

Comme ϕ est différentiable μ presque partout, la mesure π est concentrée sur le graphe

■ de $x \mapsto x - \nabla\phi(x) = \nabla u(x)$.

□

Maintenant que nous avons montré l'existence du transport optimal, introduisons petit à petit des hypothèses simplificatrices mais pas aberrantes dans le contexte de la résolution numérique. Mettons nous dans \mathbb{R}^n et supposons que les mesures aient une densité : $\mu = f_0 dx$ et $\nu = f_1 dx$. La relation (1) devient alors :

$$\begin{aligned} \forall B \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^n), \quad \int_B f_1(y) dy &= \int_{T^{-1}(B)} f_0(x) dx \\ &= \int_B \sum_{x \in T^{-1}(y)} \left(\frac{f_0(x)}{|\det \nabla T(x)|} \right) dy \end{aligned}$$

C'est à dire $f_1(y) = \sum_{x \in T^{-1}(y)} \left(\frac{f_0(x)}{|\det \nabla T(x)|} \right)$.

Supposons de plus que le transport est injectif et lisse, i.e. $x \in T^{-1}(y) \Leftrightarrow y = T(x)$. Nous obtenons alors l'équation dite de Jacobienne :

$$f_1(T(x)) = \frac{f_0(x)}{|\det \nabla T(x)|} \quad (\text{J})$$

Notons $\mathcal{T}(f_0, f_1)$ l'ensemble des applications qui vérifient (J).

Définition 2.12 : Métrique de Wasserstein

Pour les coûts de transport de la forme $C(x, y) = \|x - y\|^p$, nous pouvons définir une métrique entre f_0 et f_1 par

$$W(f_0, f_1)^p = \min_{T \in \mathcal{T}(f_0, f_1)} \int \|x - T(x)\|^p f_0(x) dx$$

Dans le cas quadratique, T s'écrit comme le gradient d'une fonction convexe, qui satisfait alors l'équation dite de Monge Ampère :

$$f_1(\nabla u(x)) = \frac{f_0(x)}{\det H u(x)} \quad (\text{MA})$$

2.6 Formulation de J.D. Benamou et Y. Brenier

Pour le moment, le coût ne dépend que des densités initiale et finale, cependant il semble pertinent de chercher à connaître ce qu'il se passe pendant le transport, cela nous amènera à prendre en compte la notion d'obstacle. Dans leur article de 1999, J.D. Benamou et Y. Brenier [1], ont donné une autre formulation au problème de transport optimal en réintroduisant le temps comme variable. Ils obtiennent alors une interprétation très simple du problème de transport optimal en terme de mécanique des fluides.

Théorème 2.13 : Benamou, Brenier

Soient f_0 et f_1 deux densités de probabilité assez régulières. Alors,

$$\min_{T \in \mathcal{T}(f_0, f_1)} \int \|x - T(x)\|^2 dx = \min_{(f, v) \in \mathcal{C}_v} \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} f(t, x) \|v(t, x)\|^2 dt dx \quad (14)$$

Avec,

$$\begin{aligned} f(t, x) &: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{la densité} \\ v(t, x) &: \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n \quad \text{champ de vecteurs vitesses} \end{aligned}$$

et

$$C_v = \left\{ (f, v) \mid \frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_x(fv) = 0, f(0, \cdot) = f_0, f(1, \cdot) = f_1 \right\} \quad (15)$$

Preuve :

Nous redonnons la preuve donnée par Benamou et Brenier en complétant les points qui nous semble obscurs.

Supposons f_0 et f_1 bornées et à support compact de \mathbb{R}^n . Considérons (f, v) , suffisamment régulières, vérifiant (15). Cette preuve repose sur l'utilisation des variables lagrangiennes $X(t, x)$ qui décrivent le comportement d'un fluide en "suivant" les particules.

En termes formels, cela donne,

$$X(0, x) = x \quad \frac{\partial X}{\partial t}(t, x) = v(t, X(t, x)) \quad (16)$$

Ainsi, pour toute fonction test ϕ :

$$\int \phi(t, x) f(t, x) dx dt = \int \phi(t, X(t, x)) f_0(x) dx dt \quad (17)$$

$$\int \phi(t, x) f(t, x) v(t, x) dx dt = \int \frac{\partial X}{\partial t}(t, x) \phi(t, X(t, x)) f_0(x) dx dt \quad (18)$$

la première égalité vient du changement de variable $x = X(t, x)$, or, $f(t, X(t, x))$ décrit la densité de la particule de fluide déplacée le long du champ de vitesse v à l'instant t , c'est donc la densité initiale en x , $f_0(x)$.

Remarquons que (17) et la condition $f(0, \cdot) = f_0$, $f(1, \cdot) = f_1$ impliquent que $T(x) = X(1, x)$ est un transport valide. En effet, pour tout borélien B , $\int_{T(x) \in B} f_0(x) dx =$

$\int_{X(1, x) \in B} f_0(x) dx$ Ce qui signifie, qu'au temps 1, la particule x est dans le borélien B ,

comme la densité au temps 1 est donnée par f_1 nous avons bien : $\int_{X(1, x) \in B} f_0(x) dx =$

$\int_B f_1(x) dx$.

Puis remarquons, en prenant comme fonction test $\phi(t, x) = \|v(t, x)\|^2$ dans (17), que :

$$\int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 f(t, x) \|v(t, x)\|^2 dx dt = \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 f_0(x) \|v(t, X(t, x))\|^2 dx dt$$

Nous obtenons,

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 f_0(x) \left\| \frac{\partial X}{\partial t}(t, x) \right\|^2 dx dt \quad \text{par (16)} \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x) \int_0^1 \left\| \frac{\partial X}{\partial t}(t, x) \right\|^2 dt dx \\
&\text{par l'inégalité de Jensen :} \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x) \left\| \int_0^1 \frac{\partial X}{\partial t}(t, x) dt \right\|^2 dx \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x) \|X(1, x) - X(0, x)\|^2 dx \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x) \|X(1, x) - x\|^2 dx \quad \text{par (16)}
\end{aligned}$$

Nous reconnaissons ici la forme qui apparaît dans la distance L^2 de Wasserstein, pour le transport $T(x) = X(1, x)$. Prenons $\nabla u(x)$ le transport optimal, nous avons alors :

$$\leq \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x) \|\nabla u(x) - x\|^2 dx$$

Finalement, nous avons montré que :

$$\int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 f(t, x) \|v(t, x)\|^2 dx dt \leq \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x) \|\nabla u(x) - x\|^2 dx = d(f_0, f_1)^2$$

Il reste à trouver un couple (f, v) tel que nous ayons l'égalité et la preuve sera complète. Choisissons $X(t, x) = x + t(\nabla u(x) - x)$, ce qui correspond à la paire (f, v) vérifiant pour toute fonction test ϕ :

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 \phi(t, x) f(t, x) dt dx &= \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 \phi(t, x + t(\nabla u(x) - x)) f_0(x) dx dt \\
\int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 \phi(t, x) f(t, x) v(t, x) dt dx &= \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 (\nabla u(x) - x) \phi(t, x + t(\nabla u(x) - x)) f_0(x) dt dx
\end{aligned}$$

Et en reprenant le raisonnement de la première étape, nous obtenons

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 f(t, x) \|v(t, x)\|^2 dt dx &= \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 f_0(x) \|v(t, X(t, x))\|^2 \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^1 f_0(x) \left\| \frac{\partial X(t, x)}{\partial t}(t, x) \right\|^2 dt dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} f_0(x) \|\nabla u(x) - x\|^2 dx
\end{aligned}$$

Ce qui achève la preuve. □

Remarquons qu'une fois le champ de vitesse v calculé, il est possible de retrouver l'applica-

tion de transport optimal et intégrant le flot. Plus précisément, soit $x \in \mathbb{R}^n$, posons $T_t(x)$ satisfaisant

$$T_0(x) = x \quad \forall t > 0, \quad \frac{\partial T_t(x)}{\partial t} = v(T_t(x), t)$$

Suivant l'idée de Benamou et Brenier, posons le changement de variables $(f, v) \mapsto (f, m)$, où $m = fv$ est la quantité de mouvement. Nous obtenons ainsi un problème d'optimisation convexe sous contraintes linéaires pour la paire (f, m) .

$$\min_{(f,m) \in \mathcal{C}} \mathcal{J}(f, m) = \int \int_0^1 J(f(x, t), m(x, t)) \, dt dx \quad (\text{P})$$

$$\forall (m, f) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}, \quad J(m, f) = \begin{cases} \frac{\|m\|^2}{2f} & \text{si } f > 0 \\ 0 & \text{si } (m, f) = (0, 0) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (19)$$

$$\mathcal{C} = \left\{ (m, f) \mid \frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}_x(m) = 0 \quad f(\cdot, 0) = f_0, \, f(\cdot, 1) = f_1 \right\} \quad (\text{C})$$

2.7 Conclusion

Dans cette partie, nous avons introduit le problème de transport optimal. Démontrer l'existence et l'unicité du transport. Le problème se reformule alors.

Et nous avons montré avec Benamou et Brenier que ce problème est équivalent au suivant : qui a une interprétation en terme de mécanique des fluides très pratiques.

Avant d'entamer la résolution numérique du problème de transport optimal, nous présentons les opérateurs proximaux qui joueront un rôle central dans notre modèle.

3 Opérateurs proximaux

L'opérateur proximal d'une fonction convexe généralise la notion de projection sur un ensemble convexe. Cette notion fût introduite pour répondre aux problèmes de minimisation de fonctions non nécessairement différentiables.

Suivant la présentation de *P.L. Combettes* et *J.C. Pesquet* [4] nous présentons une série de résultats sur les opérateurs proximaux, en complétant quelques preuves.

Notation : Le domaine d'une fonction $f : \mathbb{R}^n \rightarrow]-\infty, +\infty]$ est $\mathcal{D}(f) = \{x \in \mathbb{R}^n \mid f(x) < +\infty\}$. Notons $\Gamma_0(\mathbb{R}^n)$ l'ensemble des fonctions convexes semi-continues inférieurement à valeurs dans $]-\infty, +\infty]$ telles que $\mathcal{D}(f) \neq \emptyset$.

Définition 3.1 : Sous - différentiel

Soit $f \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$, le sous - différentiel de f est l'application suivante,

$$\partial f : \begin{cases} \mathbb{R}^n & \longrightarrow \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \\ x & \longmapsto \{u \in \mathbb{R}^n \mid \forall y \in \mathbb{R}^n, \langle u, y - x \rangle + f(x) \leq f(y)\} \end{cases}$$

Avec $\mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$, l'ensemble des parties de \mathbb{R}^n .

L'interprétation géométrique du sous-différentiel est la suivante. Il est formé par toutes les directions des hyperplans qui passent par le point $(x, f(x))$ et restent "sous" le graphe de la fonction f .

Exemple : Calculons le sous différentiel en tout point de

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \longrightarrow \mathbb{R}^+ \\ x & \longmapsto |x| \end{cases}$$

Considérons deux cas,

1. $x > 0$ (le cas $x < 0$ est identique). Soit une direction u appartient au sous différentiel de f en x , alors $\forall y \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} u(y - x) + f(x) &\leq f(y) \\ u(y - x) + x &\leq |y| \end{aligned}$$

En particulier, pour $y = 0$ nous obtenons $x(1 - u) \leq 0$, ainsi $u \geq 1$. Et donc en prenant $y > x$ (en particulier, $y > 0$) nous obtenons $u(y - x) + x \geq y$ ce qui est contraire à notre définition sauf si $u = 1$.

2. $x = 0$ Soit $u \in \partial f(0)$, alors u doit vérifier pour tout $y \in \mathbb{R}$,

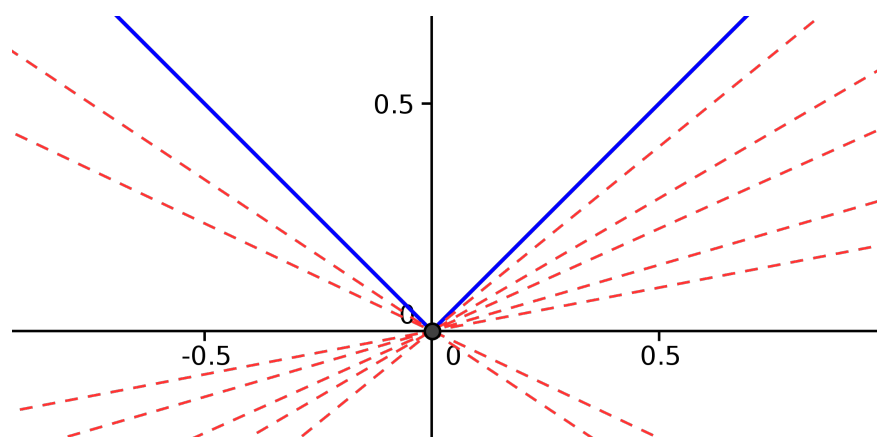
$$uy \leq |y|$$

En prenant $y > 0$ nous obtenons que $u \leq 1$ et en prenant $y < 0$, nous avons $u \geq -1$.

En somme,

$$\partial f(x) = \begin{cases} \{-1\} & x < 0 \\ [-1, 1] & x = 0 \\ \{1\} & x > 0 \end{cases}$$

Ce qui correspond bien à l'interprétation géométrique donnée et à la figure 4.

FIGURE 4 – Illustration du sous - différentiel de $|x|$ en 0**Propriété :**

Soit $f \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$. Si f est différentiable sur son domaine, alors

$$\forall x \in \mathcal{D}(f)^\circ, \partial f(x) = \{\nabla f(x)\}$$

Preuve :

Comme une f est convexe différentiable, nous avons la caractérisation suivante du gradient :

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^n, \quad \langle \nabla f(x), y - x \rangle + f(x) \leq f(y)$$

qui implique que $\nabla f(x) \in \partial f(x)$.

Supposons à présent que $p \in \partial f(x)$. Soit une suite y_n^1 de \mathbb{R}^n qui tend vers x . Écrivons, $y_n^1 = x + k_n$ avec $\|k_n\| \rightarrow 0$. Posons alors y_n^2 une seconde suite de \mathbb{R}^n telle que $y_n^2 = x - k_n$, alors :

$$\begin{cases} \langle p, k_n \rangle & \leq f(x + k_n) - f(x) \\ \langle p, -k_n \rangle & \leq f(x - k_n) - f(x) \end{cases}$$

Comme f est différentiable dans son domaine, nous pouvons écrire,

$$f(x \pm k_n) = f(x) \pm \langle \nabla f(x), k_n \rangle$$

Ainsi, nous obtenons

$$\begin{cases} \langle p, k_n \rangle & \leq \langle \nabla f(x), k_n \rangle \\ \langle p, k_n \rangle & \geq \langle \nabla f(x), k_n \rangle \end{cases}$$

Ainsi $\langle p, k_n \rangle = \langle \nabla f(x), k_n \rangle$. En faisant tendre n vers $+\infty$, comme la suite k_n converge fortement vers 0, elle va aussi converger faiblement. Ce qui implique que $p = \nabla f(x)$. \square

Cette propriété est cohérente avec l'exemple précédent, $\partial f(x) = f'(x)$ partout où f est différentiable, c'est à dire $x \neq 0$.

Propriété :

Si $f = \alpha f_1 + \beta f_2$, avec $f_1, f_2 \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$ et $\alpha, \beta \geq 0$. Alors

$$\begin{aligned}\partial f(x) &= \alpha \partial f_1(x) + \beta \partial f_2(x) \\ &= \{u \in \mathbb{R}^n \mid \exists (u_1, u_2) \in \partial f_1(x) \times \partial f_2(x), u = \alpha u_1 + \beta u_2\}\end{aligned}$$

Preuve :

$\alpha \partial f_1(x) + \beta \partial f_2(x) \subset \partial(\alpha f_1 + \beta f_2)(x)$: $u \in \mathbb{R}^n$ est dans $\partial(\alpha f_1 + \beta f_2)(x)$ si et seulement si pour tout $y \in \mathbb{R}^n$, nous avons

$$\langle u, y - x \rangle + \alpha f_1(x) + \beta f_2(x) \leq \alpha f_1(y) + \beta f_2(y)$$

En particulier en prenant $u \in \alpha \partial f_1(x) + \beta \partial f_2(x)$, au sens donné dans la propriété, cette inégalité est vérifiée.

$\alpha \partial f_1(x) + \beta \partial f_2(x) \supset \partial(\alpha f_1 + \beta f_2)(x)$: Soit $u \in \partial(\alpha f_1 + \beta f_2)(x)$, par contradiction, supposons que $u \notin \alpha \partial f_1(x) + \beta \partial f_2(x)$, c'est à dire :

$$\forall (u_1, u_2) \in \partial f_1(x) \times \partial f_2(x), \quad u \neq \alpha u_1 + \beta u_2$$

EMPTY

□

Exemple : Calculons le sous différentielle de $f(x) + \frac{1}{2}\|x - y\|^2$, pour une certaine fonction $f \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$ et $y \in \mathbb{R}^n$ fixé.

La notion de sous - différentiel est centrale car elle permet de caractériser les minimiseurs d'une fonction (même non différentiable).

Théorème 3.2 :

Soit $f \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$. Le point $x^* \in \mathbb{R}^n$ est un point de minimum global de f si et seulement si

$$0 \in \partial f(x^*)$$

Preuve :

Soit x^* le minimum global de f ,

$$\begin{aligned}\iff \forall y \in \mathbb{R}^n \quad f(x^*) &\leq f(y) \\ \iff \langle 0, y - x^* \rangle + f(x^*) &\leq f(y) \\ \iff 0 \in \partial f(x^*)\end{aligned}$$

□

L'opérateur proximal est un outil important dans l'optimisation de fonctions convexes non différentiables. C'est une application minimisant une fonction fortement convexe dépendant de la fonction originale f . En trouvant un compromis entre atteindre le minimum de la fonction non différentiable f et en forçant une proximité avec l'argument, nous approchons le minimum de f .

Définition 3.3 : *Opérateur proximal*

Soit $f \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$. L'opérateur proximal de f est noté Prox_f et il est défini pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ par :

$$\text{Prox}_f(x) = \arg \min_{y \in \mathbb{R}^n} f(y) + \frac{1}{2} \|x - y\|^2$$

Exemple : Prenons, l'indicatrice d'un ensemble convexe non vide C :

$$i_C = \begin{cases} 0 & x \in C \\ +\infty & x \notin C \end{cases}$$

Alors,

$$\begin{aligned} \text{prox}_{i_C}(x) &= \arg \min_{y \in \mathbb{R}^n} i_C(y) + \frac{1}{2} \|x - y\|^2 \\ &= \arg \min_{y \in C} \frac{1}{2} \|x - y\|^2 \\ &= P_C(x) \end{aligned}$$

Où, P_C désigne la projection orthogonale sur C .

Sur la figure 5 (tirée de [7]), nous avons en **gras** la frontière de la fonction f , les lignes fines sont les lignes de niveaux de f . Nous évaluons Prox_f sur les points bleus ce qui les associent aux points rouges correspondant. Les trois points dans le domaine restent dans le domaine et se déplacent vers le minimum, et les deux à l'extérieur du domaine se placent sur la frontière de celui-ci en direction du minimum. Un scalaire $\gamma > 0$ peut être introduit

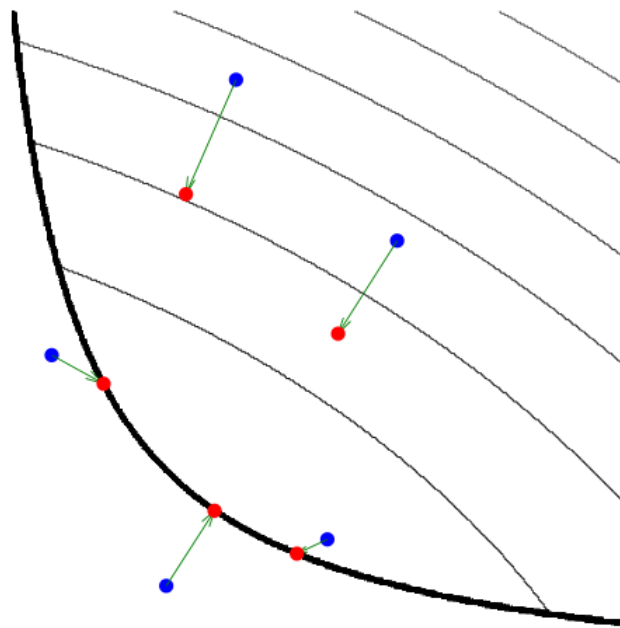


FIGURE 5 – Illustration de l'opérateur proximal

dans cette définition $\text{prox}_{\gamma f}$, ce paramètre contrôle le poids apporté à la minimisation de

f . Un γ grand, forcera de se rapprocher fortement du minimum de f , alors qu'un γ petit favorisera les points proches de x . Le résultat important est le suivant.

Propriété :

Soit une fonction $f \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$. Alors, $\text{Prox}_f(x)$ existe et est unique pour tout $x \in \mathbb{R}^n$.

De plus, il est caractérisé par :

$$\forall (x, p) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \quad p = \text{Prox}_f x \iff x - p \in \partial f(p)$$

En particulier, si f est différentiable alors :

$$\forall (x, p) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \quad p = \text{Prox}_f x \iff x - p = \nabla f(p)$$

Preuve :

$\forall x \in \mathbb{R}^n$, la fonction $g : y \mapsto f(y) + \frac{1}{2}\|x - y\|^2$ est strictement convexe et dans $\Gamma_0(\mathbb{R}^n)$ (i.e. non identiquement égale à $+\infty$). Ce qui montre que le minimum de g est toujours atteint et est unique.

\Leftarrow Supposons que $x - p \in \partial f(p)$. Alors, pour tout $y \in \mathbb{R}^n$, nous avons

$$\langle x - p, y - p \rangle + f(p) \leq f(y)$$

Or,

$$\begin{aligned} \langle x - p, y - p \rangle &= \frac{1}{2} \langle x - p, y - x + x - p \rangle + \frac{1}{2} \langle x - y + y - p, y - p \rangle \\ &= \frac{1}{2} \|x - p\|^2 + \frac{1}{2} \|y - p\|^2 + \frac{1}{2} (\langle x - p, y - x \rangle + \langle x - y, y - p \rangle) \\ &= \frac{1}{2} \|x - p\|^2 + \frac{1}{2} \|y - p\|^2 - \frac{1}{2} \|x - y\|^2 \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|x - p\|^2 + \frac{1}{2} \|y - p\|^2 - \frac{1}{2} \|x - y\|^2 + f(p) &\leq f(y) \\ \frac{1}{2} \|x - p\|^2 + f(p) &\leq f(y) + \frac{1}{2} \|x - y\|^2 \end{aligned}$$

Donc $p = \text{Prox}_f(x)$.

\Rightarrow Soit $(x, p) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ telle que $p = \text{Prox}_f(x)$. Cela signifie que p minimise l'application $y \mapsto f(y) + \frac{1}{2}\|x - y\|^2$, par la caractérisation du minimum par le sous différentiel, $0 \in \partial \left(f(\cdot) + \frac{1}{2}\|x - \cdot\|^2 \right) (p)$. Par la règle de la somme des sous différentielles et l'exemple, $\exists u \in \partial f$ telle que $0 = u + (p - x)$.

Ainsi, $u = x - p \in \partial f(p)$. □

De plus,

Propriété :

Le point x^* minimise f si et seulement si

$$x^* = \text{Prox}_f(x^*)$$

Preuve :

\Rightarrow Supposons que x^* minimise f alors, $\forall y \in \mathbb{R}^2$,

$$f(x^*) + \frac{1}{2}\|x^* - x^*\|^2 \leq f(y) + \frac{1}{2}\|x^* - y\|^2$$

Donc, $\text{Prox}_f(x^*) = x^*$.

\Leftarrow Utilisons la caractérisation de minimisation donnée par le sous - différentiel. Le point \tilde{x} minimise $f(x) + \frac{1}{2}\|x - y\|^2$, c'est à dire $\tilde{x} = \text{Prox}_f(y)$, si et seulement si

$$0 \in \partial f(\tilde{x}) + (\tilde{x} - y)$$

Où la somme est entendue au sens de la somme entre un ensemble et un singleton, comme dans l'exemple précédent.

En prenant $x^* = y = \tilde{x}$, nous obtenons $0 \in \partial f(x^*)$. Et donc x^* minimise f . \square

Cela suggère des algorithmes de point fixe. Cela fonctionnerait si Prox_f était une contraction (i.e. c - lipschitzienne, $0 < c < 1$). Ce n'est pas le cas, cependant nous avons une propriété de non expansivité qui est suffisante pour une itération de point fixe :

$$\|\text{prox}_f(x) - \text{prox}_f(y)\|^2 \leq \langle \text{prox}_f(x) - \text{prox}_f(y), x - y \rangle$$

C'est un cas particulier d'opérateur non expansif (comme par exemple, $-Id$ ou les rotations, [3, 2]).

Définition 3.4 : *Application non expansive*

Une application $N : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ est dite non expansive si

$$\forall (x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n, \quad \|N(x) - N(y)\| \leq \|x - y\|$$

C'est à dire que N est 1-lipschitzienne. Nous avons la caractérisation suivante, N est non expansive si et seulement si

$$\forall (x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n, \quad \|N(x) - N(y)\|^2 \leq \langle N(x) - N(y), x - y \rangle$$

Si N est un opérateur non expansif alors $\forall \alpha \in]0, 1[$ l'opérateur $T = (1 - \alpha)I + \alpha N$ a les mêmes point fixes que N , et qu'en itérant T , il y a convergence vers les point fixes. C'est à dire, la suite

$$x_{n+1} = (1 - \alpha)x_n + N(x_n)$$

converge vers un point fixe de N .

Soit le problème de minimisation :

Soient f_1 et f_2 deux fonctions de $\Gamma_0(\mathbb{R}^n)$ telles que $f_1 + f_2 \in \Gamma_0(\mathbb{R}^n)$, en particulier le support de $f_1 + f_2$ est non vide. Supposons que

$$\lim_{\|x\| \rightarrow +\infty} f_1(x) + f_2(x) = +\infty$$

Considérons alors le problème de minimisation, Trouver $x \in \mathbb{R}^n$ qui réalise le

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f_1(x) + f_2(x) \quad (20)$$

Propriété :

Le problème 20 admet une solution et pour tout $\gamma > 0$, elle est caractérisée par :

$$\begin{cases} x^* &= \text{Prox}_{\gamma f_2} y \\ \text{Prox}_{\gamma f_2} y &= \text{Prox}_{\gamma f_1}(2\text{Prox}_{\gamma f_2} y - y) \end{cases}$$

Preuve :

Omettons le paramètre γ qui ne change rien à la preuve. $f_1 + f_2$ est une fonction convexe, infinie à l'infini donc l'existence d'un minimiseur est immédiate.

$$x^* = \arg \min_x f_1(x) + f_2(x) \iff 0 \in \partial(f_1 + f_2)(x^*)$$

$$\iff \exists (x_1, x_2) \in \partial(f_1)(x^*) \times \partial(f_2)(x^*) \text{ telle que } 0 = x_1 + x_2$$

Comme le support de $f_1 + f_2$ est non vide, $\exists y$ tel que $x^* - y \in \partial(f_1)(x)$ et $y - x^* \in \partial(f_2)(x)$.

$$\iff x^* = \text{prox}_{f_2}(y) \text{ et } (2x^* - y) - x^* \in \partial(f_1)(x^*)$$

$$\iff x^* = \text{prox}_{f_1}(2x^* - y)$$

□

Suivant les idées d'algorithmes de point fixe sur les opérateurs proximaux, nous introduisons l'algorithme suivant dit de *Douglas - Rachford*.

Algorithme 1 Douglas-Rachford

Soit $\epsilon \in]0, 1[$, $\gamma > 0$, $y_0 \in \mathbb{R}^n$

for $n = 0, 1, \dots$ **do**

$x_n = \text{Prox}_{\gamma f_2} y_n$

$\lambda_n \in [\epsilon, 2 - \epsilon]$

$y_{n+1} = y_n + \lambda_n(\text{Prox}_{\gamma f_1}(2x_n - y_n) - x_n)$

end for

Propriété :

Toute suite (x_n) générée par l'algorithme de Douglas - Rachford converge vers une solution du problème 20.

Preuve :

L'itération sur y_n peut se réécrire comme une opération de point fixe, $y_{n+1} = F(y_n)$, avec $F : y \mapsto y + \text{Prox}_{\gamma f_1}(2\text{Prox}_{\gamma f_2}(y) - y) - \text{Prox}_{\gamma f_2}(y)$. Or,

$$\begin{aligned} \iff x &= \text{Prox}_{\gamma f_2}(y), \quad y = F(y) \\ \iff x &= \text{Prox}_{\gamma f_2}(y), \quad x = \text{Prox}_{\gamma f_1}(2x - y) \\ \iff y + x &\in \partial f_2(x), \quad x - y \in \partial f_1(x) \end{aligned}$$

Alors, si $y = F(y)$, cela implique que $x = \text{prox}_{\gamma f_2}(y)$ vérifie

$$0 = (y - x) + (x - y) \in \partial \gamma(f_1 + f_2)(x)$$

Réciproquement, si $z \in \partial \gamma f_1(x)$ et $-z \in \partial \gamma f_2(x)$, alors $y = x - z$ est un point fixe de F .

Le paramètre λ_n , relaxe l'équation de point fixe : $y_{n+1} = y_n + \lambda_n(F(y_n) - y_n)$. □

4 Méthode numérique

Dans cette section, nous présentons différentes manières d'approcher numériquement la solution du problème (MP). La méthode consiste principalement à trouver une manière efficace de calculer les contraintes.

Nous présentons la méthode implémenté par Papadakis et al. dans [6]. Cette méthode repose sur l'utilisation de grilles décentrées pour obtenir de bonnes approximations des dérivées. Cependant, je tiens à souligner que le déploiement de cette artillerie n'est pas nécessaire à la résolution numérique du problème, par exemple une méthode plus simple est présentée ici².

Dans cette section nous nous plaçons dans un domaine spatial de dimension 1. La méthode présentée s'étend sans grande difficultés en dimensions supérieures.

4.1 Grilles centrées et décalées

Mettons sur le carré espace temps unité $[0, 1]^2$. Discrétisons l'espace en $N + 1$ points et le temps en $Q + 1$ points. Discrétisons alors l'espace temps de la façon suivante :

$$\mathcal{G}_c = \left\{ (x_i = \frac{i}{N}, t_j = \frac{j}{Q}) \mid 0 \leq i \leq N, 0 \leq j \leq Q \right\}$$

Notons $\mathcal{E}_c = (\mathbb{R}^2)^{\mathcal{G}_c}$ l'espace de dimension finie de variables définies sur la grille centrées et posons :

$$V = (m_{ij}, f_{ij})_{0 \leq i \leq N}^{0 \leq j \leq Q}$$

La discrétisation centrée de (m, f) .

Comme annoncé en introduction de cette section, nous introduisons à présent des grilles décalées (une dans la direction de l'espace et une autre dans la direction temporelle). Cela dans le but d'obtenir de bonne approximations des opérateurs de dérivées.

$$\mathcal{G}_s^x = \left\{ (x_i = \frac{i + 1/2}{N}, t_j = \frac{j}{Q}) \mid -1 \leq i \leq N, 0 \leq j \leq Q \right\} \quad (21)$$

$$\mathcal{G}_s^t = \left\{ (x_i = \frac{i}{N}, t_j = \frac{j + 1/2}{Q}) \mid 0 \leq i \leq N, -1 \leq j \leq Q \right\} \quad (22)$$

Ainsi, \mathbb{G}_s^x contient $(N + 2) \times (Q + 1)$ points et \mathcal{G}_s^t en contient $(N + 1) \times (Q + 2)$ points. Notons $\mathcal{E}_s = \mathbb{R}^{\mathbb{G}_s^x} \times \mathbb{R}^{\mathbb{G}_s^t}$ l'espace des variables sur les grilles décentrées. Et notons

$$U = (\bar{m}, \bar{f}) = \left((\bar{m}_{ij})_{-1 \leq i \leq N}^{0 \leq j \leq Q}, (\bar{f}_{ij})_{0 \leq i \leq N}^{-1 \leq j \leq Q} \right)$$

Les variables discrétisées.

2. http://www.numerical-tours.com/matlab/optimaltransp_2_benamou_brenier/

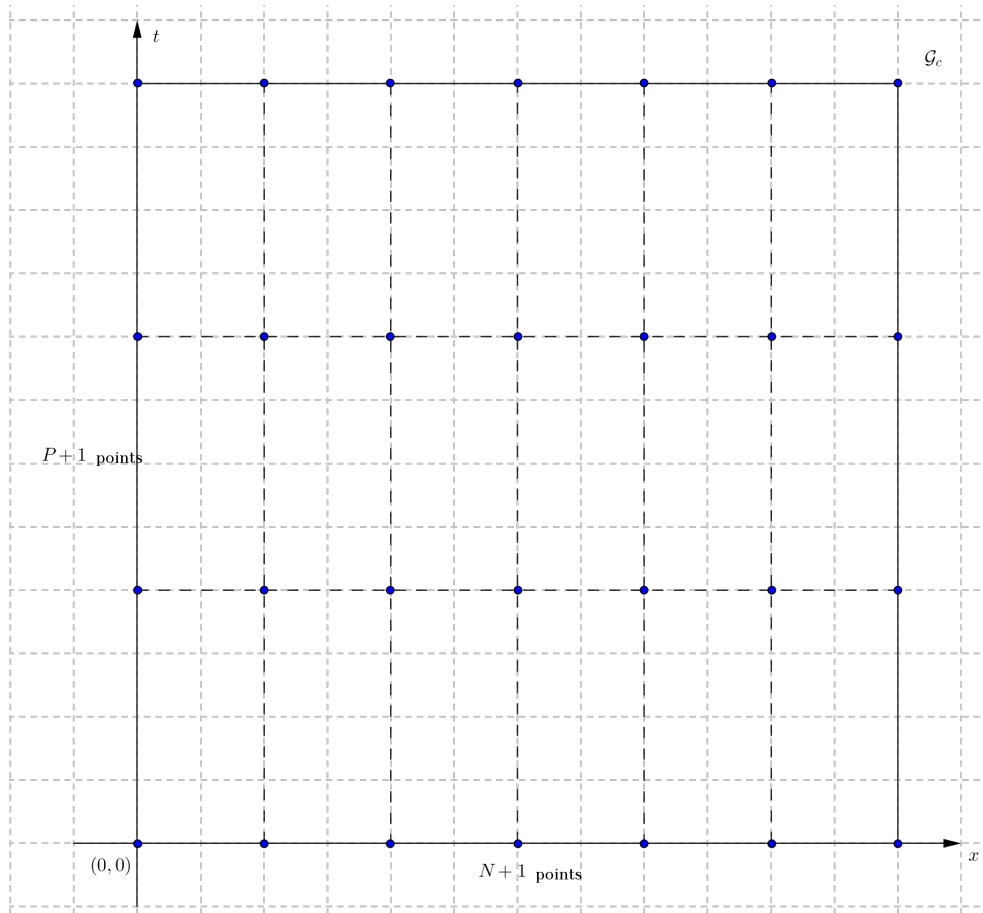
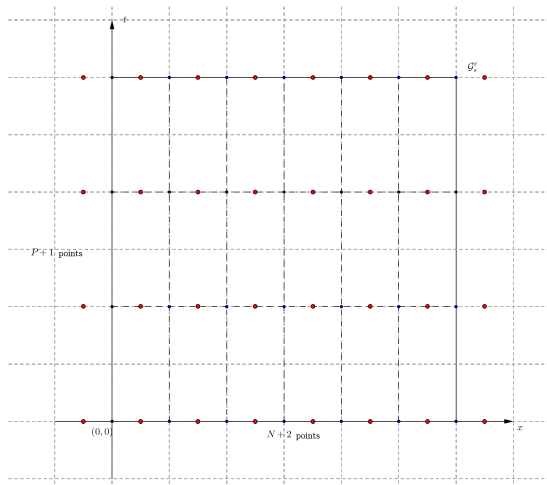
FIGURE 6 – Grille centrée pour $N = 6$ et $Q = 3$ 

FIGURE 7 – Grille décentrée en espace

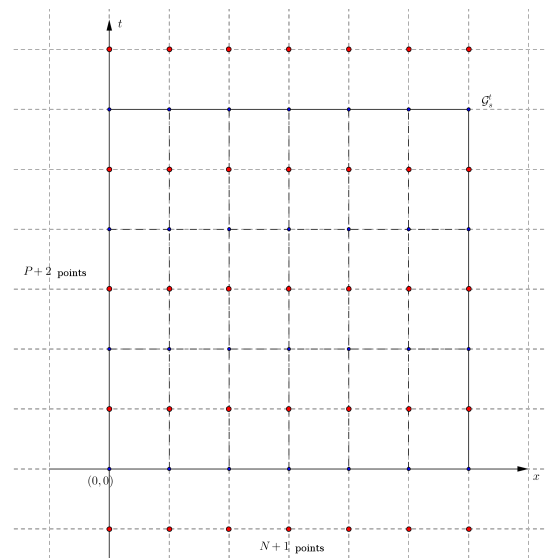


FIGURE 8 – Grille décentrée en temps

4.2 Opérateurs discrétisés

Introduisons plusieurs opérateurs, dans un premier temps, un opérateur d'interpolation qui nous permet de lier les variables centrées aux variables décentrées.

$$\mathcal{I} : \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E}_s \longrightarrow \mathcal{E}_c \\ (\bar{m}, \bar{f}) \longmapsto \left\{ \begin{array}{l} m_{i,j} = (\bar{m}_{i-1,j} + \bar{m}_{i,j})/2 \\ f_{i,j} = (\bar{f}_{i,j-1} + \bar{f}_{i,j})/2 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad \forall 0 \leq i \leq N, \forall 0 \leq j \leq Q \quad (23)$$

Et introduisons l'opérateur de divergence spatiale et temporelle :

$$\text{div} : \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E}_s \longrightarrow \mathbb{R}^{\mathcal{G}_c} \\ U \longmapsto \text{div}(U)_{i,j} = N(\bar{m}_{i,j} - \bar{m}_{i-1,j}) + Q(\bar{f}_{i,j} - \bar{f}_{i,j-1}) \end{array} \right. \quad (24)$$

Nous définissons enfin un opérateur d'extraction des frontières des variables décentrées.

$$b : \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E}_s \longrightarrow \mathbb{R}^{Q+1} \times \mathbb{R}^{Q+1} \times \mathbb{R}^{N+1} \times \mathbb{R}^{N+1} \\ U \longmapsto \left((\bar{m}_{-1,j}, \bar{m}_{N,j})_{j=0}^Q, (\bar{f}_{i,-1}, \bar{f}_{i,Q})_{i=0}^N \right) \end{array} \right. \quad (25)$$

Nous imposons les conditions aux bords suivantes :

$$b(U) = b_0 \quad b_0 = (0, 0, f_0, f_1) \in \mathbb{R}^{Q+1} \times \mathbb{R}^{Q+1} \times \mathbb{R}^{N+1} \times \mathbb{R}^{N+1}$$

Avec, $f_0, f_1 \in \mathbb{R}^{N+1}$ les densités initiale et finale discrétisées en espace, et la contrainte spatiale $0 \in \mathbb{R}^{Q+1}$ sur la quantité de mouvement vient de la discrétisation des conditions de Neumann sur le champ de vitesse v .

Remarquons qu'en deux ou trois dimensions spatiales, les conditions de Neumann et de Dirichlet ne coïncident plus, par exemple en 2D, les conditions de Neumann sont équivalentes à forcer la première composantes de \bar{m} à être zéro sur les côtés verticaux et à forcer la seconde composante de \bar{m} à être zéros sur les segments horizontaux.

4.3 Problème discrétisé

Nos pouvons à présent donner le problème discrétisé,

$$\min_{(U,V) \in \mathcal{E}_s \times \mathcal{E}_c} \mathcal{J}(V) + \iota_{\mathcal{C}}(U) + \iota_{\mathcal{C}_s}(U, V) \quad (26)$$

Ici, l'indicatrice d'un ensemble convexe est définie de la façon suivante ; $\iota_{\mathcal{C}} = \begin{cases} 0 & \text{si } U \in \mathcal{C} \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$.

Si nous notons $k = (i, j) \in \mathcal{G}_c$ les indices sur la grilles centrées, alors la fonction objectif discrète \mathcal{J} s'écrit pour une variable $V \in \mathcal{E}_c$ de la manière suivante :

$$\mathcal{J}(V) = \sum_{k \in \mathcal{G}_c} J(m_k, f_k)$$

Le premier ensembles de contraintes correspond à l'équation de continuité discrétisée et des conditions aux bords :

$$\mathcal{C} = \{U \in \mathcal{E}_s \mid \text{div}(U) = 0, b(U) = b_0\}$$

Enfin, le dernier terme rajoute une contraintes liant les variables centrées et décentrées :

$$\mathcal{C}_s = \{(U, V) \in \mathcal{E}_s \times \mathcal{E}_c \mid V = \mathcal{I}(U)\}$$

Remarquons que la fonctionnelle \mathcal{J} possèdent les propriétés suivantes, lorsque que $f(t, x) \rightarrow +\infty$, $\mathcal{J} \rightarrow 0$ et que si $f(t, x) \rightarrow 0$ alors $\mathcal{J} \rightarrow +\infty$. ainsi, \mathcal{J} n'est pas coercive et son gradient n'est pas lipschitzien. C'est pourquoi, les techniques de minimisation classiques (type descente de gradient) sont inefficaces et que nous allons recourir aux opérateurs proximaux et à l'algorithme de Douglas Rachford présenté dans la section précédente.

Reprenons alors le problème (20) et posons, $f_1 = \mathcal{J}(V) + \iota_{\mathcal{C}}(U)$ et $f_2 = \iota_{\mathcal{C}_s}(U, V)$. Ces deux fonctions sont simples dans la mesure où leur opérateur proximaux sont de la forme suivante

$$\text{Prox}_{\gamma f_1}(U, V) = (\text{Proj}_{\mathcal{C}}(U), \text{Prox}_{\gamma \mathcal{J}}(V)) \quad (27)$$

$$\text{Prox}_{\gamma f_2}(U, V) = \text{Proj}_{\mathcal{C}_s}(U, V) \quad (28)$$

C'est opérateurs seront explicité dans la section suivante.

L'algorithme de Douglas-Rachford devient alors :

Soit une suite $(x_n, y_n) \in (\mathcal{E}_s \times \mathcal{E}_c)^2$. A partir, d'une condition initiale y_0 ,

$$\begin{aligned} x_n &= \text{Proj}_{\mathcal{C}_s}(y_n) \\ y_{n+1} &= y_n + \lambda_n (\text{Prox}_{\gamma f_1}(2x_n - y_n) - x_n) \end{aligned} \quad (29)$$

Alors $x_n \rightarrow x^*$ une solution du problème.

4.4 Opérateur proximal de \mathcal{J}

La fonctionnelle \mathcal{J} est simple dans le sens où son opérateur proximal peut être calculé dans une forme fermée.

Proposition 4.1 :

Nous avons

$$\forall w \in \mathcal{G}, \text{Prox}_{\gamma \mathcal{J}}(w) = (\text{Prox}_{\gamma J}(w_k))_{k \in \mathcal{G}}$$

Où, pour tout $w_k = (m_k, f_k) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$,

$$\text{Prox}_{\gamma J}(m_k, f_k) = \begin{cases} \left(\frac{f_k^* m_k}{f_k^* + \gamma}, f_k^* \right) & \text{si } f_k^* > 0 \\ (0, 0) & \text{sinon} \end{cases}$$

et f_k^* est la plus grande racine réelle du polynôme de degré 3 :

$$P(X) = (X - f_k)(X + \gamma)^2 - \frac{\gamma}{2} \|m_k\|^2 = 0 \quad (30)$$

Preuve :

Posons $(m, f) = \text{Prox}_{\gamma J}(m_k, f_k)$. Si $f > 0$, comme J est C^1 et strictement convexe sur $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{+,*}$, nécessairement, (m, f) est l'unique solution de $\nabla J(m, f) = 0$, ce qui donne

$$\begin{cases} \gamma \frac{m}{f} + m - m_k = 0 \\ -\gamma \frac{\|m\|^2}{f^2} + f - f_k = 0 \end{cases}$$

En réarrangeant ces équations, nous obtenons bien que $P(f) = 0$ et $m = \frac{fm}{f + \gamma}$. Ce qui montre au passage que si P possède au moins une racine réelle strictement positive f_k^* , alors elle est nécessairement unique $f_k^* = f$.

Si ce n'est pas le cas, alors nous avons nécessairement $f = 0$ et par définition de J , $m = 0$. \square

4.5 Projection sur \mathcal{C}

Comme explicité dans la présentation des opérateurs proximaux, l'opérateur proximal de l'indicatrice d'un ensemble convexe et le projecteur orthogonal sur cet ensemble. Ici, l'ensemble des contraintes \mathcal{C} peut être récrit comme un ensemble affine :

$$\mathcal{C} = \{U \in \mathcal{E}_s \mid AU = y\} \quad A = \begin{pmatrix} \text{div} \\ b \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 0 \\ b_0 \end{pmatrix} \quad (31)$$

La projection sur cet ensemble s'écrit comme un problème de minimisation strictement convexe :

$$\text{Proj}_{\mathcal{C}}(U) = \min_{W \in \mathcal{C}} \frac{1}{2} \|U - W\|^2$$

Cela peut être résolu par la méthode des multiplicateurs de Lagrange.

$$\begin{aligned} \text{CNS : } & \begin{cases} W - U + A^* \lambda = 0 \\ AW = y \end{cases} \\ \iff & \begin{cases} AW - AU + AA^* \lambda = 0 \\ AW = y \end{cases} \\ \implies & AA^* \lambda = y - AU \\ \iff & \lambda = (AA^*)^{-1}(y - AU) \\ \implies & W = U - A^*(AA^*)^{-1}(y - AU) \end{aligned}$$

Ainsi,

$$\text{Proj}_{\mathcal{C}}(U) = U - A^*(AA^*)^{-1}(y - AU) \quad (32)$$

La question est alors de calculer efficacement l'opérateur $(AA^*)^{-1}$ efficacement. Cela peut être fait essentiellement de deux manières, par une méthode de gradient conjuguées qui convergera dans le pire des cas en $O(\#\mathcal{G}_s^x \times \#\mathcal{G}_s^t)$ itérations.

La seconde méthode est d'appliquée la transformée de Fourier pour résoudre un problème de Poisson. Nous détaillerons cette partie qui a donné beaucoup de fil à retordre lors de l'implémentation.

4.6 Projection sur \mathcal{C}_s

5 Variations

Avant de présenter des exemple numériques, introduisons une généralisation du problème. L'outillage théorique est plus conséquent mais numériquement, les changements sont mineurs.

Définissons notre problème de transport discrétisé généralisé comme

$$\min_{U \in \mathcal{E}_s} \mathcal{J}_\omega^\beta(\mathcal{I}(U)) + \iota_{\mathcal{C}}(U) \quad (33)$$

Où, $\beta \in [0, 1]$, et le vecteur de poids $\omega = (\omega_k)_{k \in \mathcal{G}_c}$ vérifie $1 \leq \omega_k \leq +\infty$. La fonctionnelle généralisée est définie par :

$$\mathcal{J}_\omega^\beta(V) = \sum_{k \in \mathcal{G}_c} \omega_k J_\beta(m_k, f_k) \quad (34)$$

$$\forall (m, f) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \quad J_\beta = \begin{cases} \frac{\|m\|^2}{2f^\beta} & \text{si } f > 0 \\ 0 & \text{si } (m, f) = (0, 0) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \quad (35)$$

Plusieurs observations, $\mathcal{J}_1^1 = \mathcal{J} \iota$, pour tout $\beta \in [0, 1]$, \mathcal{J}_ω^β est convexe et pour $f > 0$ nous avons

$$\det(\partial^2 J_\omega(m, f)) = \frac{\beta(1-\beta)\|m\|^2}{f^{3\beta+2}}$$

Ainsi, J_β est strictement convexe sur $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^{+,*}$ pour $\beta \in]0, 1[$.

Remarques : Nous pourrions expliquer que cette variante permet de généraliser le problème de transport optimal à des variétés Riemannienne. Cependant, ce qu'il faut en retenir est essentiellement

1. Le coefficient $\beta \in [0, 1]$ agit comme un interrupteur entre l'interpolation L^2 ($\beta = 0$) entre les deux densités et le calcul du transport optimal ($\beta = 1$), i.e. le calcul de la distance L^2 de Wasserstein.
2. Les poids ω_k pondèrent certaines régions de l'espace temps et permettent d'autoriser plus au moins le passage d'une densité dans une région de l'espace ; $\omega_k = +\infty$ correspond à une zone interdite.

Il nous faut alors généraliser la proposition (4.1) pour le calcul de l'opérateur proximal de \mathcal{J}_ω^β .

Proposition 5.1 :

Nous avons

$$\forall V \in \mathcal{E}_c, \quad \text{Prox}_{\gamma \mathcal{J}_\omega^\beta}(V) = (\text{Prox}_{\gamma \omega_k J_\beta}(V_k))_{k \in \mathcal{G}}$$

Où, pour tout $V_k = (m_k, f_k) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$,

$$\text{Prox}_{\gamma J_\beta}(m_k, f_k) = \begin{cases} \left(\frac{(f_k^*)^\beta m_k}{(f_k^*)^\beta + \gamma}, f_k^* \right) & \text{si } f_k^* > 0 \\ (0, 0) & \text{sinon} \end{cases}$$

et f_k^* est la plus grande racine réelle de l'équation en X suivante :

$$P(X) = X^{1-\beta}(X - f_k)(X^\beta + \gamma)^2 - \frac{\gamma}{2}\beta\|m_k\|^2 = 0 \quad (36)$$

Preuve :

□

6 Exemples numériques

6.1 Cas 1D

6.2 Cas 2D

7 Pour aller plus loin

Références

- [1] Jean-David Benamou and Yann Brenier. A computational fluid mechanics solution to the monge-kantorovich mass transfer problem. *Numerische Mathematik*, 84(3) :375–393, 2000.
- [2] Haim Brezis. *Opérateurs maximaux monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert*, volume 5. Elsevier, 1973.
- [3] Felix E Browder. Nonexpansive nonlinear operators in a banach space. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 54(4) :1041–1044, 1965.
- [4] Patrick L Combettes and Jean-Christophe Pesquet. Proximal splitting methods in signal processing. pages 185–212, 2011.
- [5] G. Monge. *Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais*. De l’Imprimerie Royale, 1781.
- [6] Nicolas Papadakis, Gabriel Peyré, and Edouard Oudet. Optimal transport with proximal splitting. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, 7(1) :212–238, 2014.
- [7] Neal Parikh, Stephen Boyd, et al. Proximal algorithms. *Foundations and Trends in Optimization*, 1(3) :127–239, 2014.
- [8] F. Santambrogio. *Optimal Transport for Applied Mathematicians : Calculus of Variations, PDEs, and Modeling*. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications. Springer International Publishing, 2015.

Appendices

A Calcul des variations

Rapellons ici la méthode directe du calcul des variations qui nous servira pour notre démonstration.

Définition A.1 : Fonction continue inférieurement

Dans un espace métrique \mathcal{X} , une fonction $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est dite semi-continue inférieurement si pour toute suite $x_n \rightarrow x$

$$f(x) \leq \liminf_n f(x_n)$$

Définition A.2 : Espace compact

Un espace métrique \mathcal{X} est dit compact si de toute suite (x_n) il existe une sous suite convergente $x_{n_k} \rightarrow x \in \mathcal{X}$.

Théorème A.3 : Weierstrass

Si $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est semi-continue inférieurement, et \mathcal{X} est un espace compact. Alors, il existe $\bar{x} \in \mathcal{X}$ tel que $f(\bar{x}) = \inf_{x \in \mathcal{X}} f(x)$

Preuve :

Soit $l := \inf \{f(x) \mid x \in \mathcal{X}\} \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$. ($l = +\infty$ si et seulement si f est identiquement égale à $+\infty$ auquel cas, tout point de \mathcal{X} minimise f . Par définition de l'infimum, il existe une suite $(x_n) \in \mathcal{X}$ telle que $f(x_n) \rightarrow l$. Quitte à extraire une sous suite, on peut supposer que $x_n \rightarrow \bar{x}$. Par semi-continuité inférieure, nous avons $f(\bar{x}) \leq \liminf_n f(x_n) = l$. D'autre part, $f(\bar{x}) \geq l$ puisque l est l'infimum.

Ainsi, $l = f(\bar{x}) \in \mathbb{R}$. □

Définition A.4 : Convergence faible et faible-*

Une suite x_n d'un espace de Banach \mathcal{X} converge faiblement vers x , que nous notons $x_n \rightharpoonup x$, si pour tout $\xi \in \mathcal{X}'$ (où, \mathcal{X}' est le dual topologique de \mathcal{X} et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le produit de dualité entre ces deux espaces), nous avons $\langle x_n, \xi \rangle \rightarrow \langle x, \xi \rangle$.

Une suite $\xi_n \in \mathcal{X}'$ converge faiblement-* vers ξ , que nous notons $\xi_n \xrightarrow{*} \xi$, si pour tout $x \in \mathcal{X}$ nous avons $\langle x, \xi_n \rangle \rightarrow \langle x, \xi \rangle$.

Théorème A.5 : Banach - Alaoglu

Si \mathcal{X} est séparable et ξ_n est une suite bornée de \mathcal{X}' . Alors il existe une sous suite ξ_{n_k} qui converge faiblement-* vers un $\xi \in \mathcal{X}'$.

Définition A.6 : *Mesures de Radon*

Une mesure λ sur la tribu borélienne d'un espace Ω séparable est dite mesure de Radon si

1. λ est intérieurement régulière : $\forall B \in \mathcal{B}(\Omega), \lambda(B) = \sup_{K \subset B, K \text{ compact}} \lambda(K)$,
2. λ est localement finie : pour tout point x il existe un voisinage B tel que $\lambda(B) < +\infty$.

Notons $\mathcal{M}(\Omega)$ l'ensemble des mesures de Radon sur Ω . Pour ces mesures, il est possible d'associer une mesure positive $|\lambda| \in \mathcal{M}_+(\Omega)$:

$$|\lambda|(B) = \sup \left\{ \sum_i |\lambda(B_i)| \mid B = \bigcup_i B_i, B_i \cap B_j = \emptyset \text{ si } i \neq j \right\}$$

Théorème A.7 : *Riesz pour les mesures de Radon*

Soient Ω une espace séparable et localement compact, $\mathcal{X} = C_0(\Omega)$ l'espace des fonctions continues qui s'annulent à l'infini, muni de la norme sup.

Alors, tout élément de \mathcal{X}' est représenté de façon unique par un élément de $\mathcal{M}(\Omega)$. C'est à dire, $\forall \xi \in \mathcal{X}'$ il existe un unique $\lambda \in \mathcal{M}(\Omega)$ tel que $\langle \phi, \xi \rangle = \int \phi d\lambda \quad \forall \phi \in \mathcal{X}$.

De plus \mathcal{X}' est isomorphe $\mathcal{M}(\Omega)$ muni de la norme $\|\lambda\| = |\lambda|(\Omega)$.

Pour les mesures de Radon de $\mathcal{M}(\Omega)$, la converge faible-* devrait être celle de la dualité avec $C_0(\Omega)$. Cependant, une autre notion de convergence est intéressante, celle avec la dualité de $C_b(\Omega)$, les fonctions continues bornées sur Ω . Par abus de notations, nous la noterons aussi \rightharpoonup : $\lambda_n \rightharpoonup \lambda$ si et seulement si pour toute fonction $\phi \in C_b(\Omega)$ nous avons $\int \phi d\lambda_n = \int \phi d\lambda$. Remarquons que si Ω est compact, $C(\Omega) = C_0(\Omega) = C_b(\Omega)$ et ces notions de convergences sont alors égales.

Les mesures de probabilités sur Ω , $\mathcal{P}(\Omega)$, sont un sous-ensemble particulier de $\mathcal{M}(\Omega)$. $\mu \in \mathcal{P}(\Omega) \Leftrightarrow \mu \in \mathcal{M}_+(\Omega)$ et $\mu(\Omega) = 1$, dans ce cas, μ et $|\mu|$ coïncident.

Définition A.8 : *Tension d'une suite de mesure de probabilité*

Une suite μ_n de probabilité sur Ω est dite tendue si pour tout $\epsilon > 0$ il existe un sous-ensemble compact $K \subset \Omega$ tel que $\mu_n(\Omega \setminus K) < \epsilon$ pour tout n .

Théorème A.9 : *Prokhorov*

Soit μ_n une suite tendue de mesure de probabilité sur un espace métrique complet et séparable Ω . Alors il existe une mesure de probabilité sur Ω , μ , et une sous-suite μ_{n_k} telle que $\mu_{n_k} \rightharpoonup \mu$ (dans la dualité avec $C_b(\Omega)$).

Réciproquement, toute suite $\mu_n \rightharpoonup \mu$ est nécessairement tendue.

Rappelons le résultat principal concernant la compacité dans l'espace des fonctions continues.

Théorème A.10 : *Ascoli - Arzelà*

Si Ω est un espace métrique compact et $f_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est équicontinue et équibornée. Alors il existe une sous suite f_{n_k} qui converge uniformément vers une fonction continue $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$.

Réciproquement, un sous-ensemble de $C(\Omega)$ est relativement compact pour la convergence uniforme si et seulement si tous ses éléments sont équicontinus et équibornés.

Table des figures

1	Le transport optimal dans sa version vulgarisée	4
2	Illustration de l'application de transport	5
3	Illustration de la notion de plan de transport	6
4	Illustration du sous - différentiel de $ x $ en 0	23
5	Illustration de l'opérateur proximal	25
6	Grille centrée pour $N = 6$ et $Q = 3$	31
7	Grille décentrée en espace	31
8	Grille décentrée en temps	31

Liste des Codes