

# Barycentres dans l'espace de Wasserstein

Guillaume CARLIER <sup>a</sup>

Journées IOPS - Image, Optimisation, Probabilités et  
Statistique

Réserve ornithologique du Teich, 5-8 Juillet 2017.

---

<sup>a</sup>CEREMADE, Université Paris Dauphine et MOKAPLAN, Inria-Paris

## Plan

- ① Préliminaires: espace de Wasserstein
- ② Barycentres dans l'espace de Wasserstein: existence, unicité, caractérisation
- ③ Formulation multi-marges
- ④ Exemples
- ⑤ Fonctionnelles convexes, intégrabilité du barycentre
- ⑥ Calcul numérique des barycentres
- ⑦ Propriétés asymptotiques, LGN, TLC
- ⑧ Barycentre régularisé (Bigot, Cazelles, Papadakis), point de vue EDP

## Espace de Wasserstein

Transport optimal avec coût quadratique. Notons  $\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$  l'ensemble des mesures de probabilités sur  $\mathbf{R}^d$  de second moment fini, pour  $\rho_0$  et  $\rho_1$  dans  $\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$ , la 2-distance de Wasserstein entre  $\rho_0$  et  $\rho_1$ ,  $W_2(\rho_0, \rho_1)$  est donnée par

$$W_2^2(\rho_0, \rho_1) = \inf_{\gamma \in \Pi(\rho_0, \rho_1)} \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} |x - y|^2 d\gamma(x, y)$$

où  $\Pi(\rho_0, \rho_1)$  est l'ensemble des plans de transport entre  $\rho_0$  et  $\rho_1$  i.e. les probas sur  $\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d$  ayant  $\rho_0$  et  $\rho_1$  pour marges.

Formulation à la Monge

$$T : \inf_{T_{\#}\rho_0 = \rho_1} \int_{\mathbf{R}^d} |x - T(x)|^2 d\rho_0(x)$$

où  $T_{\#}\rho_0$  désigne la mesure image:

$$T_{\#}\rho_0(B) = \rho_0(T^{-1}(B)).$$

La contrainte  $T_{\#}\rho_0 = \rho_1$  exprime le fait que  $T$  transporte  $\rho_0$  sur  $\rho_1$ . Transports induisent des plans:  $(\text{id}, T)_{\#}\rho_0 \in \Pi(\rho_0, \rho_1)$ .

C'est un problème non linéaire et il se peut qu'il n'existe pas de transport de  $\rho_0$  vers  $\rho_1$  (ex  $\rho_0 = \delta_x$  et  $\rho_1 = \frac{1}{2}(\delta_y + \delta_z)$  avec  $y \neq z$ ), néanmoins si  $\rho_0$  n'a pas d'atome, on a

$$W_2^2(\rho_0, \rho_1) = \inf_{T : T_{\#}\rho_0 = \rho_1} \int_{\mathbf{R}^d} |x - T(x)|^2 d\rho_0(x)$$

L'existence d'un plan est presque triviale,  $\Pi(\rho_0, \rho_1)$  est tendu et le critère est faiblement \* sci.  $W_2$  est une distance sur  $\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$ ,  $(\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d), W_2)$  espace de Wasserstein. Cette distance métrise la convergence faible \* (+ convergence des seconds moments). Mais surtout, comme c'est un problème linéaire, il a une formulation duale (commode en l'occurrence).

Dualité de Kantorovich (cf livres de Villani, Santambrogio):

$$\frac{1}{2}W_2^2(\rho_0, \rho_1) = \sup \left\{ \int_{\mathbf{R}^d} \varphi \rho_0 + \int_{\mathbf{R}^d} \psi \rho_1 : \varphi(x) + \psi(y) \leq \frac{1}{2}|x-y|^2 \right\}$$

ce sup est atteint, ses solutions sont appelées potentiels de Kantorovich, ces potentiels sont reliés par les formules d'inf-convolution

$$\varphi(x) = \inf_y \left\{ \frac{1}{2}|x-y|^2 - \psi(y) \right\}$$

et

$$\psi(y) = \inf_x \left\{ \frac{1}{2}|x-y|^2 - \varphi(x) \right\}.$$

En particulier  $\varphi$  et  $\psi$  sont semi-concaves:  $u := \frac{1}{2}|\cdot|^2 - \varphi$  et  $v := \frac{1}{2}|\cdot|^2 - \psi$  sont convexes et conjuguées:

$$u = v^*, v = u^*$$

transformée de Legendre:

$$v^*(x) := \sup_y \{x \cdot y - v(y)\}.$$

Si  $\gamma$  est un plan optimal et  $\varphi, \psi$  est un couple de potentiels de Kantorovich on a

$$\varphi(x) + \psi(y) = \frac{1}{2}|x - y|^2 \quad \gamma\text{-p.p.}$$

ce qui revient à

$$u(x) + u^*(y) = x \cdot y \quad \gamma\text{-p.p.}$$

ce qui revient à dire que  $y \in \partial u(x)$  si bien que le support de  $\gamma$  est inclus dans le graphe de  $\partial u$ . Il est bien connu que les fonctions convexes finies sont différentiables en dehors d'ensemble "petits".



On appellera ensemble petit de  $\mathbf{R}^d$  tout Borélien de dimension de Hausdorff au plus  $d - 1$ .

Théorème de Brenier, McCann: si  $\rho_0$  ne charge pas les ensembles petits, il y a une unique solution  $\gamma$  au problème de transport optimal, qui est caractérisée par  $\gamma = (\text{id}, \nabla u)_\# \rho_0$  avec  $u$  convexe. Lien avec l'équation de Monge-Ampère:

$$\det(D^2 u) \rho_1(\nabla u) = \rho_0, \quad u \text{ convexe.}$$

Théorie de la régularité L. Caffarelli (avancées récentes: Figalli, De Philippis, livre récent de Figalli). Si  $\rho_0, \rho_1$  ont des densités  $C^{r,\alpha}$  bornées par en dessous et des supports convexes, le transport optimal  $\nabla u$  est un  $C^{r+1,\alpha}$ -difféomorphisme.

Noter que  $W_2^2(\rho_0, \rho_1)$  est une fonction convexe de  $\rho_0$  et  $\rho_1$ . Si en outre,  $\rho_0$  ne charge pas les ensembles petits alors

$\rho_1 \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d) \mapsto W_2^2(\rho_0, \rho_1)$  est *strictement* convexe. En effet supposons que

$$W_2^2(\rho_0, (1-t)\rho_1 + t\nu_1) = (1-t)W_2^2(\rho_0, \rho_1) + tW_2^2(\rho_0, \nu_1),$$

$t \in (0, 1)$  alors si  $\gamma = (\text{id}, T)_\# \rho_0$  (resp.  $\theta = (\text{id}, S)_\# \rho_0$ ) est un plan optimal entre  $\rho_0$  et  $\rho_1$  (resp.  $\nu_1$ ) alors  $(1-t)\gamma + t\theta$  est optimal entre  $\rho_0$  et  $(1-t)\rho_1 + t\nu_1$ . Ce plan devrait donc être porté par un graphe ce qui n'est le cas que lorsque  $S = T$

$\rho_0$ -p.p. i.e  $\rho_1 = \nu_1$ .

Interpolation (McCann): courbe de mesures

$t \in [0, 1] \mapsto \rho_t = ((1 - t) \text{id} + t \nabla u)_{\#} \rho_0$ , c'est la géodésique (à vitesse constante) entre  $\rho_0$  et  $\rho_1$ . Notion de convexité par déplacement i.e. de convexité le long de ces géodésiques, nous y reviendrons.

Formulation dynamique de Benamou-Brenier:

$$W_2^2(\rho_0, \rho_1) = \inf \int_0^1 \int_{\mathbf{R}^d} |v_t(x)|^2 \rho_t(dx) dt$$

sous les contraintes:

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho v) = 0, \quad \rho|_{t=0} = \rho_0, \quad \rho|_{t=1} = \rho_1.$$

F. Otto: structure formelle de variété Riemannienne, calcul d'Otto. Formellement, étant donnée une énergie  $E$  sur  $\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$ , l'équation

$$\partial_t \rho = \operatorname{div}(\rho \nabla E'(\rho))$$

est le flot de gradient (pour  $W_2$ ) de  $E$ . En particulier  $E(\rho) = \int_{\mathbf{R}^d} \rho \log(\rho)$ : le flot de la chaleur est le flot de l'entropie pour  $W_2$ . Multiples exemples, théorie très riche (livre d'Ambrosio-Gigli-Savaré)

## Barycentres dans l'espace de Wasserstein

Soit  $N$  un entier plus grand que 1,  $\nu_1, \dots, \nu_N$  des éléments de  $\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$  et  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_N) \in \mathbf{R}_+^N$  des poids positifs normalisés par  $\sum_{i=1}^N \lambda_i = 1$ , un barycentre dans l'espace de Wasserstein des mesures  $\nu_i$  avec les poids  $\lambda_i$  est un minimiseur de

$$J_\lambda(\mu) := \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} W_2^2(\nu_i, \mu). \quad (1)$$

Existence par la méthode directe du calcul des variations (suite minimisante, borne sur le moment d'ordre 2 puis sci de  $J_\lambda$ ), unicité par stricte convexité si l'un des  $\nu_i$  ne charge pas les ensembles petits.

C'est un cas particulier de moyenne de Fréchet (même principe: minimisation de sommes de carrés de distance mais dans un espace métrique général), unicité pour les espaces NPC ce qui n'est pas la cas de l'espace de Wasserstein (cf. travaux de Karcher, Sturm, Arnaudon...). Mauvais comportement (concave et non semi-convexe) de  $W_2^2$  le long des géodésiques. Ici c'est la convexité (usuelle, plate) qui nous sert pas la convexité le long des géodésiques.

**Théorème 1** *Le problème (1) possède au moins une solution, qui est unique dès que l'un des  $\nu_i$  ne charge pas les ensembles petits. On appelle alors cette solution barycentre Wasserstein de  $(\nu_1, \dots, \nu_N)$  avec les poids  $\lambda_i$ .*

Caractérisation par dualité. Dual de (1):

$$\sup \left\{ F(f_1, \dots, f_N) = \sum_{i=1}^N \int_{\mathbf{R}^d} S_{\lambda_i} f_i d\nu_i : \sum_{i=1}^N f_i = 0, \right\} \quad (2)$$

where

$$S_{\lambda} f(x) := \inf_{y \in \mathbf{R}^d} \left\{ \frac{\lambda}{2} |x - y|^2 - f(y) \right\}, \quad \forall x \in \mathbf{R}^d, \lambda > 0.$$

Soit

$$Y := (1 + |\cdot|^2)C_b(\mathbf{R}^d) = \left\{ f \in C(\mathbf{R}^d) : \frac{f}{1 + |\cdot|^2} \text{ borné} \right\},$$

muni de la norme

$$\|f\|_Y := \sup_{x \in \mathbf{R}^d} \frac{|f(x)|}{1 + |x|^2}.$$

Soit  $X$  le sous-espace fermé de  $Y$  défini par

$$X := (1 + |\cdot|^2)C_0(\mathbf{R}^d) = \left\{ f \in C(\mathbf{R}^d) : \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{f(x)}{1 + |x|^2} = 0 \right\}.$$

**Proposition 1** *L'inf de (1) et le supremum de (2) (avec des  $f_i$  dans  $Y$ ) sont atteints et coïncident.*



Notant  $\mathcal{M}(\mathbf{R}^d)$  l'espace des mesures de Radon bornées sur  $\mathbf{R}^d$ , identifié au dual de  $C_0(\mathbf{R}^d)$  et par  $\mathcal{M}_+^1(\mathbf{R}^d)$  les mesures de probabilités sur  $\mathbf{R}^d$ , on identifie le dual de  $X$

$$X' = \{\mu \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^d) : (1 + |x|^2)\mu \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^d)\}.$$

La fonctionnelle

$$H_i(f) := - \int_{\mathbf{R}^d} S_{\lambda_i} f(x) d\nu_i(x)$$

est convexe sci sur  $Y$  et il découle de la dualité de Kantorovich que, pour tout  $\nu \in X'$ ,

$$H_i^*(\nu) = \begin{cases} \frac{\lambda_i}{2} W_2^2(\nu_i, \nu) & \text{si } \nu \in X' \cap \mathcal{M}_+^1(\mathbf{R}^d) \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

On a directement

$$\inf(1) \geq \sup_{f_i \in Y, \sum f_i = 0} F(f_1, \dots, f_N) \geq \sup_{f_i \in X, \sum f_i = 0} F(f_1, \dots, f_N)$$

On définit alors pour  $f \in X$ ,

$$H(f) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^N H_i(f_i) : \sum_{i=1}^N f_i = f \right\}$$

qui est convexe et bornée (donc continue) au voisinage de 0. Il est bien connu que (sur  $X'$ )

$$H^* = \sum_{i=1}^N H_i^*$$

ainsi

$$\inf(1) = \inf_{X'} \sum_{i=1}^N H_i^* = \inf_{X'} H^* = -H^{**}(0)$$

Tandis que

$$\sup_{f_i \in X, \sum f_i = 0} F(f_1, \dots, f_N) = \sup_{f_i \in X, \sum f_i = 0} - \sum_i H_i(f_i) = -H(0)$$

comme  $H$  est continu en 0 on a l'égalité. Pour montrer l'existence de  $f_i$  optimaux (dans  $Y$  et pas  $X$ ) il faut travailler un peu....

Relations d'extrémalité. Soit  $\mu$  un barycentre i.e une solution de (1),  $\gamma_i$  un plan de transport optimal entre  $\nu_i$  et  $\mu$ , et  $f_i \in Y$ ,  $\sum_i f_i = 0$  solution du dual. On a

$$\sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} W_2^2(\nu_i, \nu) = \sum_{i=1}^N \int_{\mathbf{R}^d} S_{\lambda_i} f_i d\nu_i + \sum_{i=1}^N \int_{\mathbf{R}^d} f_i d\mu.$$

et donc, on a pour chaque  $i$

$$\frac{\lambda_i}{2} W_2^2(\nu_i, \nu) = \int_{\mathbf{R}^d} S_{\lambda_i} f_i d\nu_i + \int_{\mathbf{R}^d} f_i d\mu$$

si bien que  $\gamma_i$  est portée par l'ensemble des  $(x, y)$  pour lesquels

$$S_{\lambda_i} f_i(x) + f_i(y) = \frac{\lambda_i}{2} |x - y|^2$$

En particulier  $f_i(y) \geq S_{\lambda_i}(S_{\lambda_i} f_i)(y)$  et comme  $S_{\lambda_i}(S_{\lambda_i} f_i) \geq f_i$ , on a

$$\sum_{i=1}^N S_{\lambda_i}(S_{\lambda_i} f_i) \geq 0, \quad \sum_{i=1}^N S_{\lambda_i}(S_{\lambda_i} f_i) = 0 \quad \mu\text{-p.p.}$$

On définit le potentiel convexe  $\phi_i$

$$\lambda_i \phi_i(x) := \frac{\lambda_i}{2} |x|^2 - S_{\lambda_i} f_i(x),$$

et  $\phi_i^*$  son potentiel conjugué i.e.

$$\lambda_i \phi_i^*(y) := \frac{\lambda_i}{2} |y|^2 - S_{\lambda_i}(S_{\lambda_i} f_i)(y).$$

les relations précédentes expriment que  $\gamma_i$  est porté par  $\partial\phi_i$  de sorte que si  $\nu_i$  ne charge pas les ensembles petits  $\nabla\phi_i$  est le transport optimal de Brenier:  $\mu = \nabla\phi_{i\#}\nu_i$ .

Les  $\phi_i$  sont liés implicitement par

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i \phi_i^*(y) \leq \frac{|y|^2}{2}, \quad \forall y \in \mathbf{R}^d, \text{ avec égalité } \mu\text{-p.p.}$$

Ceci implique que le support du barycentre est dans l'ensemble de contact entre  $\sum_{i=1}^N \lambda_i \phi_i^*$  et une fonction lisse: les  $\phi_i^*$  sont donc différentiables (leur gradient et le transport optimal du barycentre  $\mu$  vers  $\nu_i$ ) et l'on a

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i \nabla \phi_i^* = \text{id} \quad \mu\text{-p.p.} \quad (3)$$

En posant  $\psi_i = \phi_i^*$  on a un problème de type obstacle pour un système d'équations de Monge-Ampère:

$$\nabla\psi_i\#\mu = \nu_i \text{ soit formellement } \mu = \det(D^2\psi_i)\nu_i(\nabla\psi_i)$$

avec

$$\sum_i \lambda_i \psi_i \leq \frac{1}{2}|\cdot|^2, \text{ avec égalité sur le support de } \mu.$$

La principale difficulté réside dans le fait qu'on ne connaît pas ce support, c'est un problème (délicat) de frontière libre. Noter qu'il y a toujours un transport optimal (c'est  $\nabla\phi_i^*$  qui est continue sur le support de  $\mu$ ) de  $\mu$  vers  $\nu_i$  (pas d'hypothèse).

Un point de vue point fixe (Alvarez-Esteban et al, 2016): on a vu que  $T_i = \nabla \phi_i^*$  est le transport optimal de  $\mu$  vers les  $\nu_i$  et que  $\sum_{i=1}^N \lambda_i T_i = \text{id}$   $\mu$ -p.p. ceci implique en particulier que le barycentre  $\mu$  est un point fixe de l'application  $G$  qui à  $\mu$  associe

$$G(\mu) = \left( \sum_{i=1}^N \lambda_i T_{\mu \rightarrow \nu_i} \right) \# \mu$$

où  $T_{\mu \rightarrow \nu_i}$  est le transport optimal de  $\mu$  vers  $\nu_i$  (on peut aussi généraliser la construction de  $G$  avec des plans). Le fait d'être un point fixe est nécessaire mais a priori pas suffisant.

Estimation quantitative intéressante (Alvarez-Esteban et al, 2016):

$$J_\lambda(\nu) \geq J_\lambda(G(\nu)) + \frac{1}{2} W_2^2(\nu, G(\nu)).$$



En effet posons  $T_i = T_{\nu \rightarrow \nu_i}$  et  $T := \sum_{i=1}^N \lambda_i T_i$ , on a

$$\begin{aligned} W_2^2(\nu_i, \nu) &= \|T_i - \text{id}\|_{L^2(\nu)}^2 = \|T_i - T\|_{L^2(\nu)}^2 + \|T - \text{id}\|_{L^2(\nu)}^2 \\ &\quad + 2 \int_{\mathbf{R}^d} (T_i(x) - T(x), T(x) - x) d\nu(x) \\ &\quad \geq W_2^2(\nu_i, G(\nu)) + W_2^2(\nu, G(\nu)) \\ &\quad + 2 \int_{\mathbf{R}^d} (T_i(x) - T(x), T(x) - x) d\nu(x) \end{aligned}$$

et donc en sommant on a bien

$$J_\lambda(\nu) \geq J_\lambda(G(\nu)) + \frac{1}{2} W_2^2(\nu, G(\nu)).$$

Pour le moment, on n'a considéré que le barycentre Wasserstein d'un nombre fini de mesures sur  $\mathbf{R}^d$ , généralisations importantes:

- population Wasserstein barycenter ou barycentre d'une proba plus générale sur  $(\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d), W_2)$ : Bigot et Klein, Loubes et Le Gouic (nous y reviendrons),
- barycentres Wasserstein sur une variété Riemannienne: Pass et Kim.

## Formulation multi-marges

Le problème (1) qui définit les barycentres peut-être reformulé comme un problème multi-marges avec coût quadratique similaire à celui résolu par Gangbo et Świąch 1998. Pour  $x := (x_1, \dots, x_N) \in (\mathbf{R}^d)^N$ , soit

$$T(x) := \sum_{i=1}^N \lambda_i x_i. \quad (4)$$

Considérons le problème multi-marges

$$\inf \left\{ \int_{\mathbf{R}^N} \left( \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} |x_i - T(x)|^2 \right) d\gamma(x_1, \dots, x_N), \gamma \in \Pi(\nu_1, \dots, \nu_N) \right\} \quad (5)$$

$\Pi(\nu_1, \dots, \nu_N)$  : probas sur  $(\mathbf{R}^d)^N$  ayant  $\nu_1, \dots, \nu_N$  comme marges.

Formulation équivalente de (5):

$$\sup \left\{ \int_{\mathbf{R}^N} \left( \sum_{1 \leq i < j \leq N} \lambda_i \lambda_j x_i \cdot x_j \right) d\gamma(x_1, \dots, x_N), \gamma \in \Pi(\nu_1, \dots, \nu_N) \right\} \quad (6)$$

dont le dual s'écrit

$$\inf \left\{ \sum_{i=1}^N \int_{\mathbf{R}^d} g_i(x_i) d\nu_i(x_i), \sum_{i=1}^N g_i(x_i) \geq \lambda_i \lambda_j x_i \cdot x_j \right\} \quad (7)$$

On peut minimiser sur les potentiels vérifiant en outre

$$g_i(x_i) = \sup_{(x_j)_{j \neq i}} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{1 \leq j \neq i \leq N} \lambda_i \lambda_j x_i \cdot x_j - \sum_{j \neq i} g_j(x_j) \right\}$$

qui sont en particulier convexes.

Gangbo et Świąch 1998 ont montré que les valeurs étaient les mêmes et qu'il existait des solutions pour le primal ( $\gamma$ ) et le dual ( $g_1, \dots, g_N$ ). Relation d'extrémalité

$$\sum_{i=1}^N g_i(x_i) = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq j \neq i \leq N} \lambda_i \lambda_j x_i \cdot x_j \quad \gamma\text{-p.p.}$$

En un point de différentiabilité de  $g_i$  (si  $\nu_i$  ne charge pas les ensembles petits,  $g_i$  est différentiable  $\nu_i$ -p.p.), on a donc

$$\nabla g_i(x_i) = \lambda_i \sum_{j \neq i} \lambda_j x_j.$$

En définissant le potentiel fortement convexe  $u_i$  par

$$u_i(x_i) = \frac{g_i(x_i)}{\lambda_i} + \frac{\lambda_i}{2}|x_i|^2$$

on a donc  $\gamma$ -p.p.

$$\nabla u_i(x_i) = \sum_{j=1}^N \lambda_j x_j = T(x)$$

De sorte que si aucun  $\nu_i$  ne charge les ensembles petits, on a

$$T(x) = \nabla u_1(x_1) = \nabla u_2(x_2) = \cdots = \nabla u_N(x_N)$$

ou encore

$$x_i = \nabla u_i^* \circ \nabla u_1(x_1), i = 1, \cdots, N,$$

(noter que  $\nabla u_i^*$  est  $\lambda_i^{-1}$  Lipschitz).

Résultat de Gangbo et Świąch,

**Théorème 2** *Soit  $\nu_i \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$  ne chargeant pas les ensembles petits, le problème multi-marges (6) possède une unique solution  $\gamma$  et celle-ci est de type Monge (portée par un graphe)*

$$\gamma = (\text{id}, T_2^1, \dots, T_N^1) \# \nu_1$$

*où  $T_i^1 = \nabla u_i^* \circ \nabla u_1$  et les potentiels fortement convexes  $u_i$  sont obtenus comme précédemment.*

Lien avec le barycentre:

**Théorème 3** *Soit  $\nu_i \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$  ne chargeant pas les ensembles petits, et soit  $T_i^1$  les transports optimaux multi-marges du théorème précédent alors le barycentre des  $\nu_i$  avec les poids  $\lambda_i > 0$  est donné par  $\mu = T_{\#} \gamma$  i.e.*

$$\mu = \left( \sum_{i=1}^N \lambda_i T_i^1 \right)_{\#} \nu_1 = \left( \lambda_1 \text{id} + \sum_{i=2}^N \lambda_i \nabla u_i^* \right)_{\#} (\nabla u_1 \# \nu_1).$$

Noter que  $T_i^1$  transporte  $\nu_1$  sur  $\nu_i$  mais ce n'est pas le transport de Brenier (il voit toutes les mesures) sauf en dimension 1.



## Conséquences immédiates

- $\text{spt}(\mu) \subset \sum_{i=1}^N \lambda_i \text{spt}(\nu_i)$ ,
- centre de masse du barycentre:

$$\int_{\mathbf{R}^d} x d\mu(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{\mathbf{R}^d} x d\nu_i(x)$$

(qui peut évidemment s'obtenir directement à partir du barycentre en optimisant sur les translations)

Implique aussi de l'intégrabilité comme nous le verrons ultérieurement.

Le problème multi-marges (5) est en grande dimension, il nous a fourni de la structure sur le barycentre mais n'est pas très commode à manipuler. Autre reformulation linéaire plus parcimonieuse, minimiser

$$\sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} |x_i - x|^2 d\gamma_i(x_i, x)$$

sous les contraintes:

- La première marge de  $\gamma_i$  est  $\nu_i$ ,
- La seconde marge de  $\gamma_i$  est indépendante de  $i$  (et c'est le barycentre à l'optimum).

## Exemples

### Le cas de la dimension 1

Soit  $\nu_1, \dots, \nu_N \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R})$  sans atome, cdf  $F_i$ , le transport optimal de  $\nu_1$  vers  $\nu_i$  est l'unique transport monotone de  $\nu_1$  vers  $\nu_i$  il est donné par  $T_i = F_i^{-1} \circ F_1$ , en dimension 1, on sait que les transports de Gangbo et de  $\nu_1$  vers  $\nu_i$  sont monotones, ce sont donc les  $T_i$  on a donc la formule pour le barycentre

$$\mu := \left( \sum_{i=1}^N F_i^{-1} \circ F_1 \right) \# \nu_1$$

formule qui ne se généralise pas à la dimension supérieure.

### Le cas de deux mesures $N = 2$

Petit changement de notations,  $\rho_0$  et  $\rho_1$ ,  $t \in (0, 1)$ , barycentre de  $(\rho_0, (1 - t))$  et  $(\rho_1, t)$  minimiseur de

$$\rho \mapsto J(\rho) := (1 - t)W_2^2(\rho_0, \rho) + tW_2^2(\rho_1, \rho)$$

Interpolation de McCann  $\rho_t := ((1 - t)\text{id} + t\nabla u)_\# \rho_0$  où  $\nabla u$  est le transport optimal de  $\rho_0$  vers  $\rho_1$  (si  $\rho_0$  charge les ensembles petits, on raisonne avec un plan optimal, juste plus lourd à écrire). On a  $W_2(\rho_0, \rho_t) = (1 - t)W_2(\rho_0, \rho_1)$  et  $W_2(\rho_t, \rho_1) = tW_2(\rho_0, \rho_1)$  et donc

$$J(\rho_t) = t(1 - t)W_2^2(\rho_0, \rho_1).$$

Soit  $\rho \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$ , quelconque,  $\gamma_0$  (respectivement  $\gamma_1$ ) plan optimal entre  $\rho_0$  (resp.  $\rho_1$ ) et  $\rho$ . On les désintègre par rapport à  $\rho$ :

$$\gamma_0(dx_0, dx) = \gamma_0^x(dx_0) \otimes \rho(dx), \quad \gamma_1(dx_1, dx) = \gamma_1^x(dx_1) \otimes \rho(dx)$$

et soit  $\gamma \in \Pi(\rho_0, \rho_1, \rho)$  défini par

$$\begin{aligned} & \int_{(\mathbf{R}^d)^3} f(x_0, x_1, x) d\gamma(x_0, x_1, x) \\ & := \int_{\mathbf{R}^d} \left( \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} f(x_0, x_1, x) \gamma_0^x(dx_0) \gamma_1^x(dx_1) \right) \rho(dx) \end{aligned}$$

pour tout  $f \in C_b((\mathbf{R}^d)^3)$ .

On a alors

$$\begin{aligned} J(\rho) &= \int_{(\mathbf{R}^d)^3} ((1-t)|x-x_0|^2 + t|x-x_1|^2) d\gamma(x_0, x_1, x) \\ &\geq \int_{(\mathbf{R}^d)^3} |x - ((1-t)x_0 + tx_1)|^2 d\gamma(x_0, x_1, x) \\ &\quad + t(1-t) \int_{(\mathbf{R}^d)^3} |x_1 - x_0|^2 d\gamma(x_0, x_1, x) \\ &\geq t(1-t)W_2^2(\rho_0, \rho_1) = J(\rho_t) \end{aligned}$$

donc l'interpolation de McCann  $\rho_t$  est le barycentre de  $\rho_0$  et  $\rho_1$  avec les poids  $(1-t)$  et  $t$ .

## Le cas gaussien

On suppose que les  $\nu_i$  sont des gaussiennes (centrées, sans perte de généralité) et de matrice de covariance  $\sigma_i$  dont l'une est inversible,  $\nu_i \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_i)$

**Théorème 4** *Le barycentre des  $\nu_i$  avec les poids  $\lambda_i$  est la gaussienne  $\mu = \mathcal{N}(0, S)$  où  $S$  est l'unique racine symétrique définie positive de l'équation matricielle*

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i \left( S^{1/2} \Sigma_i S^{1/2} \right)^{1/2} = S. \quad (8)$$

Le transport optimal de  $\mathcal{N}(0, S)$  vers  $\mathcal{N}(0, \Sigma_i)$  est linéaire donné par la matrice symétrique semi-définie positive

$$T_{S \rightarrow \sigma_i} = S^{-1/2} \left( S^{1/2} \Sigma_i S^{1/2} \right)^{1/2} S^{-1/2}$$

donc si  $S$  est solution de (8) on a

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i T_{S \rightarrow \sigma_i} = \text{id}$$

qui est une condition suffisante pour le barycentre, ceci donne en particulier l'unicité. Reste à montrer que (8) admet une racine positive. Première preuve (non constructive): Brouwer. Deuxième preuve, bien meilleure et constructive: Alvarez-Esteban et al (2016).



On se donne  $\Sigma$ , symétrique définie positive, on calcule les TO vers les  $\sigma_i$ , on interpole et on applique à  $S$ , cela donne une nouvelle gaussienne de covariance

$$G(\Sigma) = \Sigma^{-1/2} \left( \sum_{i=1}^N \lambda_i \left( \Sigma^{1/2} \Sigma_i \Sigma^{1/2} \right)^{1/2} \right)^2 \Sigma^{-1/2}$$

résoudre (8) c'est pareil que chercher un point fixe de  $G$ . On part de  $S_0$  définie positive et on itère

$$S_{n+1} = G(S_n), \quad n \geq 0.$$

Il se trouve que  $G$  a de très bonnes propriétés:

- compacité on a (au sens des matrices):

$$G(\Sigma) \leq \left( \max_{j=1, \dots, N} \lambda_{\max}(\Sigma_j) \right) \text{id}$$

- non-dégénérescence, concavité du déterminant à la puissance  $1/d$ :

$$\det(G(\Sigma))^{1/2d} \geq \sum_{i=1}^N \lambda_i (\det(\Sigma_i))^{1/2d}$$

- dissipation

$$J_\lambda(\mathcal{N}(0, \Sigma)) \geq J_\lambda(\mathcal{N}(0, G(\Sigma))) + \frac{1}{2} W_2^2(\mathcal{N}(0, \Sigma), \mathcal{N}(0, G(\Sigma))).$$

On en déduit qu'en sous-suite  $S_n$  converge vers un point fixe symétrique défini positif de  $G$ . L'équation (8) a donc une solution symétrique définie positive qui est le barycentre, et a posteriori toute la suite  $S_n$  converge vers le barycentre.

## Convexité, estimations intégrales

Soit  $\mu$  le barycentre des  $\nu_i \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$  (ne chargeant pas les ensembles petits) avec les poids  $\lambda_i$ , quelles estimations sur les  $\nu_i$  se transfèrent au barycentre? Convexité à la McCann. On a vu que  $\mu$  peut s'écrire sous la forme

$$\mu = \left( \sum_{i=1}^N \lambda_i T_i^1 \right) \# \nu_1$$

avec  $T_i^1$  un transport de  $\nu_1$  vers  $\nu_i$ .

En particulier, si  $V$  est convexe on a

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{R}^d} V(x) d\mu(x) &= \int_{\mathbf{R}^d} V\left(\sum_i \lambda_i T_i^1(x)\right) d\nu_1(x) \\ &\leq \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{\mathbf{R}^d} V(T_i^1(x)) d\nu_1(x) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{\mathbf{R}^d} V d\nu_i \end{aligned}$$

En particulier, on a des estimations sur les moments du barycentre à partir de ceux des sommets par cet argument de convexité. De la même manière

$$\int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} V(x-y) d\mu(x) d\mu(y) \leq \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} V(x-y) d\nu_i(x) d\nu_i(y)$$

ce qui donne des estimations sur la variance par exemple.

Noter qu'on n'a pas utilisé la structure:  $T_i^1$  de la forme  $\nabla u_i^* \circ \nabla u_1$  avec  $u_i$  fortement convexe, cette structure va servir pour obtenir des bornes intégrales.

Soit  $F : \mathbf{R}_+ \rightarrow \mathbf{R}$ ,  $F(0) = 0$  vérifiant la condition de McCann:

$$t \in (0, \infty) \mapsto t^d F(t^{-d}) \text{ convexe décroissante} \quad (9)$$

par exemple  $F(t) = t^p$ ,  $p > 1$  ou  $F(t) = t \log(t)$ . On a alors

**Théorème 5** *L'énergie interne associée à  $F$ :  $J_F$ :*

*$\nu \mapsto \int_{\mathbf{R}^d} F(\nu(x)) dx$  ( $+\infty$  si  $\nu \notin L^1$ ) est convexe le long des barycentres: si  $\mu$  est barycentre des  $\nu_i$  avec les poids  $\lambda_i$  vérifie*

$$J_F(\mu) \leq \sum_{i=1}^N \lambda_i J_F(\nu_i).$$

Rappelons que

$$\mu = \left( \sum_{i=1}^N \lambda_i \nabla u_i^* \right) \# \tilde{\nu}_1, \quad \tilde{\nu}_1 := \nabla u_1 \# \nu_1$$

supposons ces applications régulières (pas difficile de régulariser), posons aussi  $S_i = \nabla u_i^*$ ,  $S = \sum \lambda_i S_i$ ,  $S \# \tilde{\nu}_1 = \mu$ ,  
Monge-Ampère

$$\tilde{\nu}_1 = \mu(S) \det(DS)$$

Changement de variable

$$J_F(\mu) = \int_{\mathbf{R}^d} F(\mu \circ S) \det(DS) = \int_{\mathbf{R}^d} F\left(\frac{\tilde{\nu}_1}{\det(DS)}\right) \det(DS)$$

Or (Minkowski)

$$\det(DS)^{1/d} \geq \sum_{i=1}^d \lambda_i \det(DS_i)^{1/d}$$



La condition de McCann (monotonie) donne

$$F\left(\frac{\tilde{\nu}_1}{\det(DS)}\right) \det(DS) \leq$$

$$F\left(\frac{\tilde{\nu}_1}{\left(\sum_{i=1}^d \lambda_i \det(DS_i)^{1/d}\right)^d}\right) \left(\sum_{i=1}^d \lambda_i \det(DS_i)^{1/d}\right)^d$$

puis (convexité)

$$F\left(\frac{\tilde{\nu}_1}{\det(DS)}\right) \det(DS)$$

$$\leq \sum_{i=1}^N \lambda_i F\left(\frac{\tilde{\nu}_1}{\det(DS_i)}\right) \det(DS_i)$$

Et donc

$$\begin{aligned} J_F(\mu) &\leq \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{\mathbf{R}^d} F\left(\frac{\tilde{\nu}_1}{\det(DS_i)}\right) \det(DS_i) \\ &= \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{\mathbf{R}^d} F(\nu_i(x)) dx \end{aligned}$$

$$\text{car } S_i \# \tilde{\nu}_1 = (\nabla u_i^* \circ \nabla u_1) \# \nu_1 = T_i^1 \# \nu_1 = \nu_i.$$

**Corollaire 1** Si  $p \in (1, +\infty)$  et  $\nu_i \in L^p(\mathbf{R}^d)$  alors le barycentre  $\mu$  est aussi dans  $L^p$  et

$$\|\mu\|_{L^p(\mathbf{R}^d)}^p \leq \sum_{i=1}^N \lambda_i \|\nu_i\|_{L^p(\mathbf{R}^d)}^p$$

De même

$$\int_{\mathbf{R}^d} \mu \log(\mu) \leq \sum_{i=1}^N \lambda_i \int_{\mathbf{R}^d} \nu_i \log(\nu_i).$$

Evidemment si tous les  $\nu_i$  sont dans  $L^\infty$  il en est de même du barycentre, on a en fait un peu mieux

**Théorème 6** *Si  $\nu_1 \in L^\infty$  alors  $\mu \in L^\infty$  et*

$$\|\mu\|_{L^\infty} \leq \lambda_1^{-d} \|\nu_1\|_{L^\infty}.$$

On peut aussi atteindre le cas  $p = 1$ :

**Corollaire 2** *Si tous les  $\nu_i$  sont dans  $L^1$ , leur barycentre aussi.*

La famille  $\nu_1, \dots, \nu_N$  est uniformément intégrable, donc il existe une fonction convexe superlinéaire qui a une énergie interne finie sur tous les  $\nu_i$  on peut la modifier pour qu'elle vérifie la condition de McCann.

Bref, le barycentre de mesures à densité est lui même à densité et on a des estimations. Ce qui manque (vraiment) c'est une théorie de la régularité:

- Est ce que le fait que les  $\nu_i$  sont  $C^{0,\alpha}$  (plus des conditions sur le support, peut-être) entraine que le barycentre a une densité  $C^{0,\alpha}$ ?
- Est ce que le fait que les  $\nu_i$  sont  $C^{k,\alpha}$  entraine que le barycentre a une densité  $C^{k,\alpha}$ ?
- peut-on dériver par rapport aux données  $\nu_i, \lambda_i$ ? Même la lipschitziannité n'est pas si claire?

En revanche on sait que même pour deux mesures le fait d'avoir un support convexe ne passe pas au barycentre (Santambrogio et Wang).

## Calcul numérique

### Régularisation entropique

Résoudre un problème de transport optimal est généralement très coûteux, même pour des mesures empiriques, le problème approché en rajoutant  $\varepsilon$  fois une entropie:

$$\inf_{\gamma \in \Pi(\mu, \nu)} \langle c, \gamma \rangle + \varepsilon \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} \gamma \log \gamma$$

avec  $\varepsilon > 0$  et  $\mu$  et  $\nu$  d'entropie finie est beaucoup plus simple.

C'est un problème de projection pour la divergence de Kullback-Leibler

$$\inf_{\gamma \in \Pi(\mu, \nu)} \text{KL}(\gamma | \gamma^\varepsilon) := \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} \gamma \log \left( \frac{\gamma}{\gamma^\varepsilon} \right), \quad \gamma^\varepsilon = e^{-\frac{c}{\varepsilon}}.$$

Problème discret

$$\inf_{\gamma \in \Pi(\mu, \nu)} \sum_{ij} \gamma_{ij} \log \left( \frac{\gamma_{ij}}{\theta_{ij}} \right) \quad (10)$$

( $\theta_{ij} = \exp(-\varepsilon^{-1} c_{ij})$ ). Unique solution de la forme  $\gamma_{ij} = \theta_{ij} a_i b_j$  où les  $a_i$  et  $b_j$  sont telles que les contraintes de marges sont satisfaites (problème de Schrödinger discret):

$$a_i = \frac{\mu_i}{\sum_j b_j \theta_{ij}} := R_i(b), \quad b_j = \frac{\nu_j}{\sum_i a_i \theta_{ij}} := S_j(a)$$

problème de point fixe sur  $a$ : trouver  $a$  dans le cône positif tel que  $a = Ta$  (avec  $T = R \circ S$ ). Algorithme de Sinkhorn: itérer  $T$ .

Calculs complètement parallélisables, seulement  $2I$  coefficients à stocker à chaque étape. Idée ancienne, efficacité pour le transport optimal, lien avec l'algorithme de matrix scaling de Sinkhorn plus récente: Marco Cuturi. Convergence, métrique projective de Hilbert:

$$d_H(a, a') := \log \left( \frac{\max_i \frac{a_i}{a'_i}}{\min_i \frac{a_i}{a'_i}} \right), \quad (a, a') \in (0, +\infty)^N.$$

pour laquelle  $T$  est une contraction.



Autre point de vue; projections alternées

$$\inf_{\gamma \in C_1 \cap C_2} \sum_{ij} \gamma_{ij} \log \left( \frac{\gamma_{ij}}{\theta_{ij}} \right) \quad (11)$$

avec

$$C_1 := \left\{ \gamma : \sum_j \gamma_{ij} = \mu_i, \forall i \right\}, \quad C_2 := \left\{ \gamma : \sum_i \gamma_{ij} = \nu_j, \forall j \right\}$$

Les projections de  $\theta$  pour KL sur  $C_1$  et  $C_2$  sont totalement explicites:

$$\text{proj}_{C_1}^{\text{KL}}(\theta)_{ij} = \frac{\theta_{ij} \mu_i}{\sum_l \theta_{il}}, \quad \text{proj}_{C_2}^{\text{KL}}(\theta)_{ij} = \frac{\theta_{ij} \nu_j}{\sum_l \theta_{lj}},$$

Sinkhorn revient à faire des projection alternées (IPFP, Iterative Proportional Fitting Procedure):

$$C_{2n+1} = C_1, C_{2n} = C_2, \gamma^n = \text{proj}_{C_n}^{\text{KL}}(\gamma^{n-1}).$$

Méthodes des projections alternées s'adapte facilement aux problèmes multimarges, au transport partiel, aux barycentres au sens de  $W_2$  etc... Idée ancienne (remonte à Schrödinger), énorme littérature:

- En optimisation (Bregman, Bauschke, Combettes, Lewis, Cominetti, San-Martin...),
- En statistiques (Csiszar, Dykstra, Rüschendorf,...),
- en probas, analyse fonctionnelle, physique théorique (Schrödinger, Zambrini, Arnaudon, Léonard, Föllmer, Dai Pra, Mikami, Yahsue, Nussbaum, Borwein, Lewis...).

Barycentres pour  $W_2$ : étant données  $\nu_1, \dots, \nu_N \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$  et des poids positifs,  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ , problème d'interpolation:

$$\inf_{\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)} \sum_{i=1}^N \lambda_i W_2^2(\nu_i, \mu). \quad (12)$$

une solution = un barycentre (pour  $W_2$ ) des mesures  $\nu_i$  avec les poids  $\lambda_i$ .

Sinkhorn/IPFP pour les barycentres, formulation linéaire:

$$\inf_{\vec{\gamma}=(\gamma_1,\dots,\gamma_N)\in C_1\cap C_2} \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} \int_{\mathbf{R}^d \times \mathbf{R}^d} |x_i - x|^2 d\gamma_i(x_i, x)$$

avec

$$C_1 := \left\{ \vec{\gamma} : \pi_{1\#} \gamma_i = \nu_i, i = 1, \dots, N \right\}$$

et

$$C_2 := \left\{ \vec{\gamma} : \pi_{2\#} \gamma_1 = \dots = \pi_{2\#} \gamma_N \right\}$$

Régularisation,  $\varepsilon > 0$ ,  $\gamma_i^\varepsilon(x_i, x) = \exp(-\frac{1}{\varepsilon}|x_i - x|^2)$ ,

$$\inf_{\vec{\gamma}=(\gamma_1, \dots, \gamma_N) \in C_1 \cap C_2} \text{KL}_\lambda(\vec{\gamma} | \vec{\gamma}^\varepsilon) := \sum_{i=1}^N \lambda_i \text{KL}(\gamma_i | \gamma_i^\varepsilon)$$

dont la solution est

$$\text{proj}_{C_1 \cap C_2}^{\text{KL}_\lambda}(\vec{\gamma}^\varepsilon)$$

projections alternées, on part de  $\vec{\gamma}^0 = \vec{\gamma}^\varepsilon$ ,

$$C_{2n+1} = C_1, C_{2n} = C_2, \vec{\gamma}^n = \text{proj}_{C_n}^{\text{KL}_\lambda}(\vec{\gamma}^{n-1}).$$

La projection sur  $C_1$  est explicite (scaling comme dans Sinkhorn):

$$\vec{\gamma} = \text{proj}_{C_1}^{\text{KL}^\lambda}(\vec{\theta})$$

donné par

$$\gamma_i(x_i, x) = \frac{\theta_i(x_i, x)\nu_i(x_i)}{\int_{\mathbf{R}^d} \theta_i(x_i, x)dx}.$$

Pour la projection sur  $C_2$ , la condition d'optimalité pour

$$\vec{\gamma} = \text{proj}_{C_2}^{\text{KL}^\lambda}(\vec{\theta})$$

est que

$$\lambda_i \ln \left( \frac{\gamma_i(x_i, x)}{\theta_i(x_i, x)} \right) = f_i(x)$$

avec

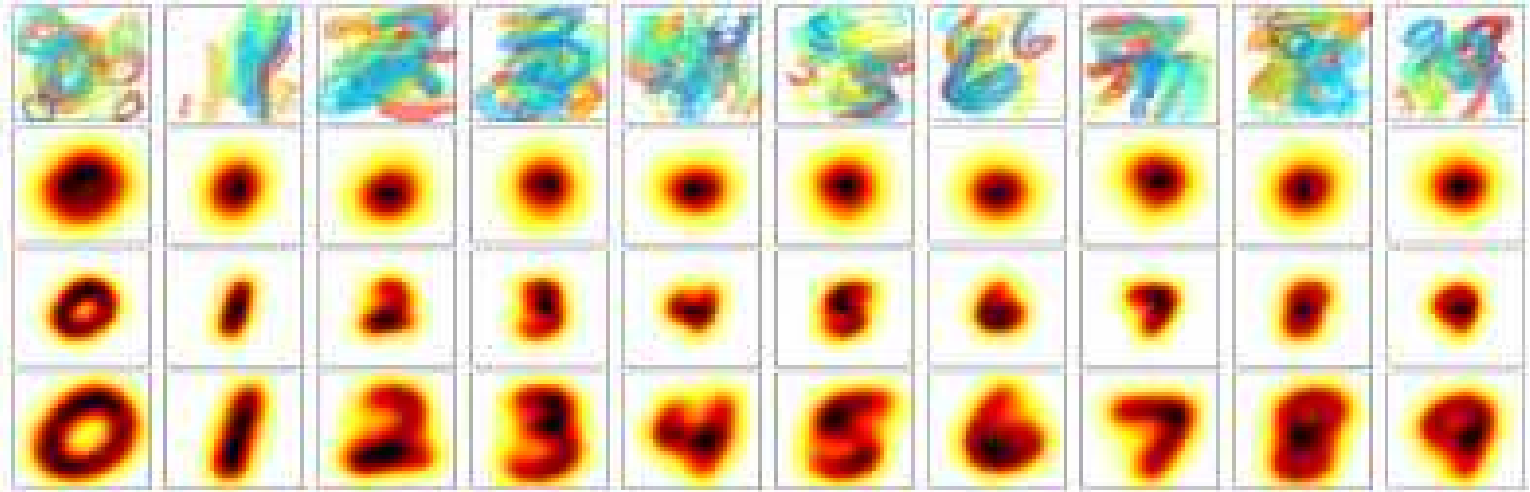
$$\sum_{i=1}^N f_i(x) = 0$$

Avec la contrainte de marge commune cela donne

$$\gamma_i(x_i, x) = \frac{\theta_i(x_i, x)}{\int_{\mathbf{R}^d} \theta_i(y, x) dy} \prod_{k=1}^N \left( \int_{\mathbf{R}^d} \theta_k(x_k, x) dx_k \right)^{\lambda_i}$$

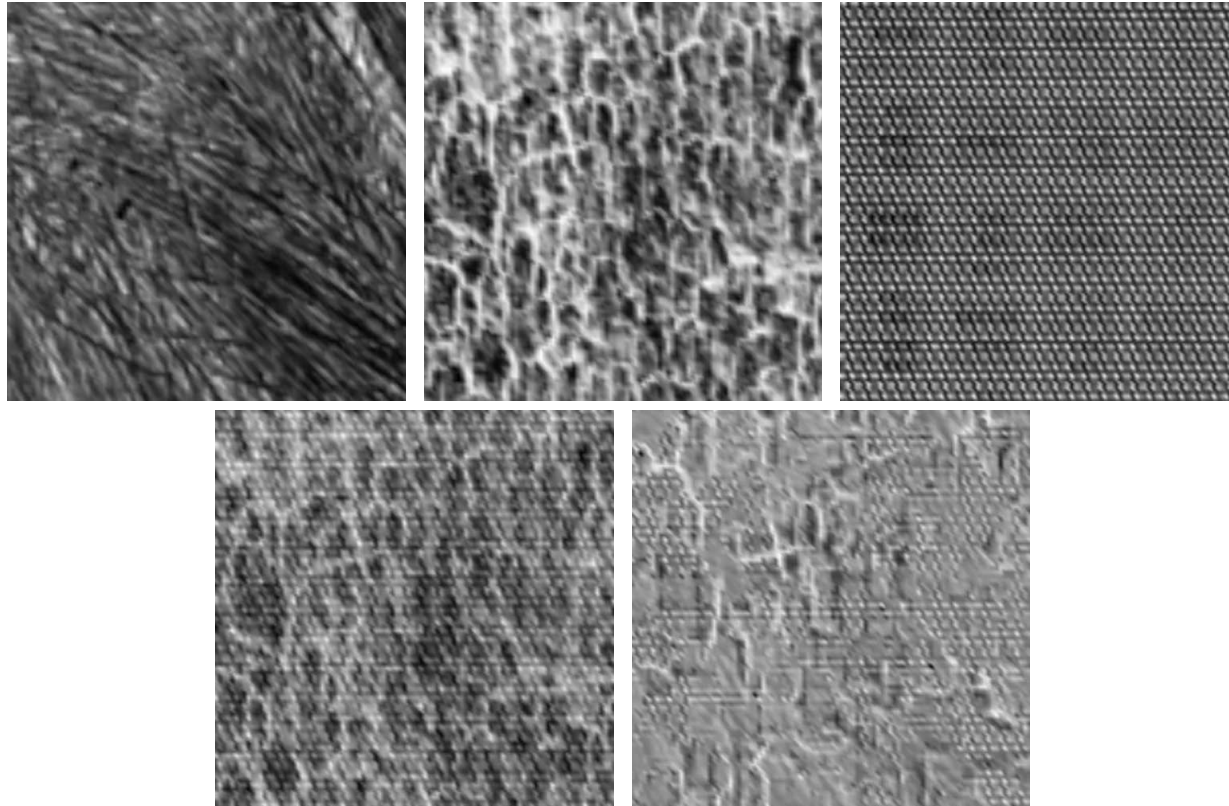
Comprendre que dans ces formules on est en discret, calculs parallélisables, itérations explicites et très simples. Convergence dans le cas discret (Bregman).

Calcul de barycentres par Sinkhorn (Cuturi, Doucet):





Synthèse de textures (version non régularisée, TO semi-discret, C., Oberman, Oudet)



## Propriétés asymptotiques

Notion de barycentre Wasserstein pour une mesure de proba  $m$  assez générale sur l'espace de Wasserstein: Bigot-Klein et Loubes-Le Gouic.

Un barycentre Wasserstein de  $m$  est alors un minimiseur de la fonctionnelle de variance:

$$J_m(\mu) := \int_{\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)} W_2^2(\nu, \mu) dm(\nu). \quad (13)$$

L'hypothèse

$$\int_{\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)} \left( \int_{\mathbf{R}^d} |x|^2 d\nu(x) \right) dm(\nu) < +\infty$$

assure l'existence d'un tel minimiseur.

L'unicité est assurée dès que  $m$  donne une proba strictement positive aux mesures ne chargeant pas les ensembles petits.

Notation  $\bar{\mu} = \text{bar}(m)$ . On supposera dorénavant en outre qu'il existe  $p \in (1, +\infty)$  et  $C > 0$  tels que  $C > 0$  tel que

$$\int_{\mathbf{R}^d} |x|^2 d\nu(x) \leq C \text{ pour } m\text{-preque tout } \nu, \quad (14)$$

et

$$\int_{\mathbf{R}^d} \nu(x)^p dx \leq C \text{ pour } m\text{-preque tout } \nu. \quad (15)$$

Ce qui assure que  $\bar{\mu} = \text{bar}(m)$  a une densité  $L^p$  et

$$\|\bar{\mu}\|_{L^p}^p \leq C, \quad \int_{\mathbf{R}^d} |x|^2 d\bar{\mu}(x) \leq C.$$

Suivant Bigot et Klein, considérons maintenant un échantillon i.i.d. de mesures aléatoires de probabilité  $\hat{\nu}_1, \dots, \hat{\nu}_n$  tirées selon  $m$  sur  $\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$ , le barycentre de Wasserstein empirique de cet échantillon est la mesure aléatoire (p.s. bien définie puisque  $m$  est portée par les mesures qui ne chargent pas les ensembles petits)

$$\hat{\mu}_n := \text{bar} \left( \hat{\nu}_1, \frac{1}{n}, \dots, \hat{\nu}_n, \frac{1}{n} \right). \quad (16)$$

Bigot et Klein ont établi, dans un cadre à support compact, une loi des grands nombres, étendue par Le Gouic et Loubes à des cas plus généraux, pour le barycentre Wasserstein empirique:

**Théorème 7** (*Bigot et Klein, Loubes et Le Gouic*) *Sous les hypothèses (14) et (15), on a*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) \rightarrow 0 \text{ p.s.}, \text{ avec } \bar{\mu} := \text{bar}(m). \quad (17)$$

En effet, par la LGN, la fonctionnelle de variance empirique converge p.s. vers la vraie fonctionnelle de variance  $J_m$ , l'unicité, la stabilité et des estimations qui donnent de la compacité fournissent le résultat.

Comme, grâce à (15) à la fois  $\bar{\mu} := \text{bar}(m)$  et  $\hat{\mu}_n$  sont  $L^p$ , il existe un unique transport optimal entre le vrai barycentre  $\bar{\mu}$  et le barycentre empirique  $\hat{\mu}_n$ , notons  $\hat{T}_n := T_{\bar{\mu} \rightarrow \hat{\mu}_n}$  ce transport optimal que l'on doit comprendre comme une variable aléatoire prenant ses valeurs dans l'espace de Hilbert séparable  $L^2(\bar{\mu}, \mathbf{R}^d)$ . On a  $W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) = \|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2$ , avec (14) et on a  $W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) \leq 2C$ , de sorte qu'avec (17) et le théorème de convergence dominée de Lebesgue, on a

$$\|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2 \rightarrow 0 \text{ p.s. et } \mathbf{E}\left(\|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2\right) \rightarrow 0. \quad (18)$$

Naturel de chercher à aller un ordre plus loin dans la convergence au travers d'un TLC. La LGN de Bigot et Klein énonce que  $\hat{T}_n$  converge p.s. et en moyenne quadratique vers l'identité dans  $L^2(\bar{\mu})$ , il semble raisonnable de conjecturer une normalité asymptotique de  $\sqrt{n}(\hat{T}_n - \text{id})$  au moins pour certaines classes de mesures  $m$ . Une stratégie naturelle consiste à essayer de dériver les conditions d'optimalité par rapport à la mesure pour appliquer un théorème d'inversion locale. Cela semble néanmoins délicat, même dans le cas d'une mesure  $m$  discrète car la condition d'optimalité caractérisant le barycentre prend la forme d'un problème d'obstacle pour un système d'équations de Monge-Ampère, l'aspect frontière libre du problème compliquant significativement l'analyse..

Par définition, nous dirons que le TLC dans l'espace de Wasserstein est satisfait si  $\sqrt{n}(\hat{T}_n - \text{id})$  converge en loi (dans le Hilbert séparable  $L^2(\bar{\mu}, \mathbf{R}^d)$ ) vers une mesure gaussienne centrée  $\mathcal{N}(0, \Sigma)$  pour un certain opérateur auto-adjoint positif de trace finie  $\Sigma$  sur  $L^2(\bar{\mu}, \mathbf{R}^d)$ .

Noter que c'est une question plus académique que vraiment pratique... Avec Martial Agueh, nous avons démontré la validité du TLC Wasserstein dans quelques cas (très très) particuliers.



**Théorème 8** *Le TLC dans l'espace de Wasserstein est satisfait dans les cas suivants:*

1. *lorsque  $m$  est une loi de Bernoulli,  $m = (1 - \lambda)\delta_{\nu_0} + \lambda\delta_{\nu_1}$  avec  $\lambda \in (0, 1)$ ,  $\nu_0, \nu_1$  dans  $\mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$  et  $\nu_0$  ne chargeant pas les ensembles petits,*
2. *lorsque  $d = 1$  et que  $m$  est portée par les mesures non-atomiques et vérifie (14),*
3. *lorsque  $m = \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta_{\nu_i}$  où chaque  $\nu_i$  est une gaussienne non dégénérée.*

**Le cas Bernouilli:** Pour deux mesures,  $\nu_0$  et  $\nu_1$ , le transport optimal de Brenier  $T_{\nu_0 \rightarrow \nu_1}$  entre  $\nu_0$  et  $\nu_1$  dérive d'un potentiel convexe  $\phi$ ,  $T_{\nu_0 \rightarrow \nu_1} = \nabla \phi$ , pour  $t \in [0, 1]$ , le barycentre de  $(1 - t)\delta_{\nu_0} + t\delta_{\nu_1}$  coïncide avec l'interpolation de McCann:

$$\nu(t) := \text{bar}((1-t)\delta_{\nu_0} + t\delta_{\nu_1}) = \nabla \phi_{t\#} \nu_0 \text{ avec } \phi_t := (1-t)\frac{1}{2}|x|^2 + t\phi,$$

(observer que  $\nabla \phi_t$  a pour inverse  $\nabla \phi_t^*$  qui est Lipschitz dès que  $t \in [0, 1)$ ). D'autre part, il est facile de voir que le transport optimal entre deux points  $\nu(t)$  et  $\nu(s)$  de la géodésique, avec  $s, t$  dans  $[0, 1]$  et  $s \neq 1$  est donné par

$$T_{\nu(s) \rightarrow \nu(t)} = \text{id} + \frac{t - s}{1 - s} (\nabla \phi \circ \nabla \phi_s^* - \text{id}).$$

En particulier, le transport optimal  $\hat{T}_n$  entre  $\text{bar}(m) = \nu(\lambda)$  et le barycentre empirique  $\hat{\mu}_n = \nu(\hat{\lambda}_n)$  (ici  $\hat{\lambda}_n$  désigne la fréquence empirique d'apparition de  $\nu_1$  dans l'échantillon  $\hat{\nu}_1, \dots, \hat{\nu}_n$ ) satisfait

$$\sqrt{n}(\hat{T}_n - \text{id}) = \frac{\sqrt{n}(\hat{\lambda}_n - \lambda)}{(1 - \lambda)} (\nabla \phi \circ \nabla \phi_\lambda^* - \text{id})$$

et on conclut avec le TLC standard pour  $\sqrt{n}(\hat{\lambda}_n - \lambda)$ .

**Le cas unidimensionnel:** le barycentre d'une mesure  $m$  portée par les mesures non-atomiques est non-atomique et donné par la formule explicite

$$\text{bar}(m) := \left( \int_{\mathcal{P}_2(\mathbf{R})} T_{\rho \rightarrow \nu} dm(\nu) \right)_{\#} \rho, \quad (19)$$

où  $\rho$  est *n'importe quelle* mesure non-atomique et  $T_{\rho \rightarrow \nu}$  l'unique transport croissant de  $\rho$  vers  $\nu$ . En prenant  $\rho := \text{bar}(m)$  et en appliquant la formule précédente au barycentre empirique  $\hat{\mu}_n$ , il vient que le transport optimal (i.e. croissant) de  $\text{bar}(m)$  vers  $\hat{\mu}_n$  est

$$\hat{T}_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T_{\text{bar}(m) \rightarrow \hat{\nu}_i} \quad (20)$$

Et comme les variables aléatoires à valeurs dans  $L^2(\text{bar}(m))$ ,  $T_{\text{bar}(m) \rightarrow \hat{\nu}_i}$  sont i.i.d. et de carré intégrable par (14), le TLC usuel dans les espaces de Hilbert séparables (voir par exemple Giné et Leòn, 1980) permet de conclure.

**Le cas gaussien** supposons que les  $\nu_i$  sont des gaussiennes centrées et notons  $S_i = K_i^2$  leur matrice de variance covariance.

Le point important ici est que si

$\alpha \in \Delta_N := \{(\alpha_1, \dots, \alpha_N) \in \mathbf{R}_+^N ; \sum_{i=1}^N \alpha_i = 1\}$  alors

$\nu(\alpha) := \text{bar}(\sum_{i=1}^N \alpha_i \delta_{\nu_i})$  est elle même une gaussienne centrée dont la matrice de variance-covariance  $S(\alpha)$  est l'unique racine dans  $\mathcal{S}_d^{++}$  de l'équation matricielle:

$$I = \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi_i(S) \text{ où } \Phi_i(S) := K_i (K_i S K_i)^{-\frac{1}{2}} K_i. \quad (21)$$

Par le lemme 1 ci-dessous, l'application  $\alpha \in \Delta_N \mapsto S(\alpha) \in \mathcal{S}_d^{++}$  est  $C^\infty$ . Le vrai barycentre  $\text{bar}(\nu_1, \lambda_1 \dots, \nu_N, \lambda_N)$  est la mesure gaussienne centrée de variance-covariance  $S(\lambda)$  tandis que le barycentre empirique  $\hat{\mu}_n$  est la mesure gaussienne centrée de variance-covariance  $S(\hat{\lambda}_n)$  où  $\hat{\lambda}_n$  est le vecteur des fréquences empiriques:

$$(\hat{\lambda}_n)_i = \frac{1}{n} \#\{j = 1 \dots, n : \hat{\nu}_j = \nu_i\}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (22)$$

Le TLC implique que  $\sqrt{n}(\hat{\lambda}_n - \lambda)$  converge en loi vers  $\mathcal{N}(0, \sigma)$  ( $\sigma_{ij} := \lambda_i \delta_{ij} - \lambda_i \lambda_j$ ).

Il est bien connu que le transport optimal entre les gaussiennes centrées de variance covariance  $S(\lambda)$  et  $S(\hat{\lambda})$  est linéaire et explicitement donné en fonction de  $\hat{\lambda}$  par

$$T(\hat{\lambda}) = S(\hat{\lambda})^{\frac{1}{2}} (S(\hat{\lambda})^{\frac{1}{2}} S(\lambda) S(\hat{\lambda})^{\frac{1}{2}})^{-\frac{1}{2}} S(\hat{\lambda})^{\frac{1}{2}}$$

c'est encore une application  $C^\infty$  de  $\hat{\lambda} \in \Delta_N$  dans  $\mathcal{S}_d^{++}$  et évidemment  $T(\lambda) = \text{id}$ . Avec une inégalité d'accroissements finis, il vient

$$\begin{aligned} \hat{T}_n &= T(\hat{\lambda}_n) = \text{id} + T'(\lambda)(\hat{\lambda}_n - \lambda) + \varepsilon_n, \\ |\varepsilon_n| &\leq |\hat{\lambda}_n - \lambda| \sup_{\theta \in [\lambda, \hat{\lambda}_n]} |T'(\theta) - T'(\lambda)|, \end{aligned}$$

de sorte que

$$\sqrt{n}(\hat{T}_n - \text{id}) = T'(\lambda)\sqrt{n}(\hat{\lambda}_n - \lambda) + \sqrt{n}\varepsilon_n.$$



Ce qui par des arguments classiques (la *méthode delta*) permet aisément de conclure que  $\sqrt{n}(\hat{T}_n - \text{id})$  converge en loi vers une distribution gaussienne centrée et de variance-covariance  $T'(\lambda)\sigma T'(\lambda)$ .

Nous avons utilisé ci-dessus le résultat suivant

**Lemme 1** *L'application  $\alpha \in \Delta_N \mapsto S(\alpha) \in \mathcal{S}_d^{++}$  définie implicitement par l'équation (21) est de classe  $C^\infty$ .*

Grâce au théorème des fonctions implicites, il suffit de montrer que pour  $S \in \mathcal{S}_d^{++}$ ,  $\sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi'_i(S)$  est inversible. Pour  $\theta \in \mathcal{S}_d$ ,  $L_i := \Phi'_i(S)(\theta) \in \mathcal{S}_d$  est la solution unique de

$$\begin{aligned} -K_i^{-1} S^{-1} \theta S^{-1} K_i^{-1} &= (K_i S K_i)^{-\frac{1}{2}} K_i^{-1} L_i K_i^{-1} \\ &\quad + K_i^{-1} L_i K_i^{-1} (K_i S K_i)^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Définissant

$$\tilde{L}_i := K_i^{-1} L_i K_i^{-1}, \quad \tilde{S}_i := K_i S K_i, \quad \tilde{\theta}_i := K_i \theta K_i,$$

il est commode de réécrire cette expression sous la forme plus concise

$$-\tilde{S}_i^{-1} \tilde{\theta}_i \tilde{S}_i^{-1} = \tilde{S}_i^{-\frac{1}{2}} \tilde{L}_i + \tilde{L}_i \tilde{S}_i^{-\frac{1}{2}}. \quad (23)$$

Supposons que  $\theta \in \mathcal{S}_d$  soit dans le noyau de  $\sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi'_i(S)$  i.e.  $\sum_{i=1}^N \alpha_i L_i = 0$ , il vient donc avec (23) et quelques manipulations élémentaires

$$0 = \sum_{i=1}^N \alpha_i \operatorname{tr}(L_i \theta) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \operatorname{tr}(\tilde{L}_i \tilde{\theta}_i) = -2 \sum_{i=1}^N \alpha_i \operatorname{tr}(\tilde{S}_i^{\frac{1}{2}} \tilde{L}_i \tilde{S}_i^{\frac{1}{2}} \tilde{L}_i \tilde{S}_i^{\frac{1}{2}}) \quad (24)$$

et comme  $\tilde{S}_i^{\frac{1}{2}} \tilde{L}_i \tilde{S}_i^{\frac{1}{2}} \tilde{L}_i \tilde{S}_i^{\frac{1}{2}} \in \mathcal{S}_d^+$ , chaque terme de cette somme est nul de sorte que pour  $\alpha_i > 0$  comme  $\tilde{S}_i \in \mathcal{S}_d^{++}$  on a  $\tilde{L}_i = 0$  et donc  $\tilde{\theta}_i = 0$  si bien que  $\theta = 0$ , ce qui montre l'inversibilité cherchée.

## EDPs pour le barycentre régularisé

Bigot, Caselles et Papadakis, 2016, pour des mesures quelconques le(s) barycentre(s) peu(ven)t être irréguliers et ont donc proposé une famille de régularisation pour lesquels ils ont obtenu des résultats de stabilité quantitative (en distance de Bregman). On peut voir ça comme un système d'EDPs non-linéaires mais elliptique et régulier.

Soit  $r \in (0, +\infty)$ ,  $\nu_1, \dots, \nu_N \in \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^d)$ ,  $\text{spt}(\nu_i) \subset B_r$  et  $\varepsilon > 0$ ,  
barycentre régularisé:

$$\inf_{\mu \in \mathcal{P}_2(B_r) \cap L^1(B_r)} \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{2} W_2^2(\nu_i, \mu) + \varepsilon \int_{B_r} \mu(x) \log(\mu(x)) dx. \quad (25)$$

On a alors

**Proposition 2** *Le problème (25) admet une solution unique  $\mu_\varepsilon$ : barycentre régularisé.*

L'entropie ayant horreur du vide on a

**Lemme 2**  $\mu_\varepsilon > 0$  p.p. sur  $B_r$ .

Conséquence: unicité des potentiels et donc  $\mu \mapsto W_2^2(\nu_i, \mu)$  est Gâteaux-dérivable en  $\mu = \mu_\varepsilon$  et sa dérivée est donnée par le potentiel de Kantorovich  $\psi_i^\varepsilon$ , de sorte que le potentiel

$$u_i^\varepsilon(x) := \frac{1}{2}|x|^2 - \varphi_i^\varepsilon(x)$$

est convexe et  $\nabla u_i^\varepsilon \# \mu^\varepsilon = \nu_i$ . L'équation d'Euler-Lagrange de (25) s'écrit donc

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i \varphi_i^\varepsilon + \varepsilon \log(\mu_\varepsilon) = 0.$$

Ou encore

$$\mu^\varepsilon(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}|x|^2 + \sum_{i=1}^N \lambda_i u_i^\varepsilon(x)\right) \quad (26)$$

Ce qui donne de la régularité:

**Théorème 9** *Le barycentre régularisé  $\mu_\varepsilon$  a une densité partout positive, localement Lipschitzienne et son gradient est  $BV_{loc}$  (autrement dit, la Hessienne de  $\mu_\varepsilon$  au sens des distributions est une matrice de mesures). En outre  $\mu_\varepsilon$  est totalement caractérisée par (26) et le fait que  $\nabla u_i^\varepsilon$  est le transport optimal de  $\mu_\varepsilon$  vers  $\nu_i$ .*

Si  $r < +\infty$  et  $\nu_i$  a une densité régulière:  $\nu_i \in C^{0,\alpha}$ ,  $\nu_i > 0$  alors la théorie de Caffarelli implique que  $u_i^\varepsilon \in C^{2,\alpha}$  et donc  $\mu_\varepsilon \in C^{2,\alpha}$  et on peut itérer:

**Théorème 10** *Si  $r < +\infty$  et  $\nu_i > 0$  sur  $B_r$  on a:*

- $\nu_i \in C^{0,\alpha} \Rightarrow \mu_\varepsilon \in C^{2,\alpha}$ ,
- $\nu_i \in C^{k,\alpha} \Rightarrow \mu_\varepsilon \in C^{k+2,\alpha}$ .

On a aussi l'inversibilité (quantifiée) de  $[D^2 u_i^\varepsilon]^{-1}$ .



Beaucoup de régularité en  $x$  mais surtout la structure est claire:  $\mu_\varepsilon$  est donnée par (26) et une CNS est que les potentiels convexes  $u_i^\varepsilon$  résolvent le système

$$\det(D^2 u_i^\varepsilon) \nu_i(\nabla u_i^\varepsilon) = \exp\left(-\frac{1}{2}|x|^2 + \sum_{j=1}^N \lambda_j u_j^\varepsilon(x)\right), \quad \forall i \quad (27)$$

(et aussi que  $\nabla u_i^\varepsilon$  envoie  $B_r$  sur elle même, ce sont les conditions aux limites habituelles pour le TO)

La linéarisation de (27) est un système elliptique non dégénérée, avec une argument de fonctions implicites on obtient alors que

**Théorème 11** *Le barycentre régularisé dépend de manière lisse des données  $\nu_i$  (dans un espace de Hölder) et  $\lambda_i$ .*

Et donc aussi

**Corollaire 3** *Le barycentre régularisé obéit à un TLC.*

Malheureusement, les estimées explosent quand  $\varepsilon \rightarrow 0$  même (semble-t-il) quand les  $\nu_i$  sont très régulières.

## Références

### Références générales sur le transport optimal

- L. Ambrosio, N. Gigli, G. Savaré, *Gradient Flows: In Metric Spaces and in the Space of Probability*, Lectures in Mathematics, ETH, 2005.
- S. Rachev, L. Rüschendorf, *Mass Transportation Problems*, Vol. I: Theory, Vol. II: Applications, Springer, 1998.
- F. Santambrogio, *Optimal transport for applied mathematicians*, Birkhauser, 2015.
- C. Villani, *Topics in Optimal Transportation*, AMS, 2003.
- C. Villani, *Optimal Transport: Old and New*, Springer, 2009.

## Sur les barycentres

- M. Agueh, G. Carlier, *Barycenters in the Wasserstein space*, SIMA, 2011.
- M. Agueh, G. Carlier, *Vers un TLC dans l'espace de Wasserstein?*, CRAS, 2017.
- P. C. Alvarez-Esteban, E. del Barrio, J. A. Cuesta-Albertos, C. Matran *A fixed-point approach to barycenters in Wasserstein space*,
- M. Bernot, J. Rabin, J. Delon, G. Peyré, *Wasserstein barycenter and its application to texture mixing*, SSVM 2011.

- E. Boissard, T. Le Gouic, J.-M. Loubes, *Distribution's template estimate with Wasserstein metrics*, Bernoulli, 2015.
- J. Bigot, T. Klein, *Characterization of barycenters in the Wasserstein space by averaging optimal transport maps*, JMAA, 2016.
- J. Bigot, E. Cazelles, N. Papadakis, *Regularization of barycenters in the Wasserstein space*, 2016.
- G. Carlier, A. Oberman, E. Oudet, *Numerical methods for matching for teams and Wasserstein barycenters*, M2AN, 2015.

- T. Le Gouic, J.M Loubes, *Existence and Consistency of Wasserstein Barycenters*, PTRF, 2017.
- B. Pass, Y.-H. Kim, *Wasserstein Barycenters over Riemannian manifolds*, Adv. Math, 2017.
- B. Pass, Y.-H. Kim, *Nonpositive curvature, the variance functional, and the Wasserstein barycenter*, 2015.

Sur des problèmes multi-marges très reliés

- G. Carlier, I. Ekeland *Matching for teams*, Econ. Theory, 2009.
- W. Gangbo, A. Święch, *Optimal Maps for the Multidimensional Monge-Kantorovich Problem*, CPAM, 1998.

### Sur la régularisation entropique

- J.-D. Benamou, G. Carlier, M. Cuturi, L. Nenna, G. Peyré *Iterative Bregman projections for regularized transportation problems*, SISC, 2015
- M. Cuturi, *Sinkhorn Distances: Lightspeed Computation of Optimal Transportation Distances*, Advances in Neural Information Processing Systems, 2013.
- M. Cuturi, A. Doucet, *Fast computation of wasserstein barycenters*, JMLR, 2014.
- A. Galichon, B. Salanié, *Cupid's Invisible Hand: Social Surplus and Identification in Matching Models*, 2009.