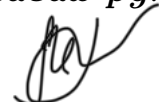


Автономная некоммерческая образовательная организация высшего
образования «Сколковский институт науки и технологий»

На правах рукописи



Газдиева Милена Джамбулатовна

**Параметрические методы вычисления обобщенных
оптимальных транспортных отображений и барицентров**

Специальность 1.2.2. —

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, Профессор
Бурнаев Евгений Владимирович

Москва — 2026

Содержание

Введение	5
Глава 1. Постановка задач исследования	15
1.1 Вычисление несбалансированных оптимальных транспортных отображений	16
1.2 Вычисление полунесбалансированного ОТ барицентра	20
1.3 Вычисление получастичных ОТ отображений	21
Глава 2. Метод вычисления несбалансированных оптимальных транспортных отображений	23
2.1 Введение	23
2.2 Предварительные сведения о несбалансированном энтропийном оптимальном транспорте	25
2.3 Обзор существующих методов	29
2.4 Лёгкий несбалансированный неминимаксный метод	31
2.4.1 Вывод целевой функции оптимизации	31
2.4.2 Параметризация и процедура оптимизации	33
2.4.3 Связь с предшествующими работами, близкими по тематике	34
2.4.4 Оценки обобщающей способности и свойство универсальной аппроксимации	35
2.5 Доказательства теоретических результатов	37
2.5.1 Доказательство теоремы 2.4.1	37
2.5.2 Доказательство предложения 2.4.2	40
2.5.3 Доказательство теоремы 2.4.3	41
2.6 Вычислительные эксперименты	52
2.6.1 Эксперименты со смесью гауссовских распределений	52
2.6.2 Иллюстрация устойчивости к выбросам	55
2.6.3 Непарный перевод изображений	55
2.6.4 Абляционное исследование параметров в экспериментах по переводу изображений	60
2.7 Технические детали экспериментов	66
2.7.1 Общие детали	66

2.7.2	Детали эксперимента со смесями гауссовских распределений	66
2.7.3	Детали эксперимента по переводу изображений	66
2.8	Обсуждение	68

Глава 3. Метод вычисления полунесбалансированных

	оптимальных транспортных барицентров	69
3.1	Введение	69
3.2	Предварительные сведения	71
3.2.1	Оптимальный транспорт	72
3.2.2	Полунесбалансированный оптимальный транспортный барицентр	74
3.2.3	Вычислительная постановка	75
3.3	Обзор существующих методов	76
3.4	Предложенный метод	77
3.4.1	Вывод целевой функции оптимизации	77
3.4.2	Параметризация и практическая процедура оптимизации .	80
3.5	Доказательства теоретических результатов	82
3.5.1	Доказательства Теоремы 3.4.1 и Следствия 3.4.1.1	82
3.5.2	Доказательство Теоремы 3.4.2	86
3.5.3	Доказательство Теоремы 3.4.3	88
3.6	Эксперименты	94
3.6.1	Оценивание барицентра на синтетических наборах данных	94
3.6.2	Вычисление барицентра, устойчивого к выбросам и дисбалансу классов в данных	96
3.6.3	Эксперимент форма-цвет	99
3.6.4	Сбалансированный ОТ барицентр гауссовских распределений	101
3.6.5	Полунесбалансированный ОТ барицентр гауссовских распределений	103
3.6.6	Манипулирование изображениями с помощью интерполяции распределений изображений на многообразии	105
3.7	Детали экспериментов	107
3.7.1	Описание экспериментов на модельных данных	107
3.7.2	Эксперименты со StyleGAN	110

3.7.3	Эксперименты с интерполяцией распределений изображений на многообразии изображений	111
3.8	Обсуждение	112
Глава 4. Метод вычисления (полу)частичных оптимальных транспортных отображений		
4.1	Введение	113
4.2	Предварительные сведения об оптимальном транспорте	115
4.3	Основные результаты главы	117
4.3.1	Задача неполного транспорта	117
4.3.2	Вычислительный алгоритм для неполного транспорта	119
4.4	Обзор существующих методов	121
4.5	Эксперименты	123
4.5.1	Модельные 2D эксперименты	123
4.5.2	Непарный перевод изображений	124
4.5.3	Модельные 2D иллюстрации других методов	127
4.5.4	Связь и сравнение с дискретными методами частичного ОТ129	
4.5.5	Сравнение с другими методами перевода изображений	132
4.6	Дополнительные экспериментальные результаты	138
4.6.1	Перцептивная стоимость	138
4.6.2	Большие значения весового параметра	140
4.6.3	Дополнительные результаты для ℓ^2 стоимости	141
4.7	Детали экспериментов	142
4.8	Ограничения метода	143
4.9	Потенциальное влияние	146
4.10	Доказательства теоретических результатов	147
Заключение		155
Публикации автора по теме диссертации		157
Список литературы		158
Список рисунков		172
Список таблиц		175

Введение

В диссертации представлен ряд новых численных методов, относящихся к области генеративного моделирования, цель которого заключается в построении математических моделей, описывающих закономерности данных и позволяющих синтезировать новые данные на их основе. Рассматривается специальный класс задач генеративного моделирования, в которых по заданному элементу из одного множества объектов требуется сгенерировать объект из другого множества, максимально сохраняющий выбранные характеристики исходного. К известным примерам таких прикладных задач относятся задачи сверхразрешения и переноса стиля изображений, где множества объектов обозначают два класса изображений, а выбранные характеристики могут отражать содержание (контент) изображения. Таким образом, задача сводится к тому, чтобы для изображения одного класса создать (сгенерировать) изображение другого класса, которое максимально сохраняет содержание исходного. В последние годы для решения задач генеративного моделирования, в том числе указанных задач преобразования данных, стали активно применяться численные методы на основе математической теории оптимального транспорта (ОТ) [1–5]. Настоящая работа посвящена разработке новых численных методов ОТ, устраняющих ряд недостатков существующих методов и расширяющих область их применимости.

Оптимальный транспорт (ОТ) представляет собой совокупность математических задач, направленных на нахождение наиболее эффективного способа переноса массы между вероятностными распределениями, который называется ОТ отображением или ОТ планом в зависимости от постановки математической задачи. Основы данной теории были заложены в работах советского математика и экономиста Леонида Витальевича Канторовича [6] в контексте решения прикладных задач поиска оптимального плана перевозки грузов и распределения ресурсов. Исторически большинство численных методов ОТ было ориентировано на работу с дискретными вероятностными распределениями [7; 8], то есть распределениями с дискретным носителем. Такие методы, как правило, позволяют найти сопоставление между элементами конечных выборок, однако в задачах генеративного моделирования и преобразования данных требуется не только сопоставить элементы выборок, но и

построить правило преобразования, применимое к новым объектам. Дискретные методы ОТ сами по себе не дают такого обобщаемого правила преобразования.

В контексте генеративного моделирования первые численные методы ОТ применялись преимущественно для вычисления функций потерь при обучении генеративных моделей на основе нейросетей [9; 10]. В последние годы стали активно развиваться методы ОТ, основанные на том, что многие прикладные задачи генеративного моделирования могут быть сформулированы как задачи ОТ между непрерывными распределениями. При этом предполагается, что сами распределения неизвестны и заданы только выборками, по которым требуется построить решение задачи ОТ. Такие методы используют выразительную параметризацию транспортных отображений, например, на основе глубоких нейросетей [5; 11; 12], и обычно называются *непрерывными* или *параметрическими* методами ОТ. В этом контексте вычисление ОТ рассматривается как обучение параметрической модели.

Непрерывные методы ОТ [13] продемонстрировали определенные успехи в решении ряда практических задач генеративного моделирования, в частности, в задаче адаптации моделей к данным, поступающим из других источников. Данная задача важна в областях, где объёмы выборок ограничены и возникает необходимость объединения информации из различных источников, например в медицине, и может быть решена с использованием ОТ отображений или барицентров [14; 15] — специальных операций усреднения в пространстве распределений, применяемых для агрегации данных [16].

Однако, существующие непрерывные методы ОТ обладают значительными ограничениями, снижающими их эффективность в описанных выше задачах генеративного моделирования. В частности, такие методы чувствительны к неточностям в исходных данных, таким как *выбросы*, которые могут приводить к отклонениям вычисленных решений задачи ОТ от тех, которые были бы получены в условиях идеальных данных. Причина состоит в том, что указанные методы решают задачу ОТ в классической формулировке [6], накладывающей жесткое условие равенства на исходное и сгенерированное распределения, что может приводить к нежелательному переносу массы к аномальным точкам. Как следствие, данные методы не способны обеспечивать точные приближения решений задачи ОТ при работе с реальными данными, содержащими различного рода неточности.

Для преодоления этих ограничений все большее внимание уделяется методам, основанным на обобщенных формулировках ОТ, которые ослабляют упомянутое выше *условие равенства*, а именно на задачах частичного и несбалансированного ОТ [17; 18]. В задаче частичного ОТ [19] требование равенства заменяется неравенством. Таким образом, данная формулировка допускает частичный перенос массы между вероятностными распределениями. В несбалансированном ОТ [20] строгое условие сохранения массы заменяется регуляризационными штрафами, то есть рассматривается перенос массы между распределениями, которые близки к исходным, но не обязаны совпадать с ними. В результате практическая применимость непрерывных методов обобщенного ОТ [21] существенно расширяется, поскольку такие методы позволяют эффективно работать с реальными данными, страдающими от различного рода неточностей.

Однако несмотря на активное развитие вычислительных непрерывных методов обобщенного ОТ, ряд важных направлений исследований в данной области остается недостаточно изученным. Существующие параметрические методы несбалансированного ОТ, применимые к непрерывным распределениям, можно условно разделить на две группы: минимаксные подходы [21; 22], использующие несколько нейронных сетей, и методы, основанные на использовании дискретных решений задачи несбалансированного ОТ при построении модели [23; 24]. Минимаксные методы, как правило, подкреплены теоретическими гарантиями их сходимости, однако требуют решения задачи поиска седловой точки и настройки большого числа параметров нейронных сетей, вследствие чего процесс оптимизации на практике может быть нестабильным и вычислительно затратным, что существенно усложняет применение таких методов. В то же время, методы, основанные на использовании дискретных решений задачи несбалансированного ОТ, лишены указанной проблемы, однако не подкреплены строгими теоретическими гарантиями качества или корректности работы. Поэтому их способность предоставлять осмысленные приближения истинных решений задачи несбалансированного ОТ между непрерывными распределениями остается открытым вопросом.

Между тем параметрические методы, позволяющие находить решения задачи несбалансированного ОТ барицентра, а также параметрические методы частичного ОТ, в настоящее время отсутствуют. Существующие методы решения задачи несбалансированного ОТ барицентра [18] или частичного ОТ [25; 26] либо ориентированы на работу с дискретными распределениями и, следовательно,

обладают всеми соответствующими ограничениями, описанными выше, либо применимы лишь к специальным классам непрерывных распределений [27].

Таким образом, актуальной задачей является разработка новых параметрических методов решения задачи несбалансированного ОТ, не требующих неустойчивой минимаксной оптимизации и обладающих строгими теоретическими гарантиями эффективности. Кроме того, необходима разработка масштабируемых численных методов, которые позволят находить решения задач несбалансированного ОТ барицентра и частичного ОТ.

Одной из ключевых математических задач является аналитический вывод двойственной формулировки для несбалансированного оптимального транспорта, позволяющей вычислять несбалансированные транспортные отображения с использованием легкой параметризации и без необходимости решения минимаксных задач. Другие связанные задачи включают аналитический вывод двойственных формулировок для задач несбалансированного ОТ барицентра и частичного оптимального транспорта, позволяющих вычислять соответствующие отображения с использованием выразительных параметризаций, например, нейронных сетей. Важными подзадачами являются получение теоретических результатов, устанавливающих связь между точностью нахождения оптимума двойственных функционалов и ошибкой аппроксимации решений прямых транспортных задач. Разработка теоретически обоснованных параметрических методов вычисления обобщенного оптимального транспорта позволит эффективно применять их к задачам из реального мира, которые, как правило, страдают от неточностей в доступных данных.

Целью диссертации является разработка математических моделей, основанных на нейросетях или легкой параметризации, для решения задач непрерывного обобщенного ОТ: вычисления несбалансированных транспортных отображений между непрерывными вероятностными распределениями, нахождения несбалансированных ОТ барицентров семейства непрерывных распределений и вычисления частичных транспортных отображений между вероятностными распределениями. В соответствии с поставленной целью в работе были определены и решены следующие **задачи**:

1. Разработать численный метод, основанный на двойственной формулировке задачи несбалансированного оптимального транспорта, для вычисления оптимального отображения между непрерывными распределениями с параметризацией посредством смесей гауссовых

- распределений; вывести теоретические оценки, устанавливающие связь между ошибками аппроксимации решений предложенных двойственной и прямой задач; получить теоретическую верхнюю оценку статистической ошибки для предложенной двойственной задачи.
2. Разработать численный метод, основанный на двойственной формулировке задачи несбалансированного оптимального транспорта, для вычисления (полу)несбалансированных ОТ барицентров семейства непрерывных вероятностных распределений с использованием нейронных сетей; вывести теоретические оценки, устанавливающие связь между ошибками аппроксимации решений предложенных двойственной и прямой задач.
 3. Разработать численный метод, основанный на двойственной формулировке (полу)частичной задачи оптимального транспорта, для вычисления оптимального отображения между непрерывными распределениями с использованием нейронных сетей.

Научная новизна:

1. Впервые предложен теоретически обоснованный метод вычисления несбалансированных транспортных отображений между непрерывными распределениями, который является одноэтапным, не требует сложной минимаксной оптимизации и использует легкую параметризацию. Метод основан на новой идее применения специальной замены переменных в двойственной формулировке задачи несбалансированного оптимального транспорта и параметризации с помощью смесей гауссовых распределений. В отличие от существующих неминимаксных методов, основанных на решениях дискретной задачи несбалансированного ОТ, разработанный подход имеет строгие теоретические гарантии.
2. Впервые предложен масштабируемый и теоретически обоснованный метод вычисления (полу)несбалансированного ОТ барицентра для семейства непрерывных распределений. Метод основан на введении нового регуляризатора, обеспечивающего m -конгруэнтность решений двойственной задачи, и использовании нейронных сетей. Данный подход является первым методом, позволяющим вычислять несбалансированные ОТ барицентры для непрерывных распределений. Ранее эффективные численные методы вычисления несбалансированных

ОТ барицентров в пространствах высокой размерности не существовали, все известные подходы рассматривали только дискретный случай.

3. Впервые предложен масштабируемый и теоретически обоснованный метод вычисления (полу)частичных транспортных отображений между непрерывными распределениями. Данный метод является первым подходом, позволяющим вычислять (полу)частичные транспортные отображения для непрерывных распределений. Ранее эффективные численные методы решения (полу)частичных задач оптимального транспорта в высокоразмерных пространствах отсутствовали, все существующие подходы рассматривали только дискретный случай.

Теоретическая значимость. Разработанные подходы, основанные на численных методах обобщенного (несбалансированного и частичного) ОТ, позволяют эффективно решать ряд задач математического моделирования, для которых ранее не существовало альтернативных решений или существующие методы имели критические ограничения. А именно:

- Предложенный метод вычисления несбалансированных транспортных отображений позволяет устранять ограничения предыдущих подходов, такие как необходимость минимаксной оптимизации или отсутствие строгих теоретических обоснований;
- Предложенные подходы к вычислению несбалансированных барицентров и частичных транспортных отображений с использованием нейронных сетей являются первыми методами данного типа, применимыми к случаю непрерывных распределений.

Предложенные подходы позволяют проводить строгий теоретический анализ получаемых решений. Например, они дают возможность выводить оценки для статистических ошибок, характеризующих влияние конечного размера выборок на качество решений.

Практическая значимость работы заключается в том, что предложенные подходы математического моделирования, основанные на численных методах обобщенного ОТ, обладают широким спектром потенциальных приложений в прикладных областях. Например, разработанные методы несбалансированного и частичного ОТ протестированы в задачах преобразования синтетических и модельных данных и могут быть использованы в таких задачах компьютерного зрения, как обучение моделей для сверхразрешения и переноса стиля изображений. Другие области применения

данных подходов связаны с задачами в области одноклеточной биологии, например, сопоставлением несогласованных распределений клеток на различных стадиях лечения онкологических заболеваний. Кроме того, разработанный метод вычисления несбалансированного ОТ барицентра имеет потенциал применения в задачах агрегации данных. Возможные приложения включают объединение данных, поступающих с МРТ-сканеров различных клиник, или данных геологических симуляторов, моделирующих различные аспекты строения подземных пластов. Такая агрегация может повысить эффективность моделей сегментации или классификации, построенных на этих данных.

Методология и методы исследования. Для решения поставленных в работе задач применяются методы теории несбалансированного и частичного ОТ, позволяющие аналитически выводить двойственные формулировки обобщенных задач ОТ и устанавливать связи между решениями прямых и двойственных задач. Теоретическое обоснование разработанных подходов опирается на методы теории вероятностей, теории меры, статистики, линейной алгебры, функционального и выпуклого анализа, позволяющие исследовать свойства предложенных оптимизационных функционалов, связи между решениями прямых и двойственных задач или выводить оценки для статистических ошибок.

Важную роль в исследовании играют подходы машинного и глубинного обучения, используемые для параметризации функций, аппроксимирующих минимизаторы предложенных функционалов, посредством смесей гауссовских распределений или нейросетей. Для построения практических алгоритмов решения задач обобщенного ОТ применяются методы стохастической оптимизации. Практическая реализация и тестирование предложенных методов осуществлялись с использованием языка программирования Python и фреймворка PyTorch глубинного обучения. Оценка качества экспериментальных результатов выполнялась количественными и качественными методами, стандартными для области генеративного машинного обучения.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработан неминимаксный алгоритм вычисления несбалансированных оптимальных транспортных отображений между непрерывными распределениями, основанный на использовании смесей гауссовых распределений для параметризации потенциалов в двойственной задаче. Выведены теоретические оценки, устанавливающие связь между ошибкой минимизации разработанного функционала оптимизации и

- ошибкой решения исходной задачи несбалансированного оптимального транспорта. Выведена теоретическая верхняя граница статистической ошибки для разработанного функционала оптимизации.
2. Разработан алгоритм вычисления (полу)несбалансированных ОТ барицентров для семейства непрерывных вероятностных распределений, основанный на использовании нейронных сетей и условия m -конгруэнтности двойственных переменных задачи несбалансированного барицентра. Выведены теоретические оценки, устанавливающие связь между ошибкой минимизации разработанного функционала оптимизации и ошибкой решения исходной задачи несбалансированного ОТ барицентра.
 3. Разработан алгоритм вычисления (полу)частичных транспортных отображений между непрерывными распределениями, основанный на использовании нейронных сетей.

Полученные результаты соответствуют следующим пунктам паспорта специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: **п.1** «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений», **п.2** «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий» и **п.3** «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.»

Достоверность полученных результатов обеспечивается корректным применением теории обобщенного ОТ и связанных с ней апробированных математических инструментов, а также строгим доказательством всех теоретических результатов. Предложенные алгоритмы протестированы на множестве синтетических и реальных данных. Подробные протоколы и открытый исходный код обеспечивают воспроизводимость экспериментов.

Разработанные численные методы и алгоритмы реализованы в виде комплекса проблемно-ориентированных программ для решения задач обобщенного ОТ. Комплекс обеспечивает обучение параметрических моделей, построение несбалансированных и (полу)частичных ОТ отображений и (полу)несбалансированных ОТ барицентров, а также оценку полученных решений. Программный код исследования публично доступен в репозитории автора на GitHub: <https://github.com/milenagazdieva>.

Все результаты, выносимые на защиту, опубликованы в рецензируемых научных журналах и трудах ведущих международных конференций.

Публикации. Список публикаций автора приведен в конце диссертации. Основные результаты по теме диссертации изложены в **5** работах [A1-A5], включая **2** работы в изданиях из списка ВАК и приравненных к ним, из которых **1** опубликована в международном журнале уровня **SJR rank Q1** и индексируется в базе данных **Scopus**. Другие **3** работы опубликованы в трудах ведущих международных конференций уровня **Core rank A*** и также индексируются в **Scopus**.

Апробация. Результаты диссертационной работы были представлены на **3** ведущих международных научных конференциях уровня **Core A***:

1. The Thirty-seventh Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2023, **Core A***), 2023, Новый Орлеан, США;
2. The Thirty-eighth Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2024, **Core A***), 2024, Ванкувер, Канада;
3. The Thirteenth International Conference on Learning Representations (ICLR 2025, **Core A***), 2025, Сингапур.

Кроме того, результаты диссертационной работы были представлены на следующих **8** научных семинарах, лекциях и локальных конференциях:

- Семинар института AIRI, 2023, Москва, Россия;
- Конференция Fall into ML в НИУ ВШЭ, 2023, Москва, Россия;
- Семинар института AIRI, 2024, Москва, Россия;
- Конференция Fall into ML в НИУ ВШЭ, 2024, Москва, Россия;
- Конференция DataFest в Яндексе, 2025, Москва, Россия;
- Конференция Fall into ML в НИУ ВШЭ, 2025, Москва, Россия;
- Лекция в Beijing Institute of Mathematical Sciences and Applications, 2025, Пекин, Китай;
- Научный семинар лаборатории LARSS Сколковского Института Науки и Технологий, 2025, Москва, Россия.

Часть результатов диссертационной работы, а именно разработанный алгоритм вычисления частичных транспортных отображений, прошла апробацию и была внедрена в платформу для мониторинга и прогнозирования природных катастроф на территории Российской Федерации. Данная платформа разработана Центром искусственного интеллекта Сколковского института науки и технологий, в котором работает автор. Кроме того, за преподавание курсов

по генеративным моделям, основанных в том числе на научных результатах данной диссертации, соискатель в 2025 году была удостоена премии Yandex ML Prize от компании Яндекс в номинации "Начинающие преподаватели".

Интерес автора диссертации к рассматриваемой тематике начался с работы [A1], в которой исследовалось применение различных подходов глубинного обучения к задаче сверхразрешения (SR) изображений в условиях несогласованных обучающих данных. В ходе исследования было показано, что многие нейросетевые алгоритмы для сверхразрешения могут быть интерпретированы как методы решения задачи несбалансированного оптимального транспорта. Дальнейшие исследования были посвящены углубленному изучению несбалансированного и частичного (т.е. обобщенного) ОТ, а ключевые результаты, составляющие основу диссертации, были получены в работах [A3-A5]. Кроме того, в статье [A2] был проведен сравнительный анализ методов классического ОТ и разработанных методов обобщенного ОТ.

Личный вклад. Все результаты, выносимые на защиту, получены лично автором. Все алгоритмы и теоретические результаты, опубликованные в работах [A3-A5] и представленные в диссертации, разработаны и доказаны автором диссертации. Диссертация включает также результаты совместной работы: экспериментальное тестирование метода вычисления полунесбалансированного ОТ барицентра [A4] выполнено в сотрудничестве с соавтором Дж. Чои; автор диссертации разработала подход для вычисления получастичных транспортных отображений [A5], осуществила его предварительную реализацию и протестировала метод при различных параметрах, тогда как Д. Селиханович адаптировал данный подход для сравнения с альтернативными методами. Все ключевые эксперименты в работах [A1, A3] выполнены автором диссертации; вспомогательные эксперименты в этих работах проведены соавторами А. Асадулаевым, Л. Роут и А. Коротиним. Теоретические результаты, представленные в статье [A1], получены в соавторстве с П. Мокровым и А. Коротиним. Анализ методов в статье [A2] проведен автором диссертации.

Замечание. Диссертационная работа выполнена автором в автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий».

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 176 страниц, включая 38 рисунков и 39 таблиц. Библиография состоит из 152 наименований.

Глава 1. Постановка задач исследования

Данная глава предоставляет общий обзор основных задач, рассматриваемых в диссертации: вычисление несбалансированных ОТ отображений (**задача 1**), вычисление (полу)несбалансированных ОТ барицентров (**задача 2**) и вычисление (полу)частичных ОТ отображений (**задача 3**). Ниже приведены математические формулировки задач, а также краткое обсуждение ограничений существующих подходов.

Для общности изложения задачи диссертации формулируются в предположении, что рассматриваемые пространства являются польскими пространствами. На практике, как правило, используются евклидовы пространства или их подмножества; детали предположений по каждой из задач приводятся в последующих главах работы.

Далее D -мерное евклидово пространство обозначается как $(\mathbb{R}^D, \|\cdot\|)$, где $\|\cdot\|$ обозначает евклидову норму; общие польские пространства обозначаются как $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$, $(\mathcal{Y}, \|\cdot\|_{\mathcal{Y}})$. Множество $\mathcal{P}_2(\mathcal{X})$ обозначает множество вероятностных мер на $\mathcal{X}$ с конечными вторыми моментами. Кроме того, множество $\mathcal{M}_{2,+}(\mathcal{X})$ обозначает неотрицательные меры на $\mathcal{X}$ с конечными вторыми моментами. Пространство всех *непрерывных* функций на $\mathcal{X}$ обозначается как $\mathcal{C}(\mathcal{X})$. Для заданной меры $\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ ее полная масса обозначается как $\|\gamma\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} d\gamma(x, y)$, ее маргиналы обозначаются как γ_x, γ_y . Кроме того, $\gamma(\cdot|x)$ обозначает условную *вероятностную* меру. Мы используем $\bar{f}$ для обозначения сопряженной по Фенхелю функции f : $\bar{f}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{u \in \mathbb{R}} \{ut - f(u)\}$; $\mathbb{I}_A$ — для обозначения выпуклого индикатора множества A , т.е. $\mathbb{I}_A(x) = 0$, если $x \in A$; $\mathbb{I}_A(x) = +\infty$, если $x \notin A$. Образ распределения $\mathbb{P} \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^D)$ при действии измеримого отображения $T : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}^D$ обозначается как $T\#\mathbb{P}$.

Для *положительных* мер $\mu_1, \mu_2 \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathcal{X})$ и полунепрерывной снизу функции $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ f -дивергенция между μ_1, μ_2 определяется как

$$D_f(\mu_1 \|\mu_2) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{X}} f\left(\frac{d\mu_1}{d\mu_2}(x)\right) d\mu_2(x), \text{ если } \mu_1 \ll \mu_2, \text{ и } +\infty \text{ иначе.} \quad (1.1)$$

Для *положительной* меры $\mu \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^D)$ ее энтропия [28] задается как

$$H(\mu) \stackrel{\text{def}}{=} -\int_{\mathbb{R}^D} \mu(x) \log \mu(x) dx + \|\mu\|_1, \text{ если } \mu \text{ абсолютно непр., } -\infty \text{ иначе.} \quad (1.2)$$

1.1 Вычисление несбалансированных оптимальных транспортных отображений

В этом разделе приведены определения классических задач ОТ и их несбалансированных обобщений, а также дана постановка **задачи 1**.

Для вероятностных мер $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ задача оптимального транспорта формулируется как

$$\text{OT}_c(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\pi \in \Pi(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y), \quad (1.3)$$

где $c : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывная функция стоимости, а $\Pi(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ обозначает множество транспортных планов, то есть вероятностных мер на $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ с маргиналами $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$. Минимизатор π^* задачи (1.3) называется оптимальным транспортным планом, а соответствующее минимальное значение (1.3) — оптимальной транспортной стоимостью. При выполнении слабых предположений относительно распределений $\mathbb{P}$, $\mathbb{Q}$ и функции стоимости оптимальный план π^* всегда существует, но не всегда является единственным [29]. Уравнение (1.3) обычно называется *формулировкой Канторовича* задачи оптимального транспорта, см. рис. 1.1б. Широко используемый пример задачи ОТ (1.3) для $\mathcal{X} = \mathcal{Y} = \mathbb{R}^D$ — это расстояние Васерштейна второго порядка ($\mathbb{W}_2$), то есть задача ОТ при $c(x, y) = \|x - y\|_2^2$.

Если оптимальный транспортный план имеет вид $\pi^* = [\text{id}_{\mathcal{X}}, T^*]_{\#} \mathbb{P}$ для некоторого измеримого отображения $T^* : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, то T^* называется ОТ отображением из $\mathbb{P}$ в $\mathbb{Q}$, и задача ОТ (1.3) принимает вид

$$\text{OT}_c(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{T_{\#} \mathbb{P} = \mathbb{Q}} \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mathbb{P}(x), \quad (1.4)$$

где инфимум берется по всем измеримым $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, переносящим $\mathbb{P}$ в $\mathbb{Q}$ (транспортным отображениям), см. рис. 1.1а. Такая *детерминированная* формулировка ОТ (1.4) называется *задачей Монжа*. В некоторых случаях задача (1.4) может не иметь минимизатора T^* , поэтому часто рассматривается формулировка Канторовича. При этом ОТ план π^* определяет отображение $T^* : x \mapsto \pi^*(\cdot \mid x)$, которое в общем случае является стохастическим. Между тем, для обеспечения выпуклости задачи и гарантии единственности решения часто рассматривается энтропийная формулировка оптимального транспорта

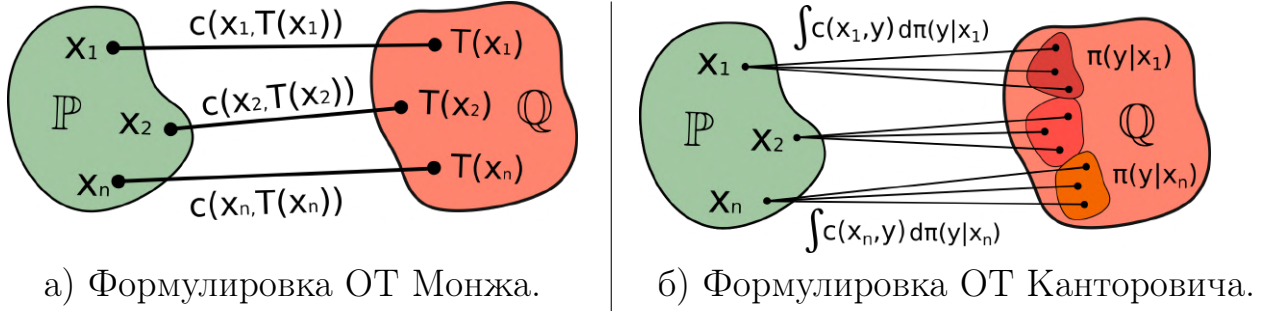


Рис. 1.1 — Классические формулировки оптимального транспорта (ОТ).

(entropy-regularized optimal transport, EOT), в которой к функционалу (1.3) добавляется дополнительный энтропийный регуляризатор $-\epsilon H(\pi)$.

Классические формулировки оптимального транспорта предполагают, что вся вероятностная масса распределения $\mathbb{P}$ переносится в $\mathbb{Q}$. Однако во многих реальных сценариях распределения содержат выбросы или прочие неточности, которые следует игнорировать. Таким образом, возникает необходимость рассмотрения формулировок ОТ, предоставляющих транспортные планы, устойчивые к неточностям в данных.

Задача 1 (Вычисление несбалансированного оптимального транспорта). Для пары вероятностных распределений $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ задача несбалансированного ОТ (unbalanced optimal transport, UOT) задается как

$$UOT_{c,\psi,\varphi}(\mathbb{P},\mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\gamma \in \mathcal{M}_+(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x,y) d\gamma(x,y) + D_\psi(\gamma_x \| \mathbb{P}) + D_\varphi(\gamma_y \| \mathbb{Q}), \quad (1.5)$$

где $c(x,y) \in \mathcal{C}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ — непрерывная функция стоимости, а D_ψ и D_φ — это f -дивергенции на пространствах $\mathcal{X}$ и $\mathcal{Y}$ соответственно, см. рис. 1.2а.

Решение задачи (1.5) соответствует нахождению меры $\gamma^* \in \mathcal{M}_+(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, которая доставляет минимум в этой задаче. Такая мера называется UOT планом, а соответствующее минимальное значение (1.5) — стоимостью UOT. При этом UOT план γ^* определяет стохастическое или детерминистическое отображение $T^* : x \mapsto \gamma^*(\cdot | x)$, называемое UOT отображением.

Формулировка UOT (1.5) представляет собой обобщение классической задачи ОТ (1.3). Когда функции φ и ψ являются выпуклыми индикаторами множества $\{1\}$, то есть при $\varphi(x) = \psi(x) = \mathbb{I}_{x=1}$, f -дивергенции $D_\psi(\gamma_x \| \mathbb{P})$ и $D_\varphi(\gamma_y \| \mathbb{Q})$ вырождаются в бесконечность, если $\mathbb{P} \neq \gamma_x$ или $\mathbb{Q} \neq \gamma_y$, и равны нулю в противном случае. Таким образом, в данном частном случае задача (1.5) сводится к классической задаче оптимального транспорта (ОТ) (1.3). Если

$\varphi(x) = \mathbb{I}_{x=1}$, то в UOT задаче фиксируется второй маргинал плана $\gamma_y = \mathbb{Q}$ и она называется задачей полунесбалансированного оптимального транспорта (semi-unbalanced optimal transport, SUOT). Аналогично случаю классической задачи OT, задача несбалансированного *энтропийного* оптимального транспорта (UEOT) может быть получена добавлением энтропийного регуляризатора $-\varepsilon H(\gamma)$ к функционалу (1.5). Отметим, что хотя ниже рассматриваются основные свойства задачи UOT, в целом эти свойства выполняются и для задачи UEOT.

Формулировка (1.5) задачи несбалансированного оптимального транспорта представляет собой оптимизацию (возможно, нелинейного) функционала от γ в пространстве неотрицательных мер на $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$. Заметим, что для пар $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$ общего вида аналитические решения (1.5) неизвестны, а решение данной оптимизационной задачи на практике вычислительно затруднено ввиду нетривиальных членов дивергенции.

Для **дискретных** распределений $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$ с конечным носителем задача обычно решается методами линейного программирования или их регуляризованными вариантами, что приводит к итерационным матричным алгоритмам [30]. В то же время, при работе с **непрерывными** распределениями, доступными лишь через выборки, дискретные методы теряют эффективность, поскольку построение требуемых точных дискретизаций распределений становится вычислительно неосуществимым [31].

Далее мы приведем краткий обзор основных существующих методов решения задачи несбалансированного OT (1.5) для непрерывных распределений $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$ и выделим их ключевые ограничения, устраняемые в настоящей работе. Прежде всего, многие современные методы, направленные на решение задачи UOT для непрерывных распределений, по-прежнему используют дискретные решения при построении своих алгоритмов [23; 24; 32]. Однако теоретическая обоснованность решений таких методов, основанных на решениях задач дискретного OT, остается недостаточно изученной.

Существующие непрерывные методы UOT основаны на решении двойственной задачи к (1.5) и последующем восстановлении UOT отображения T^* (детерминированного или стохастического) по оцененным двойственным переменным. Для $\mathbb{P} \in \mathcal{P}_2(\mathcal{X})$, $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}_2(\mathcal{Y})$ двойственная **формулировка** задачи UOT имеет следующий вид [28; 33]:

$$\text{UOT}_{c,\psi,\varphi}(\mathbb{P},\mathbb{Q}) = \sup_{g \oplus f \leq c(\cdot,\cdot)} \left\{ -\int_{\mathcal{X}} \bar{\psi}(-g(x)) d\mathbb{P}(x) - \int_{\mathcal{Y}} \bar{\varphi}(-f(y)) d\mathbb{Q}(y) \right\}, \quad (1.6)$$

где супремум берется по $\mathbb{P}$ -интегрируемым функциям $g : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ и $\mathbb{Q}$ -интегрируемым $f : \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ таким, что $\forall x \in \mathcal{X}, y \in \mathcal{Y} : g(x) + f(y) \leq c(x, y)$. Эти функции обычно называются *потенциалами*.

Кроме того, существует альтернативная к (1.6) *полудвойственная формулировка* UOT задачи:

$$\text{UOT}_{c,\psi,\varphi}(\mathbb{P},\mathbb{Q}) = \sup_{f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})} \left\{ - \int_{\mathcal{X}} \overline{\psi}(-f^c(x)) d\mathbb{P}(x) - \int_{\mathcal{Y}} \overline{\varphi}(-f(y)) d\mathbb{Q}(y) \right\}, \quad (1.7)$$

где супремум берется по непрерывным функциям (потенциалам) f , а $f^c(x)$ обозначает *c-преобразование*: $f^c(x) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{y \in \mathcal{Y}} (c(x, y) - f(y))$. При этом для оптимального потенциала f^* и UOT-плана γ^* выполняется $\text{supp } \gamma^*(\cdot | x) \subseteq \arg \min_{y \in \mathcal{Y}} (c(x, y) - f^*(y))$ для γ_x^* -почти всех x . При стандартных предположениях, обеспечивающих единственность и детерминированность γ^* , это позволяет восстановить UOT отображение $T^*(x) = \arg \min_{y \in \mathcal{Y}} (c(x, y) - f^*(y))$, а также маргинал γ_x^* , по оптимальному потенциалу f^* . Этот факт позволяет решать задачу (1.5), сосредоточившись только на решении двойственной или полудвойственной задач (1.6), (1.7), которые представляются более простыми для решения, поскольку устраняют необходимость в нетривиальной минимизации дивергенций в прямой задаче UOT (1.5). Однако решение задачи (1.7), то есть нахождение двойственных потенциалов, остается сложным, поскольку вычисление *c-преобразования* f^c само по себе представляет задачу оптимизации.

В работе [22] данная оптимизационная задача поиска седловой точки решается с использованием двух нейросетей, параметризующих потенциал f и транспортное отображение T и обучаемых с помощью алгоритма градиентного спуска-подъема. В другой работе [21] вводится дополнительная параметризация для коэффициента масштабирования меры $\mathbb{P}$, то есть всего рассматриваются три нейросети. В результате данные методы опираются на сложную нейросетевую параметризацию, могут страдать от численной неустойчивости в процессе обучения и требуют тщательного подбора гиперпараметров [34].

В диссертации **предлагается** новый **численный метод** (глава 2), который преодолевает ограничения существующих подходов, а именно, имеет строгие теоретические обоснования, основан на легкой параметризации с помощью смеси гауссовских распределений и обладает неминимаксным целевым функционалом.

1.2 Вычисление полунесбалансированного ОТ барицентра

Задача 2 (Задача поиска полунесбалансированного ОТ барицентра). Рассмотрим вероятностные меры $\mathbb{P}_k \in \mathcal{P}(\mathcal{X}_k)$ и непрерывные функции стоимости $c_k(x, y) : \mathcal{X}_k \times \mathcal{Y} \mapsto \mathbb{R}$, $k \in \bar{K}$. Пусть заданы веса $\lambda_k \geq 0$ такие, что $\sum_{k=1}^K \lambda_k = 1$, и набор f -дивергенций $\Psi_{[1:K]}$. Задача полунесбалансированного оптимального транспортного барицентра состоит в нахождении минимизатора взвешенной суммы задач полунесбалансированного ОТ (semi-unbalanced optimal transport, SUOT), см. рис. 1.2б:

$$\mathcal{B}_u^* \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \mathcal{B}_u(\mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \sum_{k=1}^K \lambda_k \text{SUOT}_{c_k, \Psi_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q}). \quad (1.8)$$

Мера $\mathbb{Q}^*$, доставляющая минимум в задаче (1.8) (если она существует), называется SUOT барицентром, $\mathcal{B}_u$ — функционалом полунесбалансированного барицентра, а его минимальное значение обозначается как $\mathcal{B}_u^*$.

В настоящее время не существует эффективных подходов для вычисления полунесбалансированных ОТ барицентров для семейства непрерывных распределений и f -дивергенций общего вида. Существующие методы являются либо дискретными [35; 36], либо решают классическую задачу ОТ барицентра, которая представляет собой частный случай задачи SUOT барицентра при $\Psi_k \equiv \mathbb{I}_{x=1}$ ($\forall k \in \bar{K}$). Дискретные подходы страдают от проблем, которые обсуждались ранее в данном разделе. А именно, в случае, когда вероятностные распределения $\mathbb{P}_1, \dots, \mathbb{P}_k$ являются высокоразмерными непрерывными вероятностными распределениями, дискретные методы вычисления SUOT барицентра не обеспечивают достаточного качества, поскольку требуемые точные дискретизации распределений вычислительно недостижимы. В то же время непрерывные методы решения задачи ОТ барицентра [14; 15; 37; 38] чувствительны к наличию нежелательного шума, выбросов и прочих неточностей во входных данных.

В данной диссертации **предлагается** первый **численный метод** (глава 3 данной работы) для вычисления полунесбалансированного ОТ барицентра для семейства непрерывных распределений.

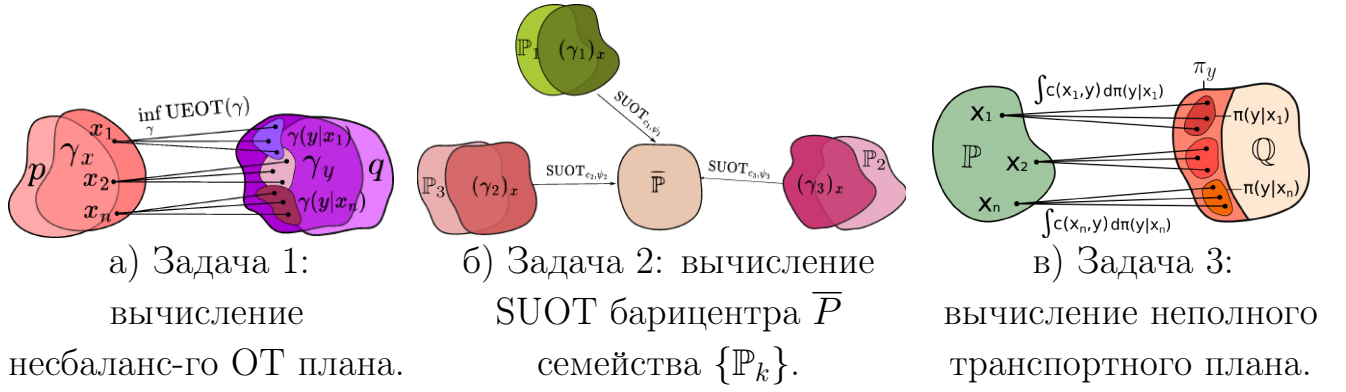


Рис. 1.2 — Схематическая иллюстрация задач 1, 2 и 3.

1.3 Вычисление получастичных ОТ отображений

Задача 3 (Вычисление неполного оптимального транспорта). Рассмотрим конечный параметр $w \geq 1$. Для заданных вероятностных мер $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ и $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ задача неполного оптимального транспорта (*incomplete transport, IT*) определяется как

$$Cost_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y), \quad (1.9)$$

где инфимум берется по множеству $\Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ вероятностных мер $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, первый маргинал которых удовлетворяет равенству $\pi_x = \mathbb{P}$, а второй — неравенству $\pi_y \leq w\mathbb{Q}$ (см. рис. 1.2в).

В данной диссертации основным объектом исследования является задача получастичного ОТ с ослабленным вторым маргиналом, обозначаемая как задача *неполного* ОТ (1.9). Такая задача имеет дополнительную практическую ценность, поскольку предоставляет способ контроля и повышения степени сходства между сгенерированными объектами и объектами из исходного распределения $\mathbb{P}$ путем варьирования параметра w .

В частном случае $w = 1$ задача (1.9) сводится к классической задаче ОТ (1.3), так как неравенства могут быть заменены равенствами. Однако при других значениях $w > 1$ формулировка получастичного ОТ позволяет вычислять ОТ отображения между исходным распределением $\mathbb{P}$ и определенной частью $(1/w)$ целевого распределения $\mathbb{Q}$, контролируемой параметром w . С другой стороны, получастичный ОТ представляет собой частный случай формулировки частичного ОТ, которая формализует задачу поиска ОТ планов между частями

исходного и целевого распределений:

$$\inf_{\substack{m\pi_x \leq w_0 \mathbb{P} \\ m\pi_y \leq w_1 \mathbb{Q}}} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d[m\pi](x, y). \quad (1.10)$$

Здесь $w_0, w_1 \geq m \geq 0$ — конечные параметры, а инфимум берется по всем мерам $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, удовлетворяющим неравенствам $m\pi_x \leq w_0 \mathbb{P}$ и $m\pi_y \leq w_1 \mathbb{Q}$.

Научный и практический интерес к вычислению частичных транспортных планов аналогичен описанному ранее для случая несбалансированного транспорта. А именно, задача частичного ОТ представляет собой еще один способ обобщения классической формулировки ОТ и также позволяет работать с данными, содержащими шум, выбросы или прочие неточности. Важное отличие формулировки частичного ОТ от несбалансированного ОТ состоит в том, что в частичном ОТ явно фиксируются распределения, между которыми вычисляется транспортный план, тогда как в несбалансированном ОТ эти распределения не определены однозначно.

Следует отметить, что нахождение неполного оптимального транспортного отображения (условного плана) представляет собой сложную задачу, поскольку требует разработки метода, обеспечивающего выполнение условия неравенства для сгенерированного и целевого распределений. В настоящее время существуют только дискретные подходы [19] для вычисления частичных ОТ отображений между распределениями $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$. Как отмечалось ранее, такие дискретные подходы не обеспечивают достаточного качества в случае непрерывных распределений $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$.

В данной диссертации предлагается первый **численный метод** (глава 4 настоящей работы) для вычисления неполных (получастичных) ОТ отображений между непрерывными распределениями.

Глава 2. Метод вычисления несбалансированных оптимальных транспортных отображений

Классическая задача ОТ подвержена различным проблемам, таким как чувствительность к выбросам и дисбалансу классов в исходной и целевой мерах. Данный факт вдохновил разработку методов, которые работают с задачами *несбалансированного* ОТ (UOT) — обобщением ОТ, позволяющим смягчать упомянутые проблемы за счет ослабления условий на маргиналы. Существующие методы UOT либо основаны на эвристических принципах, либо являются тяжеловесными из-за сложных задач оптимизации, включающих несколько нейронных сетей. Мы решаем данную проблему и предлагаем новый теоретически обоснованный, легковесный, метод несбалансированного энтропийно-регуляризованного ОТ (ЕОТ). Наше продвижение состоит в разработке нового взгляда на оптимизацию задачи несбалансированного ЕОТ (UEOT), дающего вычислительно удобную и не-минимаксную целевую функцию. Мы показываем, что в сочетании с легкой параметризацией, недавно предложенной в области, наша целевая функция приводит к быстрому, простому и эффективному методу, который позволяет решать задачу непрерывного UEOT за минуты на CPU. Мы доказываем, что наш метод обеспечивает универсальную аппроксимацию решений UEOT и получаем для него оценки ошибки обобщения. Мы приводим иллюстративные примеры работы метода.

Основные результаты главы изложены в работе [A3]. Метод, алгоритм и теоретические результаты, представленные в главе и публикации, разработаны и доказаны автором. Все ключевые эксперименты главы в §2.6 проведены автором; подготовка и запуск программных реализаций альтернативных методов в §2.6.3 выполнены соавтором работы [A3].

2.1 Введение

Вычислительный *оптимальный транспорт* (ОТ) зарекомендовал себя как мощный инструмент для решения различных популярных задач, например, перевода изображение-в-изображение [5; 39—41], генерации изображений

[42—44] и переноса биологических данных [45—47]. Исторически большинство ранних работ в этой области было основано на решении задачи ОТ между дискретными вероятностными мерами [7; 8]. Лишь недавно прогресс в области генеративных моделей привёл к взрывному интересу сообщества ML к разработке **непрерывных** методов ОТ, см. обзор [48]. Постановка этой задачи предполагает, что модель обучается оценивать ОТ план между непрерывными мерами, имея в распоряжении только эмпирические выборки данных из них. Из-за проблем, связанных с выпуклостью задачи ОТ [4], многие работы рассматривают задачу ЕОТ, т.е. используют *энтропийные* регуляризаторы, которые гарантируют, например, единственность обученных планов.

Тем временем исследователи обращают внимание и на другие недостатки классической задачи ОТ. Она накладывает жёсткие ограничения на маргинальные меры и, таким образом, не допускает вариаций массы. В результате ОТ демонстрирует высокую чувствительность к дисбалансу классов и выбросам в исходной и целевой мерах [49], которые практически неизбежны для больших наборов данных. Чтобы преодолеть эти проблемы, обычно рассматривают обобщения задачи ОТ, например несбалансированный ОТ/ЕОТ (UOT/UEOT) [28; 33]. Постановки несбалансированного ОТ/ЕОТ допускают изменение полной массы за счёт ослабления маргинальных ограничений посредством использования дивергенций.

Областью рассмотрения этой главы является непрерывная задача UEOT. Похоже, что в этой области ещё не был разработан метод, который является быстрым, лёгким и теоретически обоснованным. Действительно, многие из существующих подходов следуют своего рода эвристическим принципам и основываются на решениях дискретной задачи ОТ. Например, [23] используют регрессию для интерполяции дискретных решений, а [24; 32] строят модели согласования потоков поверх них. Почти все остальные методы [21; 22] используют несколько нейросетей с большим количеством гиперпараметров и требуют затратных по времени процедур оптимизации. Мы решаем указанные недостатки, вводя новый лёгкий метод, который может играть роль простого базового метода для несбалансированного ЕОТ.

Основные результаты главы. Мы разрабатываем новый *лёгкий* метод для оценки непрерывных **несбалансированных** ЕОТ планов между вероятностными мерами (§2.4). Наш метод имеет неминимаксную целевую функцию оптимизации и использует параметризацию UEOT планов в виде смеси

гауссовских распределений. Мы получаем оценки обобщающей способности для метода (§2.4.4) и экспериментально проверяем его на нескольких задачах (§2.6).

Обозначения. Мы работаем в евклидовом пространстве $(\mathbb{R}^d, \|\cdot\|)$. Мы используем $\mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d)$ для обозначения множества абсолютно непрерывных (а.с.) борелевских вероятностных мер на $\mathbb{R}^d$ с конечным вторым моментом и дифференциальной энтропией. Множество неотрицательных мер на $\mathbb{R}^d$ с конечным вторым моментом обозначается как $\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d)$. Мы используем $\mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)$ для обозначения пространства всех *непрерывных* функций $\zeta : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, для которых $\exists a = a(\zeta), b = b(\zeta)$ такие, что $\forall x \in \mathbb{R}^d: |\zeta(x)| \leq a + b\|x\|^2$. Подпространство функций из $\mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)$, которые дополнительно *ограничены сверху*, обозначается как $\mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$. Для а.с. меры $p \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d)$ (или $\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d)$) мы используем $p(x)$ для обозначения её плотности в точке $x \in \mathbb{R}^d$. Для заданной а.с. меры $\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ мы обозначаем её полную массу через $\|\gamma\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \gamma(x, y) dx dy$. Мы используем $\gamma_x(x), \gamma_y(y)$ для обозначения маргиналов $\gamma(x, y)$. Они удовлетворяют равенству $\|\gamma_x\|_1 = \|\gamma_y\|_1 = \|\gamma\|_1$. Мы пишем $\gamma(\cdot|x)$ для обозначения условной *вероятностной* меры. Каждая такая мера имеет единичную полную массу. Мы используем $\bar{f}$ для обозначения сопряжения по Фенхелю функции $f: \bar{f}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{u \in \mathbb{R}} \{ut - f(u)\}$. Мы используем $\mathbb{I}_A$ для обозначения выпуклого индикатора множества A , т.е. $\mathbb{I}_A(x) = 0$, если $x \in A$; $\mathbb{I}_A(x) = +\infty$, если $x \notin A$.

2.2 Предварительные сведения о несбалансированном энтропийном оптимальном транспорте

В целях полноты изложения в этой главе в данном разделе мы ещё раз напомним читателю основные свойства f -дивергенций. Затем мы дадим обзор соответствующих понятий энтропийного оптимального транспорта (ЕОТ). За дополнительными подробностями о сбалансированном ЕОТ мы отсылаем к [7; 8; 50], о несбалансированном ЕОТ — к [28; 33].

f -дивергенции для положительных мер. Для *положительных* мер $\mu_1, \mu_2 \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^{d'})$ и полунепрерывной снизу функции $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ f -дивергенция между μ_1, μ_2 определяется как

$$D_f(\mu_1 \parallel \mu_2) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^{d'}} f\left(\frac{d\mu_1}{d\mu_2}(x)\right) d\mu_2(x) \text{ если } \mu_1 \ll \mu_2 \text{ и } +\infty \text{ иначе.}$$

Мы рассматриваем такие $f(t)$, которые являются выпуклыми, неотрицательными и обращаются в ноль однозначно при $t = 1$. В этом случае D_f является корректной мерой различия между двумя положительными мерами (см. замечание ниже для доказательства этого факта). Это означает, что $D_f(\mu_1 \| \mu_2) \geq 0$ и $D_f(\mu_1 \| \mu_2) = 0$ тогда и только тогда, когда $\mu_1 = \mu_2$. В этой главе мы также предполагаем, что все рассматриваемые нами f обладают свойством, что $\bar{f}$ является *неубывающей* функцией.

Замечание. В классической форме f -дивергенции определяются как меры различия между двумя *вероятностными* мерами. Это определение следует пересмотреть при работе с мерами произвольных масс. Ниже мы показываем, что если функция f удовлетворяет перечисленным выше свойствам, то $D_f(\mu_1 \| \mu_2)$ является корректной мерой различия между двумя положительными мерами. Пусть $\mu_1, \mu_2 \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^{d'})$ — две положительные меры. Тогда f -дивергенция удовлетворяет $D_f(\mu_1 \| \mu_2) \geq 0$, что очевидно из неотрицательности f . Из определения $D_f(\mu_1 \| \mu_2)$ и того факта, что функция f обращается в ноль однозначно в точке $\{1\}$, мы получаем, что $D_f(\mu_1 \| \mu_2) = 0$ тогда и только тогда, когда $\mu_1(x) = \mu_2(x)$ выполняется μ_2 -почти всюду. На самом деле, $\mu_1(x) = \mu_2(x)$ должно выполняться для всех x , так как μ_1 должна быть абсолютно непрерывна относительно μ_2 (иначе $D_f(\mu_1 \| \mu_2)$ полагается равной $+\infty$).

Дивергенция Кульбака–Лейблера D_{KL} [20; 28] является частным случаем такой f -дивергенции для положительных мер. Она имеет порождающую функцию $f_{KL}(t) \stackrel{\text{def}}{=} t \log t - t + 1$. Выпуклая сопряженная к ней функция $-\bar{f}_{KL}(t) = \exp(t) - 1$. Другой пример — χ^2 -дивергенция D_{χ^2} , которая порождается функцией $f_{\chi^2}(t) \stackrel{\text{def}}{=} (t - 1)^2$ при $t \geq 0$ и ∞ иначе. Выпуклая сопряженная к ней функция равна $\bar{f}_{\chi^2}(t) = -1$, если $t < -2$, и $\frac{1}{4}t^2 + t$, когда $t \geq -2$.

Замечание. По определению выпуклые сопряженные к дивергенциям f_{KL} и f_{χ^2} функции являются собственными, выпуклыми и неубывающими. Эти свойства используются в некоторых наших теоретических результатах.

Энтропия для положительных мер. Для $\mu \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^{d'})$ её энтропия [28] задаётся как

$$H(\mu) \stackrel{\text{def}}{=} - \int_{\mathbb{R}^{d'}} \mu(x) \log \mu(x) dx + \|\mu\|_1, \text{ если } \mu \text{ является а.с. и } -\infty \text{ иначе.} \quad (2.1)$$

Когда $\mu \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^{d'})$, т.е. $\|\mu\|_1 = 1$, равенство (2.1) есть обычная дифференциальная энтропия плюс 1.

Классическая постановка ЕОТ (с квадратичной стоимостью).

Рассмотрим две вероятностные меры $p \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d)$, $q \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d)$. Для $\varepsilon > 0$ задача ЕОТ между p и q имеет вид

$$\min_{\pi \in \Pi(p,q)} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \pi(x, y) dx dy - \varepsilon H(\pi), \quad (2.2)$$

где $\Pi(p, q)$ — множество вероятностных мер $\pi \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ с маргиналами p, q (транспортные планы). План π^* , доставляющий минимум, существует, он единственен и называется *ЕОТ планом*.

Классический ЕОТ накладывает жёсткие ограничения на маргиналы, что приводит к нескольким проблемам, например чувствительности к выбросам [49], неспособности обрабатывать возможные смещения мер, такие как дисбаланс классов в мерах p, q . Задача UEOT [21; 22] преодолевает эти проблемы за счёт ослабления ограничений на маргиналы [20].

Постановка несбалансированного ЕОТ (с квадратичной стоимостью). Пусть D_{f_1} и D_{f_2} — две f -дивергенции на $\mathbb{R}^d$. Для двух вероятностных мер $p \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d)$, $q \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d)$ и $\varepsilon > 0$ несбалансированная задача ЕОТ между p и q заключается в нахождении минимизатора

$$\inf_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \gamma(x, y) dx dy - \varepsilon H(\gamma) + D_{f_1}(\gamma_x \| p) + D_{f_2}(\gamma_y \| q), \quad (2.3)$$

Здесь минимум достигается для единственного плана γ^* , который называется *несбалансированным оптимальным энтропийным* (UEOT) планом. Типичные выборы f_i ($i \in [1, 2]$) имеют вид $f_i(t) = \tau_i f_{KL}(t)$ или $f_i(t) = \tau_i f_{\chi^2}(t)$ ($\tau_i > 0$), что приводит, соответственно, к масштабированным D_{KL} и D_{χ^2} . В данном случае, чем больше τ_1 (τ_2), тем сильнее штрафуются γ_x (γ_y) за несовпадение с соответствующим маргиналом p (q).

Замечание 1. Хотя множество $\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ содержит не только а.с. меры, инфимум в задаче (2.3) достигается на а.с. мере γ^* , поскольку слагаемое $-\varepsilon H(\gamma^*)$ иначе обращается в $+\infty$. Таким образом, почти всюду в работе нас фактически интересует подмножество а.с. мер в $\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$.

Замечание 2. Сбалансированная задача ЕОТ (2.2) является частным случаем (2.3). Действительно, пусть f_1 и f_2 будут выпуклыми индикаторами множества $\{1\}$, т.е. $f_1 = f_2 = \mathbb{I}_{x=1}$. Тогда f -дивергенции $D_{f_1}(\gamma_x \| p)$ и $D_{f_2}(\gamma_y \| q)$ обращаются в бесконечность, если $p \neq \gamma_x$ или $q \neq \gamma_y$, и обращаются в ноль в противном случае.

Двойственная форма несбалансированной задачи ЕОТ (2.3)

формулируется следующим образом

$$\sup_{(\varphi, \psi)} \left\{ -\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{ \frac{\varphi(x) + \psi(y) - \frac{\|x-y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right\} dx dy - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi(x)) p(x) dx - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\psi(y)) q(y) dy \right\}. \quad (2.4)$$

Известно, что существуют две измеримые функции φ^* , ψ^* , доставляющие максимум в (2.4). Они имеют следующую связь с решением прямой несбалансированной задачи (2.3):

$$\gamma^*(x, y) = \exp\left\{ \frac{\varphi^*(x)}{\varepsilon} \right\} \exp\left\{ -\frac{\|x-y\|^2}{2\varepsilon} \right\} \exp\left\{ \frac{\psi^*(y)}{\varepsilon} \right\}. \quad (2.5)$$

Замечание. Для некоторых наших результатов нам потребуется ограничить потенциалы (φ, ψ) в задаче (2.4) пространством $\mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$. Поскольку установленные варианты двойственных форм [28] обычно соответствуют другим функциональным пространствам, в разделе 2.5.3 мы выводим и теоретически обосновываем новый вариант двойственной задачи (2.4). Заметим, что может иметь место ситуация, когда оптимальные потенциалы $\psi^*, \varphi^* \notin \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^D)$, т.е. супремум не достигается в пределах рассматриваемых нами пространств. Это не принципиально для наших последующих выводов.

Вычислительная постановка задачи UEOT. Аналитическое решение *несбалансированной* задачи ЕОТ, вообще говоря, неизвестно.¹ Более того, в реальных постановках, где применим несбалансированный ЕОТ, меры p, q обычно не доступны в явном виде, а заданы лишь через их эмпирические выборки (наборы данных).

Мы предполагаем, что меры данных $p, q \in \mathcal{P}_{2,ac}(\mathbb{R}^d)$ неизвестны и доступны лишь по ограниченному числу независимых одинаково распределённых наблюдений $\{x_0, \dots, x_N\} \sim p$, $\{y_0, \dots, y_M\} \sim q$. Мы стремимся аппроксимировать оптимальный UEOT план γ^* , решающий (2.3) между полными мерами p, q . Восстановленные планы должны допускать оценивание для данных вне обучающей выборки, т.е. генерацию выборок из $\gamma^*(\cdot | x^{\text{new}})$, где x^{new} — новая тестовая точка (не обязательно присутствующая в обучающих данных). Опционально может потребоваться возможность получения выборок из γ_x^* .

¹Аналитические решения известны лишь для некоторых частных случаев. Например, [51] рассматривают гауссовские меры и задачу UEOT с дивергенцией D_{KL} вместо дифференциальной энтропии. Эта постановка отличается от нашей.

Метод	Задача	Принципы	Что восстанавливает?	Ограничения
[21]	UOT	Решает полудвойственную max-min формулировку UOT на основе c -преобразования, используя нейросети	Коэфф. масштабирования $\gamma^{*(x)/p(x)}$ и стох. ОТ отображение $T^*(x, z)$	Сложная max-min целевая функция; 3 нейросети
[23]	Спец. UOT	Регрессия поверх дискретного EOT между ребалансированными мерами плюс метод на основе ICNN [11]	Коэфф. масштабирования, ОТ отобр. между масштабированными мерами	Эвристика: приближения ОТ на подвыборках
[22]	UOT	Решает полудвойственную max-min форм-ку UOT, используя нейросети	Стох. UOT отображение $T^*(x, z)$	Сложная max-min целевая функция; 2 нейросети
[32]	UEOT	Согласование потоков поверх дискр. UEOT, используя нейросети	Параметризованное векторное поле $(v_t, \theta)_{t \in [0,1]}$ для переноса массы	Эвристика: приближения ОТ на подвыборках
[24]	UEOT	Условное согласование потоков поверх дискретного EOT между ребалансированными мерами с помощью нейросетей	Коэффициенты масштабирования и параметризованное условное векторное поле $(v_t, \theta)_{t \in [0,1]}$ для переноса массы между ремасштабированными мерами	Эвристика: приближения ОТ на подвыборках
U-LightOT (наш)	UEOT	Решает неминимаксную формулировку двойственной задачи UEOT, используя смеси гауссовских распределений	Плотность UEOT плана γ^* и процедуру получения выборки $x \sim \gamma_x^*(\cdot), y \sim \gamma_y^*(\cdot x)$	Параметризация в виде смеси гауссовских распр.

Таблица 1 — Сравнение принципов существующих методов UOT/UEOT и разработанного нами метода.

Описанная постановка обычно называется *непрерывным EOT*, ее не следует путать с *дискретным EOT* [7; 8]. Целью последнего является восстановление (несбалансированного) EOT плана между эмпирическими мерами $\hat{p} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$, $\hat{q} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \delta_{y_j}$, и out-of-sample оценивание обычно не требуется.

2.3 Обзор существующих методов

В настоящее время область непрерывных методов ОТ/ЕОТ активно развивается. Некоторые из ранних работ, связанных с этой темой, используют стоимость ОТ в качестве функции потерь [1; 9; 10]. Эти подходы для нас не релевантны, так как они не обучают ОТ/ЕОТ отображения (или планы). Подробный обзор приведен в работе [52].

В то же время существует большое число работ в дискретной постановке ОТ/ЕОТ [7; 53–55], см. обзор в [8]. Мы снова подчёркиваем, что методы такого типа для нас не релевантны, так как они строят дискретное сопоставление между заданными (обучающими) выборками и обычно не дают обобщения на новые (тестовые) данные. Лишь недавно в области начали разрабатываться процедуры оценивания для данных вне обучающей выборки на основе дискретного ОТ и ОТ на подвыборках. Например, [56–61] в основном разрабатывают такие оценщики, используя барицентрические проекции дискретных EOT

планов. Хотя эти процедуры обладают хорошими теоретическими свойствами, их масштабируемость остаётся неясной.

Сбалансированные методы ОТ/ЕОТ. Существует огромное число нейросетевых методов для непрерывной задачи ОТ. Большинство из них обучают ОТ отображения (или планы) посредством решения задачи поиска седловой точки [13; 40; 62—64]. Хотя недавние работы [2; 41; 65—67] решают задачу ЕОТ (2.2), они рассматривают её сбалансированную версию. Следовательно, они для нас не релевантны. Среди этих работ только [66; 67] избегают нетривиальных процедур обучения/получения выборки и идеологически наиболее близки к нашей. Различие между ними заключается в используемой конкретной функции потерь. На самом деле, **эта глава** предлагает метод, который включает в себя эти методы и обобщает их на несбалансированный случай. Вывод нашего метода нетривиален и требует серьёзного математического аппарата, см. §2.4.

Несбалансированные методы ОТ/ЕОТ. Подавляющее большинство ранних работ в этой области предлагают методы для дискретной постановки UOT/UEOT [30; 68; 69], построенные на принципах, которые нелегко обобщить на непрерывную постановку. Однако, многие из недавних работ, которые рассматривают непрерывную несбалансированную постановку ОТ/ЕОТ, используют дискретные решения при построении своих методов. Например, [23] обучают нейросеть предсказывать коэффициенты масштабирования, полученные с использованием дискретного UEOT, одновременно обучая непрерывные ОТ отображения с помощью метода ICNN [11]. В [32] и [24] авторы реализуют модели согласования потоков [70, FM] и условные модели согласования потоков поверх дискретных UEOT планов, соответственно. Алгоритм последней работы состоит в обучении нейросетей для предсказания коэффициентов масштабирования и одновременном обучении условного векторного поля для переноса массы между перебалансированными мерами. Несмотря на практическую эффективность этих методов, всё ещё неясно, в какой степени такие аппроксимации UEOT планов теоретически обоснованы.

Недавние работы [21; 22] в большей степени связаны с нашим исследованием, так как они не опираются на дискретные ОТ аппроксимации транспортного плана. Однако они имеют нетривиальные минимаксные целевые функции оптимизации, решаемые с использованием *сложных* процедур в стиле генеративно-сопоставительных сетей (GAN). В результате такие модели GAN часто опираются на тяжёлую нейросетевую параметризацию, могут

быть подвержены неустойчивостям во время обучения и требуют тщательного подбора гиперпараметров [34].

Для полноты упомянем другие методы, которые лишь в небольшой степени релевантны для нас. Работы [49; 71] включают несбалансированный ОТ в целевую функцию для обучения моделей GAN, нацеленных на порождение выборок из шума. Кроме того, в Главе 4 диссертации рассматривается метод получастичного ОТ, который ослабляет лишь одно из маргинальных ограничений ОТ и является менее общим, чем несбалансированный ОТ.

В отличие от перечисленных подходов, в этой главе предлагается *теоретически обоснованный и лёгкий* метод решения задачи UEOT, см. Таблицу 1 для подробного сравнения методов.

2.4 Лёгкий несбалансированный неминимаксный метод

В этом разделе мы выводим целевую функцию оптимизации (§2.4.1) нашего метода U-LightOT, представляем практические аспекты процедур обучения и получения выборки (§2.4.2) и выводим оценки обобщающей способности для нашего метода (§2.4.4). Мы приводим доказательства всех теоретических результатов в разделе 2.5.

2.4.1 Вывод целевой функции оптимизации

Следуя описанной выше схеме обучения, мы стремимся получить параметрическую аппроксимацию $\gamma_{\theta,\omega}$ UEOT плана γ^* . Здесь θ, ω — параметры модели, которые требуется обучить, и позже станет ясно, почему мы разделяем их на две группы. Для восстановления $\gamma_{\theta,\omega} \approx \gamma^*$, мы стремимся обучить θ, ω путём непосредственной минимизации дивергенции D_{KL} между $\gamma_{\theta,\omega}$ и γ^* :

$$D_{KL}(\gamma^* \parallel \gamma_{\theta,\omega}) \rightarrow \min_{(\theta,\omega)}. \quad (2.6)$$

Основная трудность этой целевой функции оптимизации (2.6) очевидна: UEOT план γ^* является *неизвестным*. К счастью, ниже мы покажем, что существует возможность оптимизировать (2.6), не зная γ^* .

Вспомним, что оптимальный UEOT план γ^* имеет вид (2.5). Сначала мы сделаем некоторые замены переменных. В частности, мы определим $v^*(y) \stackrel{\text{def}}{=} \exp\{\frac{2\psi^*(y) - \|y\|^2}{2\varepsilon}\}$. Формула (2.5) тогда принимает вид

$$\gamma^*(x, y) = \exp\{\frac{2\varphi^*(x) - \|x\|^2}{2\varepsilon}\} \exp\{\frac{\langle x, y \rangle}{\varepsilon}\} v^*(y) \implies \gamma^*(y|x) \propto \exp\{\frac{\langle x, y \rangle}{\varepsilon}\} v^*(y). \quad (2.7)$$

Поскольку условный план имеет единичную массу, мы можем записать

$$\gamma^*(y|x) = \exp\{\frac{\langle x, y \rangle}{\varepsilon}\} \frac{v^*(y)}{c_{v^*}(x)} \quad (2.8)$$

где $c_{v^*}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\{\frac{\langle x, y \rangle}{\varepsilon}\} v^*(y) dy$ является нормировочной константой, обеспечивающей равенство $\int_{\mathbb{R}^d} \gamma^*(y|x) dy = 1$.

Рассмотрим разложение $\gamma^*(x, y) = \gamma_x^*(x) \gamma^*(y|x)$. Оно показывает, что для получения параметризации всего плана $\gamma^*(x, y)$ достаточно рассмотреть параметризации для его левого маргинала γ_x^* и условной меры $\gamma^*(y|x)$. Тем временем, равенство (2.8) показывает, что *условные меры $\gamma^*(\cdot|x)$ полностью задаются переменной v^** . Мы используем эти наблюдения для параметризации $\gamma_{\theta, \omega}$. Положим

$$\gamma_{\theta, \omega}(x, y) \stackrel{\text{def}}{=} u_{\omega}(x) \gamma_{\theta}(y|x) = u_{\omega}(x) \frac{\exp\{\langle x, y \rangle / \varepsilon\} v_{\theta}(y)}{c_{\theta}(x)}, \quad (2.9)$$

где u_{ω} , v_{θ} параметризуют меру маргинала γ_x^* и переменную v^* , соответственно. В свою очередь, константа $c_{\theta}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\{\frac{\langle x, y \rangle}{\varepsilon}\} v_{\theta}(y) dy$ является параметризацией $c_{v^*}(x)$. Далее демонстрируется наш **основной результат**, который показывает, что оптимизация (2.6) может быть выполнена *без* доступа к γ^* .

Теорема 2.4.1 (Вычисляемая форма минимизации D_{KL}). *Предположим, что γ^* параметризуется с использованием (2.9). Тогда имеет место следующая оценка: $\varepsilon D_{KL}(\gamma^* || \gamma_{\theta, \omega}) \leq \mathcal{L}(\theta, \omega) - \mathcal{L}^*$, где*

$$\mathcal{L}(\theta, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varepsilon \log \frac{u_{\omega}(x)}{c_{\theta}(x)} - \frac{\|x\|^2}{2}) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\varepsilon \log v_{\theta}(y) - \frac{\|y\|^2}{2}) q(y) dy + \varepsilon \|u_{\omega}\|_1, \quad (2.10)$$

а константа $(-\mathcal{L}^*)$ является оптимальным значением двойственной формы (2.4). Оценка является **точной** в том смысле, что она обращается в $0 = 0$, когда $v_{\theta}(y) = \exp\{2\psi^*(y) - \|y\|^2/2\varepsilon\}$ и $u_{\omega}(x) = c_{\theta}(x) \exp\{2\varphi^*(x) - \|x\|^2/2\varepsilon\}$.

Фактически, (2.10) является двойственной формой (2.4), но с потенциалами (φ, ψ) , выраженными через u_ω, v_θ (и c_θ):

$$\varphi(x) \leftarrow \varphi_{\theta, \omega}(x) = \varepsilon \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} + \frac{\|x\|^2}{2}, \quad \psi(y) \leftarrow \psi_\theta(y) = \varepsilon \log v_\theta(y) + \frac{\|y\|^2}{2}.$$

Данный результат можно интерпретировать как оценку качества приближённого решения $\gamma_{\theta, \omega}$ задачи (2.3), восстановленного из приближённого решения двойственной задачи (2.4). Его можно доказать напрямую, используя исходные обозначения (φ, ψ) двойственной задачи, но мы используем (u_ω, v_θ) , поскольку при такой замене переменных вид восстановленного плана $\gamma_{\theta, \omega}$ является более интерпретируемым (u_ω задаёт левый маргинал, v_θ — условные меры).

Вместо оптимизации (2.6) для получения $\gamma_{\theta, \omega}$ мы можем оптимизировать верхнюю оценку (2.10), которая является более вычислимой. Действительно, (2.10) является суммой математических ожиданий по вероятностным мерам p, q . Мы можем получить оценку Монте-Карло (2.10) по случайным выборкам и оптимизировать её с помощью процедуры стохастического градиентного спуска по (θ, ω) . Основной **вызов** здесь заключается в вычислении переменной c_θ и слагаемого $\|u_\omega\|_1$. Ниже мы предлагаем умную параметризацию, при которой обе величины могут быть выведены аналитически.

2.4.2 Параметризация и процедура оптимизации

Параметризация. Вспомним, что u_ω параметризует плотность маргинала γ_x^* , которая является ненормированной. Подставляя $x = 0$ в уравнение (2.7), мы получаем $\gamma^*(y|x = 0) \propto v^*(y)$, что означает, что v^* также соответствует ненормированной плотности меры. Это мотивирует нас использовать параметризацию в виде ненормированной смеси гауссовских распределений для потенциала $v_\theta(y)$ и меры $u_\omega(x)$:

$$v_\theta(y) = \sum_{k=1}^K \alpha_k \mathcal{N}(y|r_k, \varepsilon S_k); \quad u_\omega(x) = \sum_{l=1}^L \beta_l \mathcal{N}(x|\mu_l, \varepsilon \Sigma_l). \quad (2.11)$$

Здесь $\theta \stackrel{\text{def}}{=} \{\alpha_k, r_k, S_k\}_{k=1}^K$, $\omega \stackrel{\text{def}}{=} \{\beta_l, \mu_l, \Sigma_l\}_{l=1}^L$, где $\alpha_k, \beta_l \geq 0$, $r_k, \mu_l \in \mathbb{R}^d$ и $0 \prec S_k, \Sigma_l \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Ковариационные матрицы масштабируются на ε для удобства.

Для этого типа параметризации выполняется, что $\|u_\omega\|_1 = \sum_{l=1}^L \beta_l$. Более того, существуют выражения в замкнутой форме для нормировочной константы $c_\theta(x)$ и условного плана $\gamma_\theta(y|x)$, см. [66, Proposition 3.2]. А именно, определим $r_k(x) \stackrel{\text{def}}{=} r_k + S_k x$ и $\tilde{\alpha}_k(x) \stackrel{\text{def}}{=} \alpha_k \exp\{\frac{x^T S_k x + 2r_k^T x}{2\varepsilon}\}$. Тогда выполнено

$$c_\theta(x) = \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k(x); \quad \gamma_\theta(y|x) = \frac{1}{c_\theta(x)} \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k(x) \mathcal{N}(y|r_k(x), \varepsilon S_k). \quad (2.12)$$

Используя этот результат и (2.11), мы получаем выражение для $\gamma_{\theta,\omega}$:

$$\gamma_{\theta,\omega}(x,y) = u_\omega(x) \cdot \gamma_\theta(y|x) = \underbrace{\sum_{l=1}^L \beta_l \mathcal{N}(x|\mu_l, \varepsilon \Sigma_l)}_{u_\omega(x)} \cdot \underbrace{\frac{\sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k(x) \mathcal{N}(y|r_k(x), \varepsilon S_k)}{\sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k(x)}}_{\gamma_\theta(y|x)}. \quad (2.13)$$

Обучение. Напомним, что меры p, q доступны лишь по некоторому числу эмпирических выборок (см. схему обучения в §2.2). Таким образом, по выборкам $\{x_1, \dots, x_N\}$ и $\{y_1, \dots, y_M\}$ мы оптимизируем эмпирический аналог (2.10):

$$\hat{\mathcal{L}}(\theta, w) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{f}_1(-\varepsilon \log \frac{u_\omega(x_i)}{c_\theta(x_i)} - \frac{\|x_i\|^2}{2}) + \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \bar{f}_2(-\varepsilon \log v_\theta(y_j) - \frac{\|y_j\|^2}{2}) + \varepsilon \|u_\omega\|_1 \quad (2.14)$$

используя процедуру стохастического градиентного спуска по параметрам (θ, w) . В параметризации v_θ и u_ω (2.11) мы используем диагональные матрицы S_k, Σ_l . Это позволяет уменьшить число обучаемых параметров в θ и ускорить вычисление обратных матриц S_k^{-1}, Σ_l^{-1} .

Получение выборок из условных мер и меры маргинала $\gamma_\theta(y|x) \approx \gamma^*(y|x)$, $u_\omega \approx \gamma_x^*$ является простым и лёгким, поскольку они явно параметризованы как смеси гауссовских распределений, см. (2.12), (2.11).

2.4.3 Связь с предшествующими работами, близкими по тематике

Идея использования параметризации в виде смеси гауссовских распределений для двойственных потенциалов в задачах, связанных с ЕОТ, впервые появилась в работе [72], предлагающей методологию для получения эталонных пар вероятностных мер с известным ЕОТ решением между ними.

В [66] авторы использовали этот тип параметризации, чтобы получить лёгкий метод (**LightSB**) для **сбалансированного** ЕОТ.

Наш метод для **несбалансированного** ЕОТ (2.10) включает в себя их метод для сбалансированного ЕОТ, так же как одна задача является обобщением другой для частного случая дивергенций, см. замечание в §2.2. Пусть f_1, f_2 будут выпуклыми индикаторами множества $\{1\}$. Тогда $\overline{f_1}(t) = t$ и $\overline{f_2}(t) = t$, и целевая функция (2.10) принимает вид

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\theta, \omega) &= \int_{\mathbb{R}^d} (-\varepsilon \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} - \frac{\|x\|^2}{2}) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} (-\varepsilon \log v_\theta(y) - \frac{\|y\|^2}{2}) q(y) dy + \varepsilon \|u_\omega\|_1 = \\ &= -\varepsilon \left(\int_{\mathbb{R}^d} \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \log v_\theta(y) q(y) dy - \|u_\omega\|_1 \right) - \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x\|^2}{2} p(x) dx - \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|y\|^2}{2} q(y) dy}_{\stackrel{\text{def}}{=} \text{Const}(p, q)} = \\ &= \varepsilon \left(\int_{\mathbb{R}^d} \log c_\theta(x) p(x) dx \right) - \int_{\mathbb{R}^d} \log v_\theta(y) q(y) dy - (2.15) \\ &= \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \log u_\omega(x) p(x) dx + \varepsilon \|u_\omega\|_1 - \text{Const}(p, q). \quad (2.16) \end{aligned}$$

Здесь строка (2.15) зависит исключительно от θ и в точности совпадает с целевой функцией LightSB, см. [66, Предложение 8]. В то же время, строка (2.16) зависит только от ω , и её минимум достигается при $u_\omega = p$. Таким образом, эта часть фактически не нужна в сбалансированном случае, см. [66, Приложение С].

2.4.4 Оценки обобщающей способности и свойство универсальной аппроксимации

Теоретически, чтобы восстановить UEOT план γ^* , требуется решить задачу $\mathcal{L}(\theta, \omega) \rightarrow \min_{\theta, \omega}$, как утверждается в нашей Теореме 2.4.1. На практике меры p и q доступны через эмпирические выборки $X \stackrel{\text{def}}{=} \{x_1, \dots, x_N\}$ и $Y \stackrel{\text{def}}{=} \{y_1, \dots, y_M\}$, поэтому требуется оптимизировать эмпирический аналог $\hat{\mathcal{L}}(\theta, \omega)$ функции $\mathcal{L}(\theta, \omega)$, см. (2.14). Кроме того, доступные потенциалы u_ω, v_θ , по которым оптимизируется целевая функция, принадлежат ограниченному классу функций. В частности, мы рассматриваем ненормированные смеси гауссовских распределений u_ω, v_θ с L и K компонентами соответственно. Таким образом, возникает естественный вопрос: **насколько близок восстановленный план**

$\gamma_{\hat{\theta}, \hat{\omega}}$ к UEOT плану γ^* при условии, что $(\hat{\theta}, \hat{\omega}) = \arg \min_{\theta, \omega} \hat{\mathcal{L}}(\theta, \omega)$? Чтобы ответить на этот вопрос, мы изучаем *ошибку обобщения* $\mathbb{E}D_{\text{KL}}(\gamma^* \parallel \gamma_{\hat{\theta}, \hat{\omega}})$, т.е. математическое ожидание D_{KL} между γ^* и $\gamma_{\hat{\theta}, \hat{\omega}}$, взятое по случайной реализации обучающих наборов данных $X \sim p$, $Y \sim q$.

Пусть $(\bar{\theta}, \bar{\omega}) = \arg \min_{(\theta, \omega) \in \Theta \times \Omega} \mathcal{L}(\theta, \omega)$ обозначает наилучшие аппроксиматоры $\mathcal{L}(\theta, \omega)$ в допустимом классе. Из Теоремы 2.4.1 следует, что $\mathbb{E}D_{\text{KL}}(\gamma^* \parallel \gamma_{\hat{\theta}, \hat{\omega}})$ можно оценить сверху с использованием $\mathbb{E}(\mathcal{L}(\hat{\theta}, \hat{\omega}) - \mathcal{L}^*)$. Последнее выражение можно разложить на статистическую ошибку и ошибку аппроксимации:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\mathcal{L}(\hat{\theta}, \hat{\omega}) - \mathcal{L}^*) &= \mathbb{E}[\mathcal{L}(\hat{\theta}, \hat{\omega}) - \mathcal{L}(\bar{\theta}, \bar{\omega})] + \mathbb{E}[\mathcal{L}(\bar{\theta}, \bar{\omega}) - \mathcal{L}^*] = \\ &= \underbrace{\mathbb{E}[\mathcal{L}(\hat{\theta}, \hat{\omega}) - \mathcal{L}(\bar{\theta}, \bar{\omega})]}_{\text{Статистическая ошибка}} + \underbrace{\mathbb{E}[\mathcal{L}(\bar{\theta}, \bar{\omega}) - \mathcal{L}^*]}_{\text{Ошибка аппроксимации}}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Количественная оценка для статистической ошибки устанавливается ниже.

Предложение 2.4.2 (Оценка для статистической ошибки). Пусть p, q имеют компактный носитель и предположим, что $\bar{f}_1, \bar{f}_2$ являются липшицевыми. Предположим, что рассматриваемые параметрические классы Θ, Ω ($\exists (\theta, \omega)$) состоят из ненормированных смесей гауссовских распределений с K и L компонентами соответственно и ограниченными средними $\|r_k\|, \|\mu_l\| \leq R$ (для некоторого $R > 0$), ковариациями $sI \preceq S_k, \Sigma_l \preceq SI$ (для некоторых $0 < s \leq S$) и весами $a \leq \alpha_k, \beta_l \leq A$ (для некоторых $0 < a \leq A$). Тогда верно:

$$\mathbb{E}[\mathcal{L}(\hat{\theta}, \hat{\omega}) - \mathcal{L}(\bar{\theta}, \bar{\omega})] \leq O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) + O\left(\frac{1}{\sqrt{M}}\right),$$

где $O(\cdot)$ скрывает константы, зависящие только от $K, L, R, s, S, a, A, p, q, \varepsilon$, но не от размеров M, N .

Это предложение позволяет нам заключить, что статистическая ошибка стремится к нулю при N и M , стремящихся к бесконечности, с обычной параметрической скоростью. Остаётся прояснить вопрос: *можем ли мы сделать ошибку аппроксимации сколь угодно малой?* Положительный ответ на этот вопрос дается в Теореме ниже.

Теорема 2.4.3 (Параметризация переменных в виде смеси гауссовских распределений обеспечивает универсальную аппроксимацию UEOT планов). Пусть p и q имеют компактный носитель и предположим, что $\bar{f}_1, \bar{f}_2$

липшицевы. Тогда для всех $\delta > 0$ существуют смеси гауссовских распределений v_θ , u_ω (2.11) со **скалярными** ковариациями $S_k = \lambda_k I_d \succ 0$, $\Sigma_l = \zeta_l I_d \succ 0$ их компонент, которые удовлетворяют $D_{KL}(\gamma^* \|\gamma_{\theta, \omega}) \leq \varepsilon^{-1}(\mathcal{L}(\theta, \omega) - \mathcal{L}^*) < \delta$.

В совокупности, результаты раздела показывают, что можно сделать ошибку обобщения *сколь угодно малой* при достаточно больших размерах выборок и числе компонент в гауссовской параметризации. Это означает, что теоретически наш метод может сколь угодно хорошо восстановить UEOT план.

2.5 Доказательства теоретических результатов

2.5.1 Доказательство теоремы 2.4.1

Доказательство. Для удобства разделим доказательство на несколько шагов.

Шаг 1. Для начала напомним, что прямая задача UEOT (2.3) имеет минимизатор γ^* . Тогда, подставляя γ^* непосредственно в (2.3), мы получаем

$$\begin{aligned}
 (2.3) &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \gamma^*(x, y) dx dy - \varepsilon H(\gamma^*) + D_{f_1}(\gamma_x^* \| p) + D_{f_2}(\gamma_y^* \| q) = \\
 &\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \gamma^*(x, y) dx dy + \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \gamma^*(x, y) \log \gamma^*(x, y) dx dy - \varepsilon \|\gamma^*\|_1 + \\
 &\int_{\mathbb{R}^d} f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} f_2\left(\frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)}\right) q(y) dy = -\varepsilon \|\gamma^*\|_1 + \\
 &\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \gamma^*(x, y) dx dy + \varepsilon \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \gamma^*(x, y) \cdot \varepsilon^{-1} (\varphi^*(x) + \psi^*(y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}) dx dy}_{\log \gamma^*(x, y) =} + (2.18) \\
 &\int_{\mathbb{R}^d} f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} f_2\left(\frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)}\right) q(y) dy = -\varepsilon \|\gamma^*\|_1 + \int_{\mathbb{R}^d} \gamma_x^*(x) \varphi^*(x) dx + \\
 &\int_{\mathbb{R}^d} \gamma_y^*(y) \psi^*(y) dy + \int_{\mathbb{R}^d} f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} f_2\left(\frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)}\right) q(y) dy = \\
 &-\varepsilon \|\gamma^*\|_1 + \int_{\mathbb{R}^d} \left(f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) + \varphi^*(x) \frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \left(f_2\left(\frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)}\right) + \psi^*(y) \frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)}\right) q(y) dy. (2.19)
 \end{aligned}$$

Здесь в строке (2.18) мы используем уравнение (2.5), которое устанавливает связь между γ^* и оптимальными потенциалами φ^* , ψ^* , доставляющими максимум

двойственной задаче UEOT (2.4). Подставляя φ^*, ψ^* в задачу (2.4), получаем

$$(2.4) = -\varepsilon \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{\frac{1}{\varepsilon}(\varphi^*(x) + \psi^*(y) - \frac{\|x - y\|^2}{2})\right\} dx dy}_{=\|\gamma^*\|_1} - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi^*(x)) p(x) dx - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\psi^*(y)) q(y) dy = -\varepsilon \|\gamma^*\|_1 - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi^*(x)) p(x) dx - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\psi^*(y)) q(y) dy. \quad (2.20)$$

Заметим, что (2.19) равно (2.20) в силу эквивалентности прямой и двойственной задач UEOT, см. §2.2. Мы будем использовать этот факт в дальнейших выводах.

Для каждой функции f её выпуклая сопряжённая к f функция

$$\begin{aligned} \bar{f}(t) = \sup_{u \in \mathbb{R}} \{ut - f(u)\} &\implies -\bar{f}(-t) = -\sup_{u \in \mathbb{R}} \{-ut - f(u)\} = \inf_{u \in \mathbb{R}} \{ut + f(u)\} \implies \\ &-\bar{f}(-t) \leq ut + f(u) \quad \forall u \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Тогда для произвольного $x \in \mathbb{R}^d$, полагая $f = f_1$, $u = \frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}$, $t = \varphi^*(x)$, получаем

$$-\bar{f}_1(-\varphi^*(x)) \leq \frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)} \varphi^*(x) + f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) \implies \quad (2.22)$$

$$-\int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi^*(x)) p(x) dx \leq \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)} \varphi^*(x) + f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) \right) p(x) dx. \quad (2.23)$$

Аналогично для произвольного $y \in \mathbb{R}^d$

$$-\int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\psi^*(y)) q(y) dy \leq \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)} \psi^*(y) + f_2\left(\frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)}\right) \right) q(y) dy. \quad (2.24)$$

Поскольку (2.19)=(2.20), неравенства (2.22), (2.23), (2.24) фактически обращаются в равенства.

Шаг 2. Так как мы рассматриваем выпуклые, полунепрерывные снизу функции f , выполняется, что $\bar{\bar{f}} = f$. Тогда, подставляя $\bar{f}$ в (2.21), получаем

$$-f(-t) = -\bar{\bar{f}}(-t) = \inf_{u \in \mathbb{R}} \{ut + \bar{f}(u)\} \implies -f(-t) \leq ut + \bar{f}(u) \quad \forall u \in \mathbb{R}. \quad (2.25)$$

Таким образом, для произвольного $x \in \mathbb{R}^d$, полагая $f = f_1$, $t = -\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}$, мы получаем, что $-f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) \leq u \frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)} + \bar{f}_1(-u) \quad \forall u \in \mathbb{R}$. В то же время, из шага 1 мы знаем, что $-f_1\left(\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}\right) = \frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)} \varphi^*(x) + \bar{f}_1(-\varphi^*(x))$, см. (2.22). Тогда

$$\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)} \varphi^*(x) + \bar{f}_1(-\varphi^*(x)) \leq u \frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)} + \bar{f}_1(-u) \quad \forall u \in \mathbb{R} \implies$$

$$\frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)}(\varphi^*(x) - u) \leq (\bar{f}_1(-u) - \bar{f}_1(-\varphi^*(x))) \forall u \in \mathbb{R}. \quad (2.26)$$

Аналогично для произвольного $y \in \mathbb{R}^d$

$$\frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)}(\psi^*(y) - u) \leq (\bar{f}_2(-u) - \bar{f}_2(-\psi^*(y))) \forall u \in \mathbb{R}. \quad (2.27)$$

Шаг 3. Теперь мы готовы доказать основной результат. Заметим, что:

$$\begin{aligned} D_{\text{KL}}(\gamma^* \|\gamma_{\theta, \omega}) &= \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \gamma^*(x, y) \log \gamma^*(x, y) dx dy - \\ &\int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \gamma^*(x, y) \log \gamma_{\theta, \omega}(x, y) dx dy + \|\gamma_{\theta, \omega}\|_1 - \|\gamma^*\|_1. \end{aligned} \quad (2.28)$$

В то время как истинный UEOT план $\gamma^*(x, y)$ и оптимальные двойственные переменные $\varphi^*(x)$, $\psi^*(y)$ связаны уравнением (2.5), наш параметризованный план $\gamma_{\theta, \omega}(x, y)$ может быть выражен через $\varphi_{\theta, \omega}(x)$, $\psi_{\theta}(y)$ как $\gamma_{\theta, \omega}(x, y) = \exp\{\varepsilon^{-1}(\varphi_{\theta, \omega}(x) + \psi_{\theta}(y) - \|x-y\|^2/2)\}$, см. (2.9). Тогда

$$\begin{aligned} (2.28) &= \varepsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \gamma^*(x, y) (\varphi^*(x) + \psi^*(y) - \|x-y\|^2/2) dx dy - \\ &\varepsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \gamma^*(x, y) (\varphi_{\theta, \omega}(x) + \psi_{\theta}(y) - \|x-y\|^2/2) dx dy + \|\gamma_{\theta, \omega}\|_1 - \|\gamma^*\|_1 = \\ &\varepsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} \gamma^*(x, y) (\varphi^*(x) + \psi^*(y) - \varphi_{\theta, \omega}(x) - \psi_{\theta}(y)) dx dy + \|\gamma_{\theta, \omega}\|_1 - \|\gamma^*\|_1 = \\ &\varepsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\gamma_x^*(x)}{p(x)} (\varphi^*(x) - \varphi_{\theta, \omega}(x)) p(x) dx + \\ &\varepsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\gamma_y^*(y)}{q(y)} (\psi^*(y) - \psi_{\theta}(y)) q(y) dy + \|\gamma_{\theta, \omega}\|_1 - \|\gamma^*\|_1 \stackrel{(2.26)-(2.27)}{\leq} \\ &\varepsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^d} (\bar{f}_1(-\varphi_{\theta, \omega}(x)) - \bar{f}_1(-\varphi^*(x))) p(x) dx + \\ &\varepsilon^{-1} \int_{\mathbb{R}^d} (\bar{f}_2(-\psi_{\theta}(y)) - \bar{f}_2(-\psi^*(y))) q(y) dy + \|\gamma_{\theta, \omega}\|_1 - \|\gamma^*\|_1 = \\ &\varepsilon^{-1} \cdot \left(\int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi_{\theta, \omega}(x)) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\psi_{\theta}(y)) q(y) dy + \varepsilon \|\gamma_{\theta, \omega}\|_1 - \right. \\ &\quad \left. \underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi^*(x)) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\psi^*(y)) q(y) dy + \varepsilon \|\gamma^*\|_1 \right)}_{\mathcal{L}^* \stackrel{\text{def}}{=}} \right) = \\ &\varepsilon^{-1} (\mathcal{L}(\theta, \omega) - \mathcal{L}^*). \end{aligned}$$

□

2.5.2 Доказательство предложения 2.4.2

Мы начинаем с доказательства вспомогательных теоретических результатов (Предложений 2.5.1, 2.5.2), которые необходимы для доказательства основного предложения этого раздела.

Предложение 2.5.1 (Оценка Радемахера для статистической ошибки). *Верно, что*

$$\mathbb{E}[\mathcal{L}(\hat{\theta}, \hat{\omega}) - \mathcal{L}(\bar{\theta}, \bar{\omega})] \leq 4\mathcal{R}_N(\mathcal{F}_1, p) + 4\mathcal{R}_M(\mathcal{F}_2, q),$$

где $\mathcal{F}_1 = \{\bar{f}_1(-\varphi_{\theta, \omega}) | (\theta, \omega) \in \Theta \times \Omega\}$, $\mathcal{F}_2 = \{\bar{f}_2(-\psi_{\theta}) | \theta \in \Theta\}$ для $\varphi_{\theta, \omega}(x) = \varepsilon \log \frac{u_{\omega}(x)}{c_{\theta}(x)} + \frac{\|x\|^2}{2}$, $\psi_{\theta}(y) = \varepsilon \log v_{\theta}(y) + \frac{\|y\|^2}{2}$, и $\mathcal{R}_N(\mathcal{F}_1, p)$, $\mathcal{R}_M(\mathcal{F}_2, q)$ обозначают сложность Радемахера [73, §26] функциональных классов $\mathcal{F}_1$, $\mathcal{F}_2$ относительно размеров выборок N , M из распределений p , q .

Доказательство предложения 2.5.1. Вывод этого факта полностью аналогичен [66, Предложение В.1], [40, Теорема 4] или [74, Теорема 3.4]. $\square$

Предложение 2.5.2 (Оценка сложности Радемахера рассматриваемых классов). *Пусть $0 < a \leq A$, $0 < U$, $0 < W$ и $V > 0$. Рассмотрим класс функций*

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_1 &= \left\{x \mapsto \bar{f}_1(-\varepsilon \log u_{\omega}(x) + \varepsilon \log c_{\theta}(x) - \frac{\|x\|^2}{2})\right\}, \\ \mathcal{F}_2 &= \left\{y \mapsto \bar{f}_2(-\varepsilon \log v_{\theta}(y) - \frac{\|y\|^2}{2})\right\} \text{ где} \\ u_{\omega}(x), v_{\theta}(y), c_{\theta}(x) &\text{ принадлежат классу} \\ \mathcal{V} &= \left\{x \mapsto \sum_{k=1}^K \alpha_k \exp(x^T U_k x + v_k^T x + w_k) \text{ при} \right. \\ &\left. -UI \preceq U_k = U_k^T \preceq UI; \|v_k\| \leq V; |w_k| \leq W; a \leq \alpha_k \leq A\right\}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Следуя [66, Предложение В.2], мы называем функции класса $\mathcal{V}$ квадратичными *log-sum-exp* функциями с ограничениями. Мы предполагаем, что $\bar{f}_1$, $\bar{f}_2$ являются липшицевыми функциями, а меры p , q имеют компактный носитель, причём их носители лежат в шаре радиуса $R > 0$ и центром в нуле. Тогда

$$\mathcal{R}_N(\mathcal{F}_1, p) \leq \frac{C_0}{\sqrt{N}}, \mathcal{R}_M(\mathcal{F}_2, q) \leq \frac{C_1}{\sqrt{M}}$$

где константы C_0 , C_1 **не зависят** от размеров N , M выборок из p , q .

Доказательство предложения 2.5.2. Аналогично доказательству [66, Предложение В.2] получаем, что сложности Радемахера квадратичных log-sum-exp функций с ограничениями $x \mapsto \log u_\omega(x)$, $x \mapsto \log c_\theta(x)$ и $y \mapsto \log v_\theta(y)$ ограничены величинами $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ и $O(\frac{1}{\sqrt{M}})$. Согласно определению сложности Радемахера, для одиночных квадратичных функций $x \mapsto \frac{x^T x}{2}$ ($y \mapsto \frac{y^T y}{2}$) она равна нулю. Затем, используя хорошо известные свойства масштабирования и аддитивности сложности Радемахера [73], получаем, что $x \mapsto -\varepsilon \log u_\omega(x) + \varepsilon \log c_\theta(x) - \frac{\|x\|^2}{2}$ и $y \mapsto -\varepsilon \log v_\theta(y) - \frac{\|y\|^2}{2}$ ограничены величинами $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$, $O(\frac{1}{\sqrt{M}})$ соответственно. Остаётся напомнить, что $\bar{f}_1(x)$, $\bar{f}_2(y)$ являются липшицевыми. Следовательно, согласно принципу сжатия Талагранда [75], сложности Радемахера классов $\mathcal{F}_1$ и $\mathcal{F}_2$ также ограничены величинами $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ и $O(\frac{1}{\sqrt{M}})$ соответственно. $\square$

Доказательство предложения 2.4.2. Доказательство непосредственно следует из предложений 2.5.1, 2.5.2. $\square$

2.5.3 Доказательство теоремы 2.4.3

Прежде чем перейти к выводу двойственной формы задачи (2.3), напомним теорему Фенхеля-Рокафеллара.

Теорема 2.5.3 (Фенхель-Рокафеллар [76]). *Пусть (E, E') и (F, F') — две пары топологически сопряжённых пространств. Пусть $A : E \mapsto F$ — непрерывный линейный оператор, а $\bar{A} : F' \mapsto E'$ — его сопряжённый оператор. Пусть f и g — полунепрерывные снизу и собственные выпуклые функции, определённые на E и F соответственно. Если существует $x \in \text{dom} f$ такое, что g непрерывна в точке Ax , то*

$$\sup_{x \in E} -f(-x) - g(Ax) = \min_{\bar{y} \in F'} \bar{f}(\bar{A} \bar{y}) + \bar{g}(\bar{y})$$

и минимум достигается. Более того, если существует максимизатор $x \in E$, то существует $\bar{y} \in F'$, удовлетворяющее $Ax \in \partial \bar{g}(\bar{y})$ и $\bar{A} \bar{y} \in \partial f(-x)$.

Заметим, что в теореме ниже $\mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)$ **не** обозначает пространство дважды дифференцируемых непрерывных функций. Точное определение этого пространства и $\mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$ дано в части **обозначений**.

Теорема 2.5.4 (Двойственная форма задачи (2.3)). *Прямая задача UEOT (2.3) имеет двойственную форму (2.4), где потенциалы (φ, ψ) принадлежат пространству $\mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$. Минимум (2.3) достигается для единственного $\gamma^* \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$.*

Доказательство. Напомним, что в прямой форме минимизация производится по функциям γ , принадлежащим $\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. В этом доказательстве предполагается, что это пространство наделено наименьшей топологией $\sigma(\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d))$, относительно которой непрерывны линейные функционалы $\gamma \mapsto \int \zeta d\gamma$, $\forall \zeta \in \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$. Тогда топологическое пространство $(\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d), \sigma(\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)))$ имеет топологически сопряжённое пространство $(\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d), \sigma(\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)))'$, которое, фактически, (линейно) изоморфно пространству $\mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, см. [77, Лемма 9.9]. Этот факт открывает возможность применить хорошо известную теорему Фенхеля-Рокафеллара. Для этого рассмотрим пространства $E \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)$, $F \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ и их сопряжённые пространства $E' \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d)$, $F' \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$.

Шаг 1. Напомним, что для любой функции $g : \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ её выпуклая сопряжённая функция определяется для каждого $\zeta \in (\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d))' \cong \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ как $\bar{g}(\zeta) = \sup_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} \{\langle \gamma, \zeta \rangle - g(\gamma)\}$. Для удобства дальнейших выводов введём дополнительные функционалы, соответствующие слагаемым в прямой задаче UEOT (2.3):

$$\begin{aligned} P(\gamma) &\stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \gamma(x, y) dx dy - \varepsilon H(\gamma); \\ F_1(\gamma_x) &\stackrel{\text{def}}{=} D_{f_1}(\gamma_x \| p); \quad F_2(\gamma_y) \stackrel{\text{def}}{=} D_{f_2}(\gamma_y \| q). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Для наших целей требуется вычислить выпуклые сопряжённые функционалы. К счастью, выпуклые сопряжённые к f -дивергенциям $F_1(\gamma_x)$ и $F_2(\gamma_y)$ функции хорошо известны, см. [78, Proposition 23], и равны

$$\overline{F_1}(\varphi) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f_1}(\varphi(x)) p(x) dx, \quad \overline{F_2}(\psi) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f_2}(\psi(y)) q(y) dy.$$

Чтобы продолжить, вычислим сопряжённый к $P(\gamma)$ функционал:

$$\overline{P}(\zeta) = \overline{\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \gamma(x, y) dx dy - \varepsilon H(\gamma)} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sup_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \zeta(x, y) \gamma(x, y) dx dy - \left(\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\|x - y\|^2}{2} \gamma(x, y) dx dy - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \varepsilon H(\gamma) \right) \right\} = \\
&\quad \sup_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \left(\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2} \right) \gamma(x, y) dx dy + \right. \\
&\quad \left. \varepsilon \underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} -\gamma(x, y) \log \gamma(x, y) dx dy + \|\gamma\|_1 \right)}_{=H(\gamma)} \right\} = \\
&\quad \sup_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} \varepsilon \cdot \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \gamma(x, y) \left(\frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} - \log \gamma(x, y) \right) dx dy + \|\gamma\|_1 \right\} = \\
&\quad \sup_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} -\varepsilon \cdot \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \gamma(x, y) \left(\log \gamma(x, y) - \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right) dx dy - \|\gamma\|_1 \right\} = \\
&\quad \sup_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} -\varepsilon \cdot \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \gamma(x, y) \left(\log \gamma(x, y) - \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right) dx dy - \|\gamma\|_1 + \right. \\
&\quad \left. \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{ \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right\} dx dy - \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{ \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right\} dx dy}_{=0} \right\} = (2.31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\sup_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} (-\varepsilon) \cdot \left\{ D_{\text{KL}} \left(\gamma \parallel \exp\left\{ \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right\} \right) - \right. \\
&\quad \left. \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{ \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right\} dx dy \right\}. (2.32)
\end{aligned}$$

Здесь при переходе от (2.31) к (2.32) мы учитываем вычисления D_{KL} в (2.28). Напомним, что D_{KL} неотрицательна и достигает нуля в единственной точке

$$\gamma(x, y) = \exp\left\{ \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right\}. \quad (2.33)$$

Таким образом, получаем

$$\bar{P}(\zeta) = \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{ \frac{\zeta(x, y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}}{\varepsilon} \right\} dx dy. \quad (2.34)$$

Шаг 2. Теперь мы готовы применить теорему Фенхеля–Рокафеллара в нашем случае. Для начала покажем, что эта теорема применима к задаче (2.3), т.е. что рассматриваемые функции удовлетворяют необходимым условиям. Действительно, известно, что выпуклая сопряжённая любого

функционала (например, $\overline{F}_1(\cdot)$, $\overline{F}_2(\cdot)$, $\overline{P}(\cdot)$) является **полу непрерывной снизу и выпуклой**. Кроме того, перечисленные функционалы являются **собственными выпуклыми**². Действительно, собственность $\overline{F}_1(\cdot)$ и $\overline{F}_2(\cdot)$ следует из того факта, что f -дивергенции сами являются полу непрерывными снизу и собственными, в то время как собственность $\overline{P}(\cdot)$ очевидна из (2.32).

Теперь рассмотрим линейный оператор $A : \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d) \mapsto \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$, определенный как $A(\varphi, \psi) : (x, y) \mapsto \varphi(x) + \psi(y)$. Он является непрерывным, а его сопряжённый оператор определяется на $\mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ как $\overline{A}(\gamma) = (\gamma_x, \gamma_y)$. Действительно, $\langle \overline{A}(\gamma), (u, v) \rangle = \langle \gamma, A(u, v) \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \gamma(x, y)(u(x) + v(y)) dx dy = \int_{\mathbb{R}^d} \gamma_x(x) u(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \gamma_y(y) v(y) dy$. Таким образом, сильная двойственность и существование минимизатора для (2.3) следуют из теоремы Фенхеля–Рокафеллара, которая утверждает, что оптимальные значения задач

$$\sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)} \{-\overline{P}(A(\varphi, \psi)) - \overline{F}_1(-\varphi) - \overline{F}_2(-\psi)\} \quad (2.35)$$

и

$$\min_{\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)} \{P(\gamma) + F_1(\gamma_x) + F_2(\gamma_y)\} \quad (2.36)$$

совпадают. Единственность минимизатора для (2.3) следует из строгой выпуклости $P(\cdot)$ (которая имеет место благодаря энтропийному слагаемому). Заметим, что сопряжённый функционал суммы F_1 и F_2 равен сумме их сопряжённых, поскольку они определены на отдельных непересекающихся группах параметров.

Далее докажем, что значение супремума не изменится, если ограничиться рассмотрением пространства $\mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$. Здесь мы используем “ $\wedge$ ” для обозначения операции взятия минимума между функцией $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ и вещественным числом k : $(f \wedge k)(x) \stackrel{\text{def}}{=} \min(f(x), k)$.

Положим $\varphi_{k_1} \stackrel{\text{def}}{=} \varphi \wedge k_1$, $\psi_{k_2} \stackrel{\text{def}}{=} \psi \wedge k_2$. Тогда при $k_1, k_2 \rightarrow \infty$ функции $\varphi_{k_1}, \psi_{k_2}$ монотонно возрастают к φ, ψ соответственно. Кроме того, $\varphi_{k_1}, \psi_{k_2} \in \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$.

Далее достаточно рассматривать пары (φ, ψ) , для которых значение функционала (2.35) конечно, поскольку остальные пары не влияют на супремум. Для таких пар $\overline{F}_1(-\varphi), \overline{F}_2(-\psi) < +\infty$. Кроме того, из $f_i(1) = 0$ следует,

²Собственная выпуклая функция — это вещественнозначная выпуклая функция с непустой областью определения, которая никогда не принимает значение $(-\infty)$ и не является тождественно равной $(+\infty)$. Это свойство гарантирует, что задача минимизации для этой функции имеет нетривиальные решения.

что $\bar{f}_i(s) \geq s$, поэтому $\bar{F}_1(-\varphi), \bar{F}_2(-\psi) > -\infty$ ввиду интегрируемости φ и ψ относительно мер p, q соответственно. Следовательно, функционалы конечны.

Сначала рассмотрим член, содержащий $\bar{P}$. Поскольку $A(\varphi, \psi)(x, y) = \varphi(x) + \psi(y)$, функции $A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2})$ не убывают по k_1, k_2 и

$$\lim_{k_1, k_2 \rightarrow \infty} A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2}) = A(\varphi, \psi).$$

Тогда по определению сопряженного функционала и ввиду неотрицательности мер $\gamma \in \mathcal{M}_{2,+}(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ получаем

$$\begin{aligned} \bar{P}(A(\varphi, \psi)) &= \sup_{\gamma} \{ \langle \gamma, A(\varphi, \psi) \rangle - P(\gamma) \} \\ &= \sup_{\gamma} \sup_{k_1, k_2} \{ \langle \gamma, A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2}) \rangle - P(\gamma) \} \\ &= \sup_{k_1, k_2} \sup_{\gamma} \{ \langle \gamma, A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2}) \rangle - P(\gamma) \} \\ &= \sup_{k_1, k_2} \bar{P}(A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2})). \end{aligned}$$

Поскольку $\bar{P}(A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2}))$ также не убывает по k_1, k_2 , отсюда следует

$$\lim_{k_1, k_2 \rightarrow \infty} \bar{P}(A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2})) = \bar{P}(A(\varphi, \psi)) \implies - \lim_{k_1, k_2 \rightarrow \infty} \bar{P}(A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2})) = -\bar{P}(A(\varphi, \psi)).$$

Далее рассмотрим член $-\bar{F}_1(-\varphi)$, имеющий вид

$$-\bar{F}_1(-\varphi) = \int_{\mathbb{R}^d} -\bar{f}_1(-\varphi(x)) p(x) dx, \text{ где } \bar{f}_1(s) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{t \geq 0} \{st - f_1(t)\}.$$

Поскольку супремум в определении $\bar{f}_1$ берется по $t \geq 0$, функция $\bar{f}_1$ не убывает. Кроме того, функции $-\bar{f}_1(-\varphi_{k_1})$ монотонно возрастают и для каждого $x \in \mathbb{R}^d$

$$\lim_{k_1 \rightarrow \infty} [-\bar{f}_1(-\varphi_{k_1}(x))] = -\bar{f}_1(-\varphi(x)).$$

При этом $-\bar{F}_1(-\varphi_{k_1})$ конечно, поскольку

$$-\bar{f}_1(-\varphi_{k_1}) = -\bar{f}_1(-\varphi) \mathbf{1}_{\{\varphi \leq k_1\}} - \bar{f}_1(-k_1) \mathbf{1}_{\{\varphi > k_1\}},$$

где $-\bar{f}_1(-\varphi)$ интегрируема ввиду конечности $-\bar{F}_1(-\varphi)$, а $-\bar{f}_1(-k_1)$ — конечное число. Значит соответствующие интегралы конечны и ограничены сверху значением $-\bar{F}_1(-\varphi)$. Следовательно, по теореме Леви о монотонной сходимости:

$$\lim_{k_1 \rightarrow \infty} [-\bar{F}_1(-\varphi_{k_1})] = \lim_{k_1 \rightarrow \infty} \left[- \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi_{k_1}) p(x) dx \right] = - \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi) p(x) dx = -\bar{F}_1(-\varphi).$$

Аналогично доказывается, что $\lim_{k_2 \rightarrow \infty} [-\bar{F}_2(-\psi_{k_2})] = -\bar{F}_2(-\psi)$. Отсюда имеем $-\bar{P}(A(\varphi, \psi)) - \bar{F}_1(-\varphi) - \bar{F}_2(-\psi) = \lim_{k_1, k_2 \rightarrow \infty} [-\bar{P}(A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2})) - \bar{F}_1(-\varphi_{k_1}) - \bar{F}_2(-\psi_{k_2})]$.

В результате получаем:

$$\begin{aligned} & \sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)} \{-\bar{P}(A(\varphi, \psi)) - \bar{F}_1(-\varphi) - \bar{F}_2(-\psi)\} = \\ & \sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)} \lim_{k_1, k_2 \rightarrow \infty} \{-\bar{P}(A(\varphi_{k_1}, \psi_{k_2})) - \bar{F}_1(-\varphi_{k_1}) - \bar{F}_2(-\psi_{k_2})\} \leq \\ & \sup_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)} \{-\bar{P}(A(\varphi, \psi)) - \bar{F}_1(-\varphi) - \bar{F}_2(-\psi)\}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Обратное неравенство следует из включения $\mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \subset \mathcal{C}_2(\mathbb{R}^d)$. Следовательно, указанные супремумы совпадают. $\square$

Доказательство теоремы 2.4.3. Необходимо доказать, что для всех $\delta > 0$ существуют ненормированные смеси гауссовских распределений u_ω и v_θ такие, что $\mathcal{L}(\theta, \omega) - \mathcal{L}^* < \delta\varepsilon$. Определим

$$\mathcal{J}(\varphi, \psi) \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{\frac{\varphi(x) + \psi(y) - \frac{\|x-y\|^2}{2}}{\varepsilon}\right\} dx dy + \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\varphi(x)) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\psi(y)) q(y) dy.$$

Из (2.4) и теоремы 2.5.4 следует, что $\mathcal{L}^* = \inf_{(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)} \mathcal{J}(\varphi, \psi)$. Тогда, используя определение инфимума, получаем, что для всех $\delta' > 0$ существуют некоторые функции $(\hat{\varphi}, \hat{\psi}) \in \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$ такие, что $\mathcal{J}(\hat{\varphi}, \hat{\psi}) < \mathcal{L}^* + \delta'$. Для дальнейших выводов положим $\delta' \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\delta\varepsilon}{2}$ и выберем соответствующие $(\hat{\varphi}, \hat{\psi})$.

Шаг 1. Мы начнём с вывода некоторых неравенств, полезных для следующих шагов. Поскольку $(\varphi, \psi) \in \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d) \times \mathcal{C}_{2,b}(\mathbb{R}^d)$, они имеют верхние оценки $\hat{a}$ и $\hat{b}$ такие, что для всех $x, y \in \mathbb{R}^d$: $\hat{\varphi}(x) \leq \hat{a}$ и $\hat{\psi}(y) \leq \hat{b}$ соответственно. Напомним, что по предположению теоремы меры p и q имеют компактный носитель. Таким образом, существуют шары с центрами в $x = 0$ и $y = 0$ и имеющие некоторый радиус $R > 0$, которые содержат носители p и q соответственно. Определим

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}(x) & \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\varphi}(x) - \max\{0, \max\{\|x\|^2 - R^2, \|x\|^4 - R^4\}\} \leq \hat{\varphi}(x) \leq \hat{a}; \\ \tilde{\psi}(y) & \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\psi}(y) - \max\{0, \|y\|^2 - R^2\} \leq \hat{\psi}(y) \leq \hat{b}. \end{aligned}$$

Мы получаем, что

$$\tilde{\varphi}(x) \leq \hat{\varphi}(x), \tilde{\psi}(y) \leq \hat{\psi}(y) \implies$$

$$\begin{aligned} \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{\frac{1}{\varepsilon}(\tilde{\varphi}(x) + \tilde{\psi}(y) - \frac{\|x - y\|^2}{2})\right\} dx dy &\leq \\ \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{\frac{1}{\varepsilon}(\hat{\varphi}(x) + \hat{\psi}(y) - \frac{\|x - y\|^2}{2})\right\} dx dy & \end{aligned} \quad (2.38)$$

Важно, что для всех x и y из носителей p и q выполняется $\tilde{\varphi}(x) = \hat{\varphi}(x)$ и $\tilde{\psi}(y) = \hat{\psi}(y)$, соответственно. Тогда

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\hat{\varphi}(x))p(x)dx &= \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_1(-\tilde{\varphi}(x))p(x)dx, \\ \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\hat{\psi}(y))q(y)dy &= \int_{\mathbb{R}^d} \bar{f}_2(-\tilde{\psi}(y))q(y)dy. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Комбинируя (2.38) и (2.39), мы получаем, что $\mathcal{J}(\tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) \leq \mathcal{J}(\hat{\varphi}, \hat{\psi}) < \mathcal{L}^* + \delta'$.

Заметим, что функции $\exp\{\tilde{\varphi}(x)/\varepsilon\}$, $\exp\{\tilde{\psi}(y)/\varepsilon\}$ являются непрерывными и неотрицательными. Поэтому, поскольку меры p , q имеют компактный носитель, существуют некоторые константы $e_{\min}$, $h_{\min} > 0$ такие, что $\exp\{\tilde{\varphi}(x)/\varepsilon\} > e_{\min}$ и $\exp\{\tilde{\psi}(y)/\varepsilon\} > h_{\min}$ для всех x , y из носителей мер p , q соответственно. Эти константы понадобятся для следующих шагов.

Шаг 2. Этот шаг доказательства аналогичен [66, Теорема 3.4]. Имеем, что

$$\begin{aligned} \exp(\tilde{\varphi}(x)/\varepsilon) &\leq \exp\left(\frac{\hat{a} - \max\{0, \|x\|^2 - R^2\}}{\varepsilon}\right) \leq \exp\left(\frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon}\right) \cdot \exp(-\|x\|^2/\varepsilon) \\ \exp(\tilde{\psi}(y)/\varepsilon) &\leq \exp\left(\frac{\hat{b} - \max\{0, \|y\|^2 - R^2\}}{\varepsilon}\right) \leq \exp\left(\frac{\hat{b} + R^2}{\varepsilon}\right) \cdot \exp(-\|y\|^2/\varepsilon). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Отсюда можно заключить, что $y \mapsto \exp(\tilde{\psi}(y)/\varepsilon)$ является нормируемой плотностью, поскольку она ограничена сверху ненормированной гауссовской плотностью. Более того, мы видим, что она обращается в нуль на бесконечности. Тогда, используя результат [79, Теорема 5а], получаем, что для всех $\delta'' > 0$ существует ненормированная смесь гауссовских распределений $v_{\tilde{\theta}} = v_{\tilde{\theta}}(y)$ такая, что

$$\|v_{\tilde{\theta}} - \exp(\tilde{\psi}/\varepsilon)\|_{\infty} = \sup_{y \in \mathbb{R}^D} |v_{\tilde{\theta}}(y) - \exp(\tilde{\psi}(y)/\varepsilon)| < \delta''. \quad (2.41)$$

Следуя упомянутой теореме, мы можем взять все ковариации в $v_{\tilde{\theta}}$ скалярными, т.е. определить $v_{\tilde{\theta}}(y) = \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k \mathcal{N}(y|\tilde{r}_k, \varepsilon \tilde{\lambda}_k I_d)$ для некоторых K и $\tilde{\alpha}_k \in \mathbb{R}_+$, $\tilde{r}_k \in \mathbb{R}^d$, $\tilde{\lambda}_k \in \mathbb{R}_+$ ($k \in \{1, \dots, K\}$). Для дальнейших целей положим

$$\delta'' = \frac{\delta\varepsilon}{2} \cdot \left[L_1 \cdot \frac{\varepsilon}{e_{\min}} + L_2 \cdot \frac{\varepsilon}{h_{\min}} + \varepsilon(2\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \left(1 + (\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \exp\left\{\frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon}\right\}\right) \right]^{-1}.$$

Для простоты мы рассмотрим другую смесь $v_\theta(y) \stackrel{\text{def}}{=} v_{\tilde{\theta}}(y) \exp(-\frac{\|y\|^2}{2\varepsilon})$, которая снова является ненормированной и имеет скалярные ковариации, см. доказательство [66, Теорема 3.4] для пояснений. Веса, средние и ковариации этой смеси обозначим как $\alpha_k \in \mathbb{R}_+$, $r_k \in \mathbb{R}^d$ и $\lambda_k \in \mathbb{R}_+$, соответственно.

Мы выводим, что

$$\begin{aligned}
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{1}{\varepsilon} (\tilde{\varphi}(x) + \tilde{\psi}(y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}) \right\} dx dy = \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x - y\|^2}{2\varepsilon} \right\} \exp \left\{ \frac{\tilde{\psi}(y)}{\varepsilon} \right\} dx dy > \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x - y\|^2}{2\varepsilon} \right\} (v_{\tilde{\theta}}(y) - \delta'') dx dy = \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x - y\|^2}{2\varepsilon} \right\} v_{\tilde{\theta}}(y) dx dy - \\
& \delta'' \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x - y\|^2}{2\varepsilon} \right\} dx dy = \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon} \right\} \underbrace{\exp \left\{ \frac{\langle x, y \rangle}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|y\|^2}{2\varepsilon} \right\} v_{\tilde{\theta}}(y)}_{=v_\theta(y)} dx dy - \\
& \delta'' \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x - y\|^2}{2\varepsilon} \right\} dx dy = \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon} \right\} \underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\langle x, y \rangle}{\varepsilon} \right\} v_\theta(y) dy \right)}_{=c_\theta(x)} dx - \\
& \delta'' \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \underbrace{\left(\int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ -\frac{\|x - y\|^2}{2\varepsilon} \right\} dy \right)}_{=(2\pi\varepsilon)^{d/2}} dx = \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon} \right\} c_\theta(x) dx - \delta'' \varepsilon (2\pi\varepsilon)^{d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} dx \stackrel{(2.40)}{>} \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon} \right\} c_\theta(x) dx - \\
& \delta'' \varepsilon (2\pi\varepsilon)^{d/2} \exp \left\{ \frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon} \right\} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ -\|x\|^2/\varepsilon \right\} dx}_{=(\pi\varepsilon)^{d/2}} = \\
& \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon} \right\} c_\theta(x) dx - \delta'' 2^{d/2} \pi^d \varepsilon^{(d+1)} \exp \left\{ \frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon} \right\}. \quad (2.42)
\end{aligned}$$

Шаг 3. На этом этапе мы покажем, что для любого $\delta'' > 0$ существует ненормированная смесь гауссовских распределений $u_{\tilde{\omega}}$, которая является δ'' -близкой к $\exp\{\tilde{\varphi}(x)/\varepsilon\}c_{\theta}(x)$. Используя аналитическое выражение для $c_{\theta}(x)$ из [66, Предложение 3.2], получаем, что

$$c_{\theta}(x) = \sum_{k=1}^K \alpha_k \exp\left\{-\frac{\|r_k\|^2}{2\varepsilon\lambda_k}\right\} \exp\left\{\frac{\|r_k + x\lambda_k\|^2}{2\varepsilon\lambda_k}\right\}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{\tilde{\varphi}(x)}{\varepsilon}\right)c_{\theta}(x) &\leq \exp\left(\frac{\hat{a} - \max\{0, \|x\|^4 - R^4\}}{\varepsilon}\right)c_{\theta}(x) \leq \exp\left(\frac{\hat{a} + R^4}{\varepsilon}\right) \cdot \exp(-\|x\|^4/\varepsilon)c_{\theta}(x) = \\ &= \sum_{k=1}^K \alpha_k \exp\left(\frac{\hat{a} + R^4}{\varepsilon}\right) \exp\left\{-\frac{\|r_k\|^2}{2\varepsilon\lambda_k}\right\} \cdot \exp\left(-\frac{\|x\|^4}{\varepsilon}\right) \exp\left\{\frac{\|r_k + x\lambda_k\|^2}{2\varepsilon\lambda_k}\right\} = \\ &= \sum_{k=1}^K \alpha_k \exp\left(\frac{\hat{a} + R^4}{\varepsilon}\right) \exp\left\{-\frac{\|r_k\|^2}{2\varepsilon\lambda_k}\right\} \cdot \exp\left\{\frac{\|r_k + x\lambda_k\|^2 - 2\lambda_k\|x\|^4}{2\varepsilon\lambda_k}\right\} \end{aligned}$$

Отсюда видно, что $\exp(\tilde{\varphi}(x)/\varepsilon)c_{\theta}(x)$ стремится к нулю при x , стремящемся к бесконечности. Это означает, что отображение $x \mapsto \exp(\tilde{\varphi}(x)/\varepsilon)c_{\theta}(x)$ соответствует нормируемой плотности. Используя [79, Теорема 5а], получаем, что для всех $\delta'' > 0$ существует ненормированная смесь гауссовских распределений $u_{\tilde{\omega}}$ т.ч.

$$\|u_{\tilde{\omega}} - \exp(\tilde{\varphi}/\varepsilon)c_{\theta}\|_{\infty} = \sup_{x \in \mathbb{R}^D} |u_{\tilde{\omega}}(x) - \exp(\tilde{\varphi}(x)/\varepsilon)c_{\theta}(x)| < \delta''. \quad (2.43)$$

Аналогично $v_{\tilde{\theta}}$, будем рассматривать лишь скалярные ковариации в $u_{\tilde{\omega}}$, т.е. определим $u_{\tilde{\omega}} = \sum_{l=1}^L \tilde{\beta}_l \mathcal{N}(x|\tilde{\mu}_l, \varepsilon\tilde{\zeta}_l I_d)$ для некоторых L , $\tilde{\mu}_l \in \mathbb{R}^d$, $\tilde{\zeta}_l \in \mathbb{R}_+$ ($l \in \{1, \dots, L\}$). Кроме того, рассмотрим $u_{\omega}(x) = u_{\tilde{\omega}}(x) \exp\{-\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}\}$, которая также является ненормированной плотностью со скалярными ковариациями. Веса, средние, ковариации этой смеси обозначим как $\beta_l \in \mathbb{R}_+$, $\mu_l \in \mathbb{R}^d$, $\zeta_l \in \mathbb{R}_+$ соответственно.

Далее вспомним уравнение (2.42) и получим, что

$$(2.42) > \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left\{-\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}\right\} (u_{\tilde{\omega}}(x) - \delta'') dx - \delta'' 2^{d/2} \pi^d \varepsilon^{(d+1)} \exp\left\{\frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon}\right\} =$$

$$\begin{aligned} \varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \underbrace{\exp\{-\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}\} u_{\tilde{\omega}}(x) dx}_{=u_{\omega}(x)} - \varepsilon \delta'' \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \exp\{-\frac{\|x\|^2}{2\varepsilon}\} dx}_{=(2\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}}} - \delta'' 2^{d/2} \pi^d \varepsilon^{(d+1)} \exp\left\{\frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon}\right\} = \\ \varepsilon \|u_{\omega}\|_1 - \varepsilon \delta'' (2\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \left(1 + (\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \exp\left\{\frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon}\right\}\right). \end{aligned} \quad (2.44)$$

Шаг 4. Теперь перейдём к другим выражениям. Используя свойство $\frac{1}{t_{\min}}$ -липшицевости функции $t \mapsto \log t$ на интервале $[t_{\min}, +\infty)$, получаем

$$\begin{aligned} \log(\exp\{\frac{\tilde{\Psi}(y)}{\varepsilon}\}) - \log(\exp\{\frac{\tilde{\Psi}(y)}{\varepsilon}\} - \delta'') &\leq \frac{\delta''}{h_{\min}} \implies \\ \log(\exp\{\frac{\tilde{\Psi}(y)}{\varepsilon}\} - \delta'') &\geq \frac{\tilde{\Psi}(y)}{\varepsilon} - \frac{\delta''}{h_{\min}}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Аналогично имеем, что

$$\log(\exp\{\frac{\tilde{\Phi}(x)}{\varepsilon}\} c_{\theta}(x) - \delta'') \geq \frac{\tilde{\Phi}(x)}{\varepsilon} + \log c_{\theta}(x) - \frac{\delta''}{e_{\min}}. \quad (2.46)$$

Используя это неравенство, монотонность функции логарифма и (2.41), получаем

$$\begin{aligned} v_{\tilde{\theta}}(y) &\stackrel{(2.41)}{>} \exp\{\frac{\tilde{\Psi}(y)}{\varepsilon}\} - \delta'' \implies \\ \log v_{\tilde{\theta}}(y) &> \log(\exp\{\frac{\tilde{\Psi}(y)}{\varepsilon}\} - \delta'') \stackrel{(2.45)}{\geq} \frac{\tilde{\Psi}(y)}{\varepsilon} - \frac{\delta''}{h_{\min}} \implies \\ &-\tilde{\Psi}(y) > -\varepsilon \log v_{\tilde{\theta}}(y) - \frac{\varepsilon \delta''}{h_{\min}}; \quad (2.47) \\ u_{\tilde{\omega}}(x) &\stackrel{(2.43)}{>} \exp\{\frac{\tilde{\Phi}(x)}{\varepsilon}\} c_{\theta}(x) - \delta'' \implies \log u_{\tilde{\omega}}(x) > \log(\exp\{\frac{\tilde{\Phi}(x)}{\varepsilon}\} c_{\theta}(x) - \delta'') \stackrel{(2.46)}{\geq} \\ &\frac{\tilde{\Phi}(x)}{\varepsilon} + \log c_{\theta}(x) - \frac{\delta''}{e_{\min}} \implies -\tilde{\Phi}(x) > -\varepsilon \log \frac{u_{\tilde{\omega}}(x)}{c_{\theta}(x)} - \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}}. \quad (2.48) \end{aligned}$$

Напомним, что $\overline{f_1}$ и $\overline{f_2}$ являются неубывающими функциями, а также липшицевыми с константами L_1, L_2 соответственно. Отсюда мы получаем

$$\begin{aligned} \overline{f_2}(-\tilde{\Psi}(y)) &\geq \overline{f_2}(-\varepsilon \log v_{\tilde{\theta}}(y) - \frac{\varepsilon \delta''}{h_{\min}}) = \overline{f_2}(-\varepsilon (\log v_{\theta}(y) + \frac{\|y\|^2}{2\varepsilon}) - \frac{\varepsilon \delta''}{h_{\min}}) = \\ &\overline{f_2}(-\varepsilon \log v_{\theta}(y) - \frac{\|y\|^2}{2} - \frac{\varepsilon \delta''}{h_{\min}}) \geq \overline{f_2}(-\varepsilon \log v_{\theta}(y) - \frac{\|y\|^2}{2}) - L_2 \cdot \frac{\varepsilon \delta''}{h_{\min}}; \quad (2.49) \\ \overline{f_1}(-\tilde{\Phi}(x)) &\geq \overline{f_1}(-\varepsilon \log \frac{u_{\tilde{\omega}}(x)}{c_{\theta}(x)} - \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}}) = \overline{f_1}(-\varepsilon \log u_{\tilde{\omega}}(x) + \varepsilon \log c_{\theta}(x) - \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}}) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \overline{f}_1(-\varepsilon \log u_\omega(x) - \frac{\|x\|^2}{2} + \varepsilon \log c_\theta(x) - \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}}) &= \overline{f}_1(-\varepsilon \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} - \frac{\|x\|^2}{2} - \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}}) \geq \\ &\overline{f}_1(-\varepsilon \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} - \frac{\|x\|^2}{2}) - L_1 \cdot \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Интегрируя эти неравенства по всем x, y из носителей p, q соответственно, имеем

$$\int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_2(-\tilde{\Psi}(y)) q(y) dy \geq \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_2(-\varepsilon \log v_\theta(y) - \frac{\|y\|^2}{2}) q(y) dy - L_2 \cdot \frac{\varepsilon \delta''}{h_{\min}}; \quad (2.51)$$

$$\int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_1(-\tilde{\Phi}(x)) p(x) dx \geq \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_1(-\varepsilon \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} - \frac{\|x\|^2}{2}) p(x) dx - L_1 \cdot \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}}. \quad (2.52)$$

Наконец, комбинируя (2.44) и (2.52), получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\theta, \omega) &= \mathcal{J} \left(\underbrace{\varepsilon \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} + \frac{\|x\|^2}{2}}_{\varphi_{\theta, \omega} \stackrel{\text{def}}{=} } , \underbrace{\varepsilon \log v_\theta(y) + \frac{\|y\|^2}{2}}_{\psi_\theta \stackrel{\text{def}}{=} } \right) = \\ &\varepsilon \|u_\omega\|_1 + \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_1(-\varepsilon \log \frac{u_\omega(x)}{c_\theta(x)} - \frac{\|x\|^2}{2}) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_2(-\varepsilon \log v_\theta(y) - \frac{\|y\|^2}{2}) q(y) dy < \\ &\varepsilon \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp \left\{ \frac{1}{\varepsilon} (\tilde{\Phi}(x) + \tilde{\Psi}(y) - \frac{\|x - y\|^2}{2}) \right\} dx dy + \\ &\int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_1(-\tilde{\Phi}(x)) p(x) dx + \int_{\mathbb{R}^d} \overline{f}_2(-\tilde{\Psi}(y)) q(y) dy + \\ &L_1 \cdot \frac{\varepsilon \delta''}{e_{\min}} + L_2 \cdot \frac{\varepsilon \delta''}{h_{\min}} + \varepsilon \delta'' (2\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \left(1 + (\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \exp \left\{ \frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon} \right\} \right) < \\ &\mathcal{L}^* + \delta' + \delta'' \left[L_1 \cdot \frac{\varepsilon}{e_{\min}} + L_2 \cdot \frac{\varepsilon}{h_{\min}} + \varepsilon (2\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \left(1 + (\pi\varepsilon)^{\frac{d}{2}} \exp \left\{ \frac{\hat{a} + R^2}{\varepsilon} \right\} \right) \right] \leq \\ &\mathcal{L}^* + \frac{\delta\varepsilon}{2} + \frac{\delta\varepsilon}{2} \implies \\ &D_{\text{KL}}(\gamma^* \|\gamma_{\theta, \omega}) \leq \varepsilon^{-1} (\mathcal{L}(\theta, \omega) - \mathcal{L}^*) < \delta \end{aligned}$$

что завершает доказательство. $\square$

Замечание. Строго говоря, предположение о липшицевости $\overline{f}_1(x), \overline{f}_2(x)$ можно опустить. Действительно, при предположениях типа “*всё компактно*” в предложении 2.4.2 и теореме 2.4.3 аргументы $\overline{f}_1(\cdot), \overline{f}_2(\cdot)$ также всегда принадлежат некоторым компактным множествам. Известно, что выпуклые функции являются липшицевыми на компактных подмножествах $\mathbb{R}$, см. [80, Chapter 3, §18], и на самом деле нам не требуется липшицевость на всём $\mathbb{R}$.

2.6 Вычислительные эксперименты

В этом разделе мы тестируем наш метод U-LightOT на нескольких постановках из связанных работ. Код написан с использованием фреймворка PyTorch и находится в открытом доступе по адресу

<https://github.com/milenagazdieva/LightUnbalancedOptimalTransport>.

Эксперименты оформлены в удобном виде ноутбуков *.ipynb. Каждый эксперимент требует нескольких минут обучения на CPU с 4 ядрами. Технические детали экспериментов приведены в разделе 2.7.

2.6.1 Эксперименты со смесью гауссовских распределений

Мы приводим иллюстративный эксперимент ‘*Gaussians Mixture*’ в 2D, чтобы продемонстрировать способность нашего метода работать с дисбалансом классов в исходной и целевой мерах. Мы следуем экспериментальной схеме, предложенной в [32, Рис. 2], и определяем вероятностные меры p, q следующим образом (Рис. 2.1а):

$$p(x) = \frac{1}{4}\mathcal{N}(x|(-3, 3), 0.1 \cdot I_2) + \frac{3}{4}\mathcal{N}(x|(1, 3), 0.1 \cdot I_2),$$

$$q(y) = \frac{3}{4}\mathcal{N}(y|(-3, 0), 0.1 \cdot I_2) + \frac{1}{4}\mathcal{N}(y|(1, 0), 0.1 \cdot I_2).$$

Мы тестируем наш метод U-LightOT с *масштабированными* дивергенциями D_{KL} , т.е. $f_1(t), f_2(t)$ определяются как $\tau \cdot f_{KL}(t) = \tau(t \log(t) - t + 1)$, где $\tau > 0$. Мы приводим обученные планы для $\tau \in [1, 10^1, 10^2]$. Результаты на Рис. 2.1 показывают, что параметр τ может использоваться для контроля уровня несбалансированности обученных планов. При $\tau = 1$ наш метод U-LightOT действительно обучает UEOT планы, см. Рис. 2.1г. При увеличении τ метод перестаёт переносить массу от входных гауссиан к ближайшим целевым. Действительно, при $\tau = 10^2$ наши решения похожи на решения метода [66, LightSB], который аппроксимирует сбалансированные EOT планы между мерами. Далее мы рассматриваем τ как *параметр несбалансированности*.

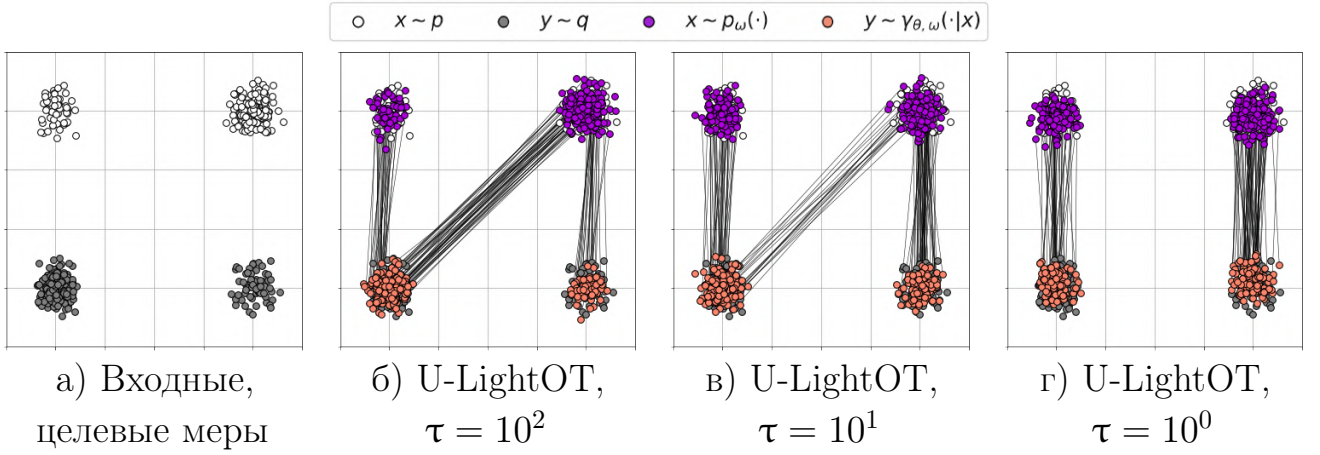


Рис. 2.1 — Условные планы $\gamma_{\theta, \omega}(y|x)$, обученные нашим методом в эксперименте *Gaussians Mixture* с дивергенцией D_{KL} и параметром несбалансированности $\tau \in [10^0, 10^1, 10^2]$. Здесь p_ω обозначает нормированный первый маргинал u_ω , т.е. $p_\omega = u_\omega / \|u_\omega\|_1$.

Использование дивергенции D_{χ^2} . Для полноты мы оцениваем наш подход с дивергенцией D_{χ^2} в эксперименте *Gaussian Mixture*. Мы используем ту же экспериментальную схему, что описана выше, и представляем качественные результаты на Рис. 2.2. Интересно, что результаты метода отличаются от тех, которые мы получаем для дивергенции D_{KL} . Для дивергенции D_{χ^2} носители маргиналов обученных планов составляют лишь части носителей исходной и целевой мер при $\tau = 1$. Эта проблема исчезает при небольшом увеличении τ , т.е. при $\tau = 2$. В то же время дальнейшее увеличение τ бесполезно, поскольку обученные планы не справляются с проблемой дисбаланса классов. Таким образом, параметр τ следует подбирать эвристически. В случае дивергенции D_{KL} носители совпадают для всех τ , см. Рис. 2.1. Это мотивирует нас использовать дивергенции D_{KL} в наших основных экспериментах.

Параметр τ в эксперименте *Gaussians Mixture*. Для полноты мы также проводим количественную оценку нашего метода с дивергенцией D_{KL} для разных параметров несбалансированности τ . Мы вычисляем нормированную стоимость ОТ $(\mathbb{E}_{x \sim p} \mathbb{E}_{y \sim \gamma(y|x)} \frac{(x-y)^2}{2})$ между исходным и сгенерированным распределениями, а также расстояние Васерштейна между сгенерированным и целевым распределениями (вычисленное дискретным методом ОТ). Для полноты мы дополнительно вычисляем метрики для *сбалансированного* подхода [66, LightSB]. Результаты представлены в Таблице 2.

Результаты. Вспомним, что несбалансированная природа нашего метода приводит к двум важным свойствам. Во-первых, метод лучше сохраняет

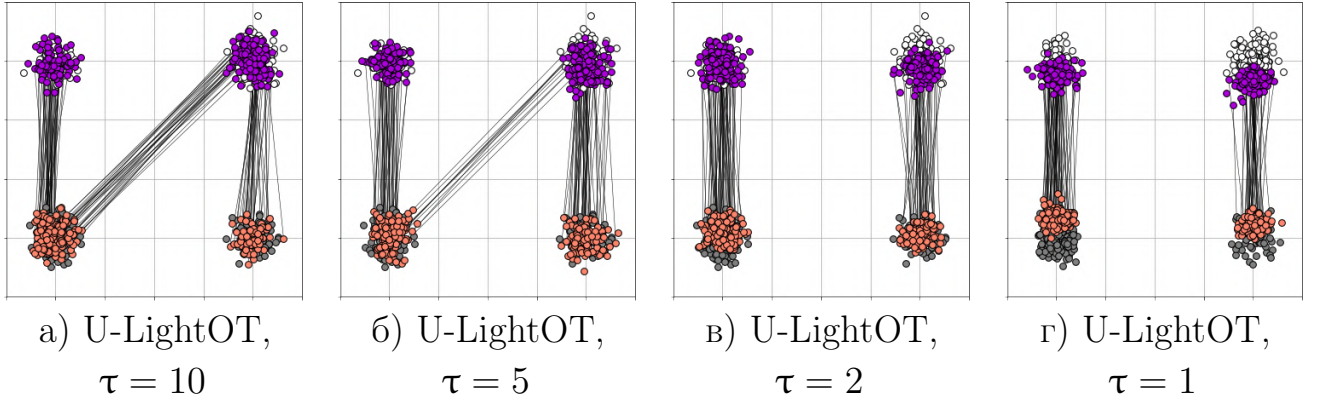


Рис. 2.2 — Условные планы $\gamma_{\theta,\omega}(y|x)$, обученные нашим методом с масштабированными дивергенциями D_{χ^2} в эксперименте *Gaussians Mixture* ($\tau \in [1, 2, 5, 10]$).

Метод	U-LightOT ($\tau = 1$)	U-LightOT ($\tau = 10$)	U-LightOT ($\tau = 50$)	U-LightOT ($\tau = 100$)	LightSB
ОТ стоимость ($\downarrow$)	2.023	2.913	3.874	3.931	3.952
W_2 -расстояние ($\downarrow$)	2.044	1.107	0.138	0.091	0.088

Таблица 2 — Нормированная стоимость ОТ между входным и обученным распределениями и расстояние Васерштейна между обученным и целевым распределениями в эксперименте *Gaussians mixture*.

свойства входных объектов, чем сбалансированные подходы. Действительно, он позволяет сохранять атрибуты объектов (классы) даже в случае дисбаланса классов. Во-вторых, из-за ослабленного граничного условия распределение, порождаемое нашим методом, естественным образом менее похоже на целевое распределение, чем для сбалансированных методов.

Приведённые выше интуитивные рассуждения подтверждаются полученными метриками. Действительно, при увеличении параметра τ , когда наш метод становится всё более и более похожим на сбалансированные подходы, нормированная стоимость ОТ между исходным и порождаемым распределениями увеличивается, а расстояние Васерштейна между обученным и целевым распределениями уменьшается. Базовый метод LightSB [1], который является сбалансированным подходом, показывает наилучшее качество с точки зрения расстояния Васерштейна и наихудшее с точки зрения стоимости ОТ.

Замечание. Здесь мы проводим все эксперименты с параметром энтропийной регуляризации $\varepsilon = 0.05$. Параметр ε отвечает за стохастичность обученного условного плана $\gamma_{\theta}(\cdot|x)$. Поскольку нас в основном интересует корректный перенос массы (контролируемый f_1, f_2), а не стохастичность, мы не уделяем большого внимания ε на протяжении главы.

2.6.2 Иллюстрация устойчивости к выбросам

Чтобы показать свойство устойчивости к выбросам нашего метода, мы проводим эксперимент на смесях гауссовских распределений с добавленными выбросами и визуализируем результаты на Рис. 2.3. Постановка эксперимента схожа с экспериментом *Gaussian mixtures*, см. §2.6.1. Различие заключается в выбросах (малых гауссианах), добавленных к входной, выходной мерам.

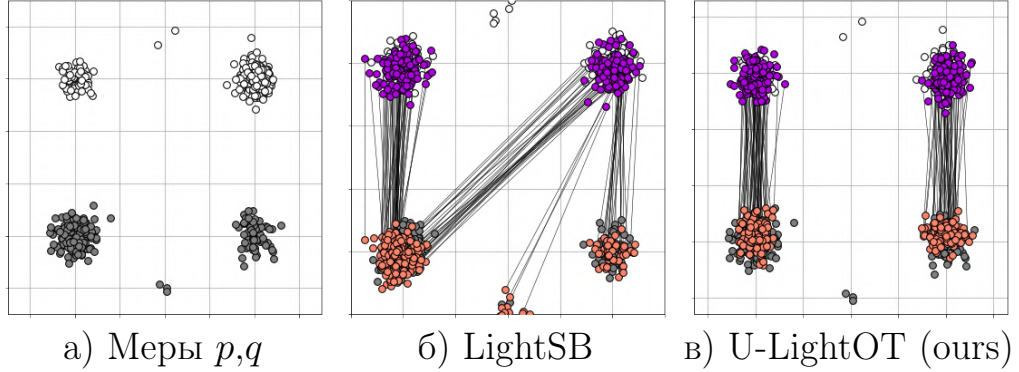


Рис. 2.3 — Условные планы $\gamma_{\theta, \omega}(y|x)$, обученные нашим методом ($\tau = 1$) и LightSB в эксперименте *Gaussian Mixtures with outliers*.

Результаты показывают, что наш метод U-LightOT успешно устраняет выбросы и способен одновременно справляться с проблемой дисбаланса классов. Между тем сбалансированный метод LightSB [66] не справляется ни с одной из проблем.

2.6.3 Непарный перевод изображений

Ещё одним популярным типом экспериментов, который обычно рассматривается в работах по ОТ/ЕОТ, является задача непарного перевода изображений [81]. Поскольку наш метод использует параметризацию на основе смеси гауссовских распределений, может быть трудно применять U-LightOT для решения задачи перевода напрямую в пространстве изображений. К счастью, в настоящее время обычно используют автокодировщики [82] для более эффективного перевода. Мы следуем постановке [66, Section 5.4] и используем предобученный ALAE автокодировщик [83] для набора данных FFHQ [84] с лицами людей размера 1024×1024 . Мы рассматриваем разные подмножества набора данных FFHQ (*Взрослые*, *Юные*, *Мужчины*, *Женщины*) и все варианты переводов между ними: *Взрослые* $\leftrightarrow$ *Юные* и *Женщины* $\leftrightarrow$ *Мужчины*.

Основной сложностью описанных переводов является **дисбаланс** классов в изображениях из исходных и целевых подмножеств, см. Таблицу 3. Рассмотрим более подробно перевод *Взрослые* $\rightarrow$ *Юные*.

В наборе данных FFHQ число *взрослых мужчин* значительно превышает число *взрослых женщин*, в то время как число *юных мужчин* меньше числа *юных женщин*. Таким образом, от сбалансированных методов OT/ЕОТ ожидается, что они переведут часть представителей *взрослых мужчин* в представителей *юных женщин*. В то же время методы, основанные на несбалансированном транспорте, должны смягчать эту проблему.

Базовые методы. Мы проводим сравнение с недавней процедурой [32, UOT-FM], которая рассматривает примерно ту же постановку и демонстрирует хорошее качество. Этот метод интерполирует результаты несбалансированного дискретного OT в непрерывную постановку, используя модели согласования потоков [70]. Для полноты мы включаем сравнение с LightSB и моделью согласования потоков на основе сбалансированного оптимального транспорта (OT-FM) [70], чтобы продемонстрировать проблемы сбалансированных методов. Мы также рассматриваем нейросетевые методы, опирающиеся на состязательное обучение, такие как UOT-SD [22] и UOT-GAN[21].

Метрики. Мы стремимся оценить способность методов выполнять перевод латентных кодов, сохраняя класс входных изображений неизменным, например сохраняя пол при переводе *Взрослые* $\rightarrow$ *Юные*. Для этого мы обучаем 99% MLP классификатор пола, используя латентные коды изображений. Мы используем его, чтобы вычислить точность сохранения пола во время перевода. Мы обозначаем это число как *точность (сохр.)*.

В то же время важно также обеспечить, чтобы порождённые изображения принадлежали распределению целевых изображений, а не исходных, например принадлежали распределению *юных* людей в нашем примере. Для контроля этого свойства мы используем другой 99% MLP классификатор, чтобы определить, принадлежит ли каждое из порождённых изображений целевому домену или исходному. Затем мы вычисляем долю порождённых изображений, принадлежащих целевому домену, которую мы обозначаем как *точность (цел.)*.

Результаты. Подходы несбалансированного OT/ЕОТ оснащены некоторым параметром несбалансированности (как τ в нашем методе),

Класс	Мужчины	Женщины
Юные	15K	23K
Взрослые	7K	3.5K

Таблица 3 — Число *обучающих* изобр. FFHQ по подмножествам

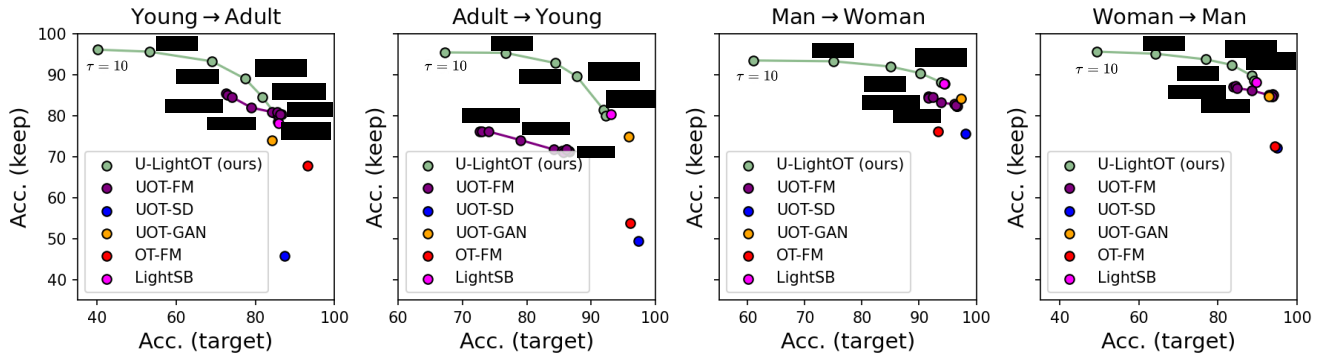


Рис. 2.4 — Визуализация пар точностей (*сохр.-цел.*) для нашего метода U-LightOT и других методов ОТ/ЕОТ в эксперименте по переводу изображений. Значения параметров несбалансированности для нашего метода U-LightOT (τ) и [32, UOT-FM] ($\lambda = \text{reg_m}$) указаны непосредственно на графиках.

Эксперимент	[32, UOT-FM]	[22, UOT-SD]	[21, UOT-GAN]	U-LightOT (наш)
Время (сек.)	<u>03:21</u>	18:11	16:30	02:38

Таблица 4 — Сравнение астрономического времени работы методов несбалансированного ОТ/ЕОТ в переводе *Юные* → *Взрослые*. Наилучшие результаты выделены **жирным**, вторые по качеству подчёркнуты.

который влияет на результаты методов: при увеличении несбалансированности точность сохранения класса увеличивается, но точность отображения в целевой класс уменьшается. Последнее происходит из-за ослабления ограничений на маргиналы в UEOT. Для честного сравнения мы стремимся вычислить взаимозависимость между точностями (*сохр./цел.*) для разных значений несбалансированности. Мы делаем это для нашего метода и UOT-FM. Мы обнаружили, что несбалансированные подходы на основе GAN демонстрируют нестабильное поведение, поэтому мы приводим результаты UOT-SD и UOT-GAN только для одного значения параметра.

Для удобства мы визуализируем пары точностей для нашего метода и его конкурентов на Рис. 2.4. Оценка показывает, что наш метод U-LightOT может эффективно решать задачи перевода в высоких размерностях ($d = 512$) и превосходит альтернативы в работе с проблемой дисбаланса классов. А именно, мы видим, что наш метод позволяет достигать лучшей точности сохранения атрибутов входных изображений, чем другие методы, при этом обеспечивая хорошую точность отображения в целевой класс. В то время как сбалансированные методы и некоторые несбалансированные обеспечивают очень высокую точность отображения в целевой класс, соответствующие

точности сохранения атрибутов у них хуже, чем у нас, что означает, что мы лучше справляемся с проблемой дисбаланса классов. Как и ожидается, при большом параметре τ результаты нашего метода U-LightOT совпадают с результатами LightSB, который является сбалансированным методом. При этом наш метод имеет наименьшее астрономическое время работы среди существующих несбалансированных методов, см. Таблицу 4 для сравнения. Мы демонстрируем качественные результаты нашего метода и базовых методов на Рис. 2.5. Выбор параметра несбалансированности для визуализации нашего метода и UOT-FM подробно описан в разделе 2.7. В разделе 2.6.4 мы проводим абляционное исследование нашего метода, фокусируясь на выборе параметров τ , ε и числа компонент смесей гауссовских распределений.

Ниже мы приводим дополнительные результаты количественного сравнения нашего метода U-LightOT и других методов несбалансированного и сбалансированного OT/ЕОТ в эксперименте по переводу изображений. Таблицы 5, 6, 7 содержат значения, использованные для построения Рис. 2.4. Параметры несбалансированности, использованные для нашего метода U-LightOT и [32, UOT-FM], указаны непосредственно в Таблицах. Для получения результата метода [22, UOT-SD] мы используем их параметр несбалансированности $\tau = 0.002$. Подробнее о параметрах методов, использованных для получения результатов ниже, см. раздел 2.7. Заметим, что мы не включаем метрику FID для оценки качества порождённых изображений, поскольку мы обнаружили, что она не является репрезентативной метрикой для оценки качества моделей, выполняющих перевод латентных кодов ALAE.

Эксперимент	OT-FM [32]	[66, LightSB] или [67, LightSBM]	[32, UOT-FM]	UOT-SD [22]	UOT-GAN [21]	U-LightOT (наш)
<i>Юные</i> → <i>Взр.</i>	67.71	78.16	84.46 ($reg_m = 0.005$)	45.71	73.85	84.49 ($\tau = 250$)
<i>Взр.</i> → <i>Юные</i>	53.79	80.25	76.05 ($reg_m = 0.005$)	49.30	74.74	89.48 ($\tau = 10^2$)
<i>Муж.</i> → <i>Жен.</i>	76.05	87.82	84.42 ($reg_m = 0.005$)	75.50	84.04	90.30 ($\tau = 10^2$)
<i>Жен.</i> → <i>Муж.</i>	72.40	88.10	86.10 ($reg_m = 0.05$)	72.03	84.56	89.66 ($\tau = 10^3$)

Таблица 5 — Сравнение точности (сохр.).

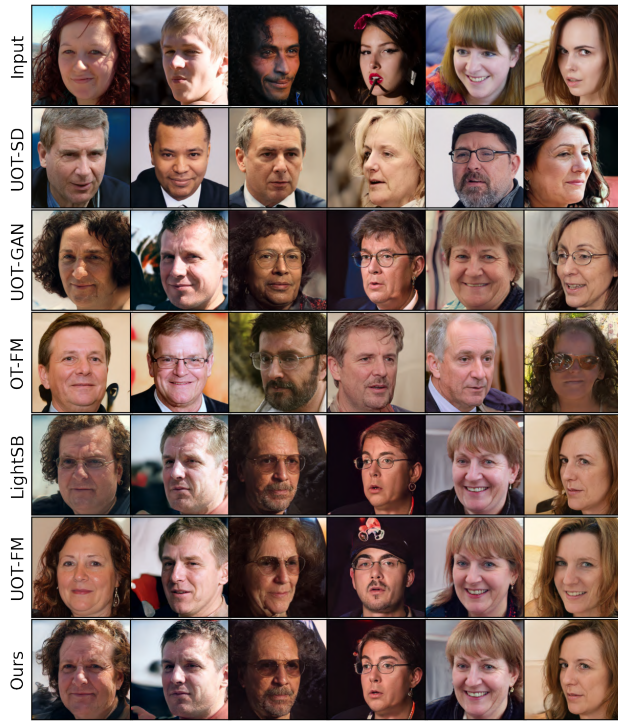
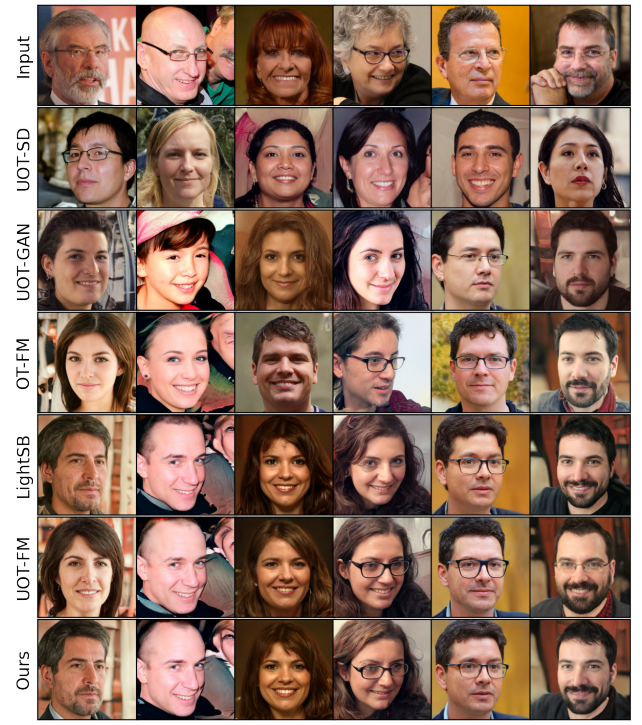
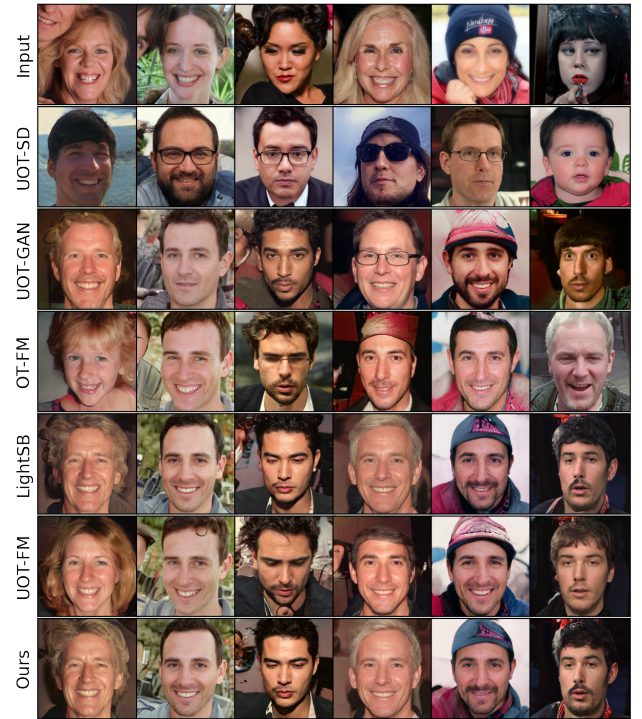
а) Юные $\rightarrow$ Взрослыеб) Взрослые $\rightarrow$ Юныев) Мужчины $\rightarrow$ Женщиныг) Женщины $\rightarrow$ Мужчины

Рис. 2.5 — Непарный перевод с методами LightSB, OT-FM, UOT-FM и нашим U-LightOT, применёнными в латентном пространстве ALAE [83] для изображений FFHQ [84] (1024×1024).

Эксперимент	OT-FM [32]	[66, LightSB] или [67, LightSBM]	[32, UOT-FM]	UOT-SD [22]	UOT-GAN [21]	U-LightOT (наш)
<i>Юные</i> → <i>Взр.</i>	93.28	85.97	74.10 ($reg_m = 0.005$)	87.33	84.25	81.78 ($\tau = 250$)
<i>Взр.</i> → <i>Юные</i>	96.12	93.10	89.30 ($reg_m = 0.005$)	97.39	95.88	87.79 ($\tau = 10^2$)
<i>Муж.</i> → <i>Жен.</i>	93.33	94.37	92.35 ($reg_m = 0.005$)	98.16	97.38	90.23 ($\tau = 10^2$)
<i>Жен.</i> → <i>Муж.</i>	94.27	89.66	88.53 ($reg_m = 0.05$)	94.96	92.91	88.59 ($\tau = 10^3$)

Таблица 6 — Сравнение точности (цел.).

Эксперимент	OT-FM [32]	[66, LightSB] или [67, LightSBM]	[32, UOT-FM]	UOT-SD [22]	UOT-GAN [21]	U-LightOT (наш)
<i>Юные</i> → <i>Взр.</i>	11.93	15.50	11.57 ($reg_m = 0.005$)	13.28	11.23	17.15 ($\tau = 250$)
<i>Взр.</i> → <i>Юные</i>	14.10	21.41	17.00 ($reg_m = 0.005$)	18.44	14.94	30.79 ($\tau = 10^2$)
<i>Муж.</i> → <i>Жен.</i>	16.20	20.91	10.31 ($reg_m = 0.005$)	16.13	22.41	27.29 ($\tau = 10^2$)
<i>Жен.</i> → <i>Муж.</i>	11.42	30.87	6.99 ($reg_m = 0.05$)	13.23	10.55	24.68 ($\tau = 10^3$)

Таблица 7 — Сравнение FD между истинными и сгенерированными латентными кодами.

2.6.4 Абляционное исследование параметров в экспериментах по переводу изображений

В этом разделе приведены результаты абляционного исследования нашего метода, выявляющего влияние параметров τ , ε и числа компонент смесей гауссовских распределений.

Параметры τ , ε в экспериментах с изображениями. Эффект параметра энтропийной регуляризации ε хорошо изучен, см., например, [41; 66]. А именно, увеличение параметра ε стимулирует условные распределения $\gamma_\theta(y|x)$ становиться более дисперсными. Тем не менее ниже мы приводим дополнительный количественный анализ его влияния на обученный перевод. Кроме того, мы рассматриваем вопрос *как параметр τ влияет на качество нашего метода в экспериментах по переводу изображений?* Чтобы ответить на этот вопрос, мы обучаем переводы *Юные*→*Взрослые*, *Мужчины*→*Женщины* на наборе данных FFHQ, варьируя параметры τ , ε , см. §2.6.3 для деталей экспериментальной постановки. Мы тестируем наш метод с масштабированной дивергенцией D_{KL} , обучая его в течение 5K итераций. Остальные гиперпараметры приведены в разделе 2.7. В Таблицах 8, 11, 14, 17 мы приводим точность сохранения атрибутов исходных изображений (например, пола при переводе *Юные*→*Взрослые*). В Таблицах 9, 12, 15, 18 мы приводим точность отображения в корректный целевой класс (например, *взрослые* люди

при переводе *Юные* $\rightarrow$ *Взрослые*). В Таблицах 10, 13, 16, 19 мы приводим метрики FD, которые определяются как *расстояние Фреше* между средними и ковариациями обученных и целевых мер. Для удобства мы дополнительно иллюстрируем результаты абляционных исследований на Рис. 2.6.

$\begin{smallmatrix} \tau \\ \epsilon \end{smallmatrix}$	10	20	50	10^2	250	10^3	10^6
0.01	96.37 $\pm$ 0.07	96.12 $\pm$ 0.25	93.44 $\pm$ 0.22	90.26 $\pm$ 0.18	85.15 $\pm$ 0.82	81.79 $\pm$ 0.98	79.27 $\pm$ 1.11
0.05	96.03 $\pm$ 0.08	95.55 $\pm$ 0.13	93.19 $\pm$ 0.55	88.93 $\pm$ 0.94	84.49 $\pm$ 1.57	80.59 $\pm$ 0.55	78.42 $\pm$ 0.73
0.1	95.20 $\pm$ 0.21	94.92 $\pm$ 0.24	92.30 $\pm$ 0.25	87.99 $\pm$ 0.83	82.91 $\pm$ 1.01	78.76 $\pm$ 0.50	78.25 $\pm$ 0.87
0.5	88.53 $\pm$ 0.26	87.46 $\pm$ 0.41	83.41 $\pm$ 0.80	80.14 $\pm$ 0.56	76.00 $\pm$ 0.84	73.36 $\pm$ 0.23	71.84 $\pm$ 0.27
1.0	—	81.26 $\pm$ 1.09	77.84 $\pm$ 0.33	74.33 $\pm$ 0.54	71.01 $\pm$ 1.13	67.43 $\pm$ 0.15	66.71 $\pm$ 0.13

Таблица 8 — Тестовая точность (сохр.) ($\uparrow$) при переводе *Юные* $\rightarrow$ *Взр.*

$\begin{smallmatrix} \tau \\ \epsilon \end{smallmatrix}$	10	20	50	10^2	250	10^3	10^6
0.01	38.94 $\pm$ 0.91	51.92 $\pm$ 0.80	67.68 $\pm$ 1.06	75.49 $\pm$ 0.30	81.34 $\pm$ 1.06	83.67 $\pm$ 0.74	85.27 $\pm$ 1.35
0.05	40.09 $\pm$ 0.16	53.19 $\pm$ 0.49	69.01 $\pm$ 0.74	77.41 $\pm$ 0.67	81.78 $\pm$ 0.33	84.80 $\pm$ 0.90	85.63 $\pm$ 0.76
0.1	44.18 $\pm$ 1.50	56.74 $\pm$ 0.58	71.77 $\pm$ 0.57	78.34 $\pm$ 0.91	83.70 $\pm$ 0.54	87.07 $\pm$ 0.37	88.21 $\pm$ 0.23
0.5	50.51 $\pm$ 0.34	65.61 $\pm$ 2.04	81.50 $\pm$ 1.17	87.48 $\pm$ 0.06	92.21 $\pm$ 0.29	92.93 $\pm$ 0.14	93.80 $\pm$ 0.55
1.0	—	70.81 $\pm$ 2.69	83.82 $\pm$ 2.45	89.56 $\pm$ 0.50	93.78 $\pm$ 0.35	95.04 $\pm$ 0.20	95.50 $\pm$ 0.41

Таблица 9 — Тестовая точность (цел.) ($\uparrow$) при переводе *Юные* $\rightarrow$ *Взр.*

$\begin{smallmatrix} \tau \\ \epsilon \end{smallmatrix}$	10	20	50	10^2	250	10^3	10^6
0.01	35.55 $\pm$ 1.24	26.77 $\pm$ 1.59	17.39 $\pm$ 0.19	16.42 $\pm$ 1.96	12.28 $\pm$ 1.16	11.46 $\pm$ 0.70	10.85 $\pm$ 0.12
0.05	42.05 $\pm$ 3.04	31.47 $\pm$ 0.03	23.90 $\pm$ 1.49	18.31 $\pm$ 0.16	17.15 $\pm$ 0.48	16.27 $\pm$ 0.62	19.89 $\pm$ 5.51
0.1	50.05 $\pm$ 2.48	40.67 $\pm$ 0.73	31.15 $\pm$ 0.32	27.49 $\pm$ 0.56	25.86 $\pm$ 0.88	24.57 $\pm$ 0.06	26.30 $\pm$ 0.15
0.5	114.49 $\pm$ 1.06	104.42 $\pm$ 0.33	98.21 $\pm$ 4.21	92.48 $\pm$ 0.98	89.42 $\pm$ 0.10	88.74 $\pm$ 0.12	89.55 $\pm$ 1.18
1.0	—	165.39 $\pm$ 1.50	149.84 $\pm$ 0.86	142.39 $\pm$ 0.18	137.40 $\pm$ 0.21	135.85 $\pm$ 0.17	135.25 $\pm$ 0.17

Таблица 10 — Тест. FD ($\downarrow$) полученных латент. кодов при переводе *Юные* $\rightarrow$ *Взр.*

$\begin{smallmatrix} \tau \\ \epsilon \end{smallmatrix}$	10	20	50	10²	10^3	10^6
0.01	96.14 $\pm$ 0.08	95.96 $\pm$ 0.03	93.60 $\pm$ 0.72	89.88 $\pm$ 0.74	81.49 $\pm$ 0.89	80.19 $\pm$ 2.17
0.05	95.36 $\pm$ 0.41	95.26 $\pm$ 0.24	92.77 $\pm$ 0.48	89.48 $\pm$ 0.60	81.34 $\pm$ 0.35	79.99 $\pm$ 0.42
0.1	94.73 $\pm$ 0.22	94.33 $\pm$ 0.21	92.65 $\pm$ 0.52	89.12 $\pm$ 0.40	81.06 $\pm$ 0.82	77.73 $\pm$ 1.21
0.5	88.21 $\pm$ 0.82	88.43 $\pm$ 0.15	86.13 $\pm$ 0.94	83.89 $\pm$ 0.67	74.92 $\pm$ 0.53	70.32 $\pm$ 1.46
1.0	—	81.67 $\pm$ 0.94	79.71 $\pm$ 1.28	77.15 $\pm$ 1.65	67.80 $\pm$ 0.30	65.31 $\pm$ 0.90

Таблица 11 — Тестовая точность (сохр.) ($\uparrow$) при переводе *Взрослые* $\rightarrow$ *Юные*.

Результаты показывают, что увеличение ϵ негативно влияет как на точность сохранения атрибутов исходных изображений, так и на FD порождённых латентных кодов, что вызвано увеличенной дисперсностью $\gamma_{\theta}(y|x)$.

$\begin{matrix} \tau \\ \epsilon \end{matrix}$	10	20	50	<u>10²</u>	10 ³	10 ⁶
0.01	67.45±0.51	76.38±0.36	84.86±0.23	87.87±0.37	91.56±0.40	92.29±0.37
0.05	67.21±0.10	76.66±1.22	84.43±0.40	87.79±0.38	91.98±0.50	92.29±0.71
0.1	65.29±1.54	76.58±1.10	84.29±0.73	88.65±0.64	92.33±0.49	92.87±0.11
0.5	69.13±3.43	76.74±1.39	82.33±6.53	86.86±2.89	94.06±0.62	94.91±0.45
1.0	—	80.13±1.89	85.87±0.53	91.00±0.62	95.66±0.41	96.37±0.52

Таблица 12 — Тест. точность (цел.) ($\uparrow$) при переводе *Взрослые* $\rightarrow$ *Юные*.

$\begin{matrix} \tau \\ \epsilon \end{matrix}$	10	20	50	<u>10²</u>	10 ³	10 ⁶
0.01	45.58±7.90	31.24±0.62	22.44±0.32	18.23±0.24	17.30±2.99	24.29±12.53
0.05	60.09±13.23	38.88±3.33	27.85±0.07	30.79±8.58	24.59±4.48	26.44±7.23
0.1	54.45±1.07	46.52±0.70	41.98±5.22	34.02±0.25	44.25±9.33	40.16±7.51
0.5	128.91±1.09	121.00±0.91	116.78±10.57	111.49±5.02	102.51±0.04	102.31±0.11
1.0	—	187.33±1.64	173.11±1.67	171.32±13.12	156.25±4.40	152.73±0.38

Таблица 13 — Тест. FD ($\downarrow$) полученных латент. кодов при переводе *Взр.* $\rightarrow$ *Юные*.

$\begin{matrix} \tau \\ \epsilon \end{matrix}$	10	20	50	<u>10²</u>	10 ³	10 ⁶
0.01	93.75±0.10	93.28±0.07	92.01±0.16	90.85±0.12	88.70±0.36	87.62±0.34
0.05	93.40±0.17	93.20±0.14	91.91±0.25	90.30±0.39	88.05±0.20	87.77±0.23
0.1	92.99±0.18	92.78±0.15	91.24±0.46	89.57±0.06	87.45±0.62	87.21±0.11
0.5	89.96±0.40	88.34±0.37	87.24±0.26	86.75±1.06	84.09±0.31	83.54±0.41
1.0	—	84.94±0.54	83.54±0.41	81.80±0.14	80.72±0.20	79.87±0.47

Таблица 14 — Тест. точность (сохр.) ($\uparrow$) при переводе *Муж.* $\rightarrow$ *Жен.*

$\begin{matrix} \tau \\ \epsilon \end{matrix}$	10	20	50	<u>10²</u>	10 ³	10 ⁶
0.01	61.38±0.29	74.57±0.78	85.78±0.87	90.32±0.70	93.79±0.26	94.19±0.40
0.05	60.97±1.14	74.99±0.32	85.01±0.64	90.23±0.50	93.87±0.25	94.44±0.07
0.1	61.36±0.60	73.52±0.24	86.38±0.40	90.38±0.39	94.19±0.28	94.73±0.36
0.5	65.74±0.87	73.61±0.58	86.45±0.48	89.80±0.66	95.14±0.58	95.59±0.61
1.0	—	78.18±0.18	86.85±0.74	91.50±0.74	95.63±0.14	95.93±0.17

Таблица 15 — Тест. точность (цел.) ($\uparrow$) при переводе *Муж.* $\rightarrow$ *Жен.*

$\begin{matrix} \tau \\ \epsilon \end{matrix}$	10	20	50	<u>10²</u>	10 ³	10 ⁶
0.01	54.84±4.12	37.87±0.55	27.27±3.17	22.69±3.48	27.73±4.28	17.32±1.29
0.05	51.61±2.58	51.25±11.78	34.28±1.04	27.29±2.60	30.63±1.67	25.77±2.22
0.1	59.45±3.60	51.17±3.28	43.05±3.68	38.02±1.64	34.42±0.91	37.54±1.79
0.5	132.45±6.07	119.82±1.07	107.16±1.48	107.23±6.76	103.24±2.32	100.71±1.66
1.0	—	182.26±2.20	164.51±1.50	156.41±2.04	146.73±0.28	146.05±0.10

Таблица 16 — Тест. FD ($\downarrow$) полученных латент. кодов при переводе *Муж.* $\rightarrow$ *Жен.*

Интересно, что точность отображения в корректный целевой класс не имеет очевидной динамики по ϵ . В то же время при *увеличении* τ обученные планы

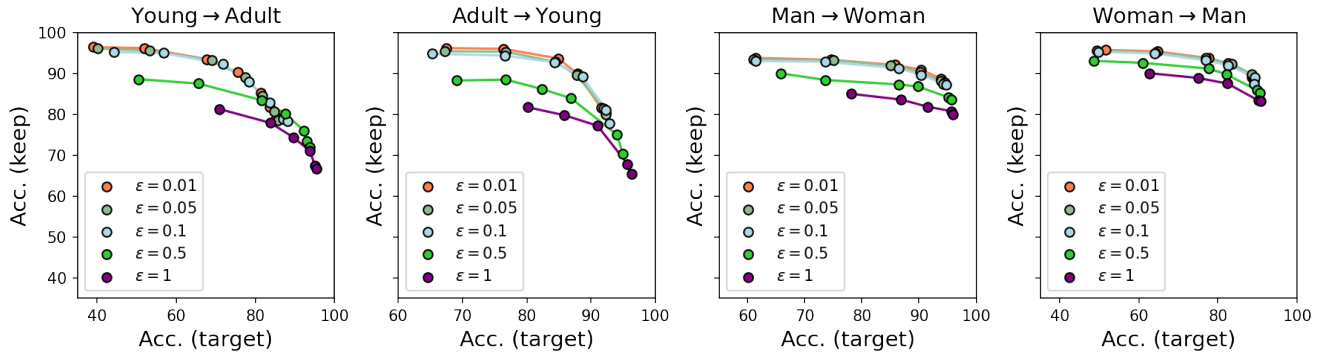
$\tau \backslash \varepsilon$	10	20	50	10^2	<u>10^3</u>	10^6
0.01	95.70 $\pm$ 0.05	95.31 $\pm$ 0.10	93.68 $\pm$ 0.09	92.46 $\pm$ 0.13	89.08 $\pm$ 0.32	88.81 $\pm$ 0.05
0.05	95.55 $\pm$ 0.08	95.05 $\pm$ 0.09	93.67 $\pm$ 0.10	92.32 $\pm$ 0.27	89.66 $\pm$ 0.17	88.39 $\pm$ 0.42
0.1	95.21 $\pm$ 0.26	94.83 $\pm$ 0.19	93.14 $\pm$ 0.30	91.96 $\pm$ 0.26	89.09 $\pm$ 0.53	87.38 $\pm$ 0.40
0.5	93.02 $\pm$ 0.22	92.53 $\pm$ 0.29	91.13 $\pm$ 0.01	89.73 $\pm$ 0.44	85.87 $\pm$ 1.20	85.24 $\pm$ 0.41
1.0	—	90.00 $\pm$ 0.78	88.83 $\pm$ 0.73	87.46 $\pm$ 0.30	83.32 $\pm$ 1.03	83.16 $\pm$ 0.55

Таблица 17 — Тест. точность (сохр.) ($\uparrow$) при переводе *Жен.* $\rightarrow$ *Муж.*

$\tau \backslash \varepsilon$	10	20	50	10^2	<u>10^3</u>	10^6
0.01	51.54 $\pm$ 0.48	64.67 $\pm$ 1.09	77.59 $\pm$ 0.39	82.52 $\pm$ 0.49	88.61 $\pm$ 0.48	88.99 $\pm$ 0.18
0.05	49.26 $\pm$ 0.72	64.09 $\pm$ 1.08	76.88 $\pm$ 0.17	83.47 $\pm$ 0.52	88.59 $\pm$ 0.55	89.14 $\pm$ 0.55
0.1	49.74 $\pm$ 0.78	63.99 $\pm$ 0.82	76.96 $\pm$ 0.54	82.45 $\pm$ 0.22	89.29 $\pm$ 0.55	89.14 $\pm$ 0.38
0.5	48.64 $\pm$ 2.31	60.88 $\pm$ 0.55	77.58 $\pm$ 0.28	82.10 $\pm$ 1.17	89.82 $\pm$ 0.99	90.63 $\pm$ 1.06
1.0	—	62.62 $\pm$ 0.24	74.95 $\pm$ 1.17	82.42 $\pm$ 0.73	90.20 $\pm$ 0.34	90.75 $\pm$ 0.37

Таблица 18 — Тест. точность (цел.) ($\uparrow$) при переводе *Жен.* $\rightarrow$ *Муж.*

$\tau \backslash \varepsilon$	10	20	50	10^2	<u>10^3</u>	10^6
0.01	47.00 $\pm$ 1.74	33.65 $\pm$ 0.67	23.85 $\pm$ 1.15	20.83 $\pm$ 1.27	16.48 $\pm$ 0.09	18.78 $\pm$ 3.44
0.05	52.30 $\pm$ 1.29	39.79 $\pm$ 1.25	29.66 $\pm$ 1.81	27.23 $\pm$ 3.45	24.68 $\pm$ 2.80	23.43 $\pm$ 1.91
0.1	58.40 $\pm$ 0.62	48.66 $\pm$ 0.73	37.55 $\pm$ 0.35	37.74 $\pm$ 2.39	31.63 $\pm$ 0.42	32.83 $\pm$ 2.02
0.5	131.17 $\pm$ 0.78	120.63 $\pm$ 0.76	108.44 $\pm$ 0.60	104.85 $\pm$ 1.17	101.29 $\pm$ 0.11	102.26 $\pm$ 1.58
1.0	—	186.46 $\pm$ 0.92	169.64 $\pm$ 0.63	160.52 $\pm$ 0.42	152.78 $\pm$ 0.13	152.37 $\pm$ 0.09

Таблица 19 — Тест. FD ($\downarrow$) полученных латент. кодов при переводе *Жен.* $\rightarrow$ *Муж.*Рис. 2.6 — Визуализация абляционного исследования параметров τ , ε в эксперименте по переводу изображений.

обеспечивают *меньшую точность* сохранения класса входных латентных кодов, но *лучшее FD* порождённых латентных кодов и точность отображения в целевой класс. Это ожидаемое поведение, поскольку при больших τ ограничения на маргиналы обученных планов становятся более строгими. То есть мы заставляем маргиналы обученных планов быть ближе к исходной и целевой мерам, что позволяет обучать более точные отображения в целевую меру, но не позволяет

сохранять исходные классы в случае проблем дисбаланса. Интересно, что при переводе *Взрослые* $\rightarrow$ *Юные* FD полученных латентных кодов и точность отображения в целевой класс мало меняются при $\tau \geq 10^2$, тогда как точность сохранения атрибутов демонстрирует заметное падение между $\tau = 10^2$ и $\tau = 10^3$. Поэтому мы можем рассматривать $\tau = 10^2$ как оптимальное значение параметра, так как оно обеспечивает наилучшую взаимозависимость между качеством обученных переводов и их способностью сохранять признаки входных латентных кодов. При переводе *Юные* $\rightarrow$ *Взрослые* значения точности и FD демонстрируют заметные различия для рассматриваемых τ , поэтому была рассмотрена более детальная шкала и выбрано $\tau = 2.5 \cdot 10^2$ как оптимальное значение.

В совокупности наш метод предлагает гибкий способ выбора конфигурации перевода домена, которая позволяет лучше сохранять свойства исходных объектов или порождать распределение, более близкое к целевому. Итоговый выбор оптимальной конфигурации остаётся на усмотрение пользователя. Выделенные значения в Таблицах используются для сравнения с другими подходами в §2.6.3.

Замечание. FD следует рассматривать как *относительную* меру близости между полученными и целевыми мерами. Результаты, полученные сбалансированным методом [66, LightSB] (эквивалентным нашему при больших τ), рассматриваются как золотой стандарт.

Число гауссовских компонент в потенциалах. Для полноты мы проводим абляционное исследование нашего метода U-LightOT с разным числом гауссовских компонент (K, L) в потенциалах v_θ и u_ω , соответственно. Мы запускаем метод для перевода *Юные* $\rightarrow$ *Взрослые* с 5K шагов, $\varepsilon = 0.05$ и полагаем $\tau = 250$. Количественные результаты (точность сохранения класса, точность отображения в целевой класс, FD порождённых латентных кодов относительно целевых латентных кодов) приведены в Таблицах ниже.

Результаты показывают, что в рассматриваемой задаче наш метод демонстрирует хорошее качество даже при малом числе компонент, что можно объяснить гладкостью латентных представлений данных для автокодировщика ALAE.

$\begin{smallmatrix} L \\ K \end{smallmatrix}$	1	2	4	8	16	32	64	128
1	84.17±0.45	84.73±1.27	84.25±1.08	85.08±0.78	84.84±0.92	85.82±0.70	85.52±0.74	83.70±0.48
2	84.99±0.59	84.54±0.43	84.56±0.39	84.18±0.63	83.87±2.03	83.56±1.37	84.66±0.44	86.74±0.54
4	84.50±0.86	84.81±0.46	84.60±0.37	84.65±0.77	83.75±1.01	84.00±1.52	83.51±0.90	83.99±0.63
8	83.88±1.01	84.08±0.81	83.71±0.60	82.76±1.98	84.69±0.38	84.30±0.39	85.05±1.59	83.03±1.02
16	84.65±0.33	85.00±1.62	84.28±0.78	84.76±1.23	83.66±0.33	85.14±0.49	83.77±1.16	84.34±0.15
32	83.48±0.40	86.02±1.22	84.79±0.60	84.44±0.42	85.24±0.84	84.06±1.00	84.73±0.51	84.54±0.27
64	85.24±0.27	85.23±0.59	84.12±0.12	84.64±0.64	84.01±1.95	84.10±1.26	84.77±1.25	83.76±1.44
128	85.21±0.29	85.16±0.07	84.63±1.15	84.64±0.49	84.12±0.57	84.11±0.76	84.22±0.68	84.64±0.93

Таблица 20 — Тест. точность (сохр.) ($\uparrow$) при переводе *Юные*→*Взр.* для нашего метода с разным числом гауссовских компонент в потенциалах.

$\begin{smallmatrix} L \\ K \end{smallmatrix}$	1	2	4	8	16	32	64	128
1	83.35±0.85	82.03±0.11	82.69±0.82	83.34±0.08	82.95±0.46	82.80±0.58	82.49±0.64	82.54±0.36
2	83.26±0.98	81.80±0.81	81.82±0.66	82.35±0.92	82.77±0.45	82.26±0.98	82.36±0.37	82.84±0.38
4	82.76±0.17	81.47±0.29	82.32±0.13	82.60±0.66	82.70±0.64	82.48±0.37	83.23±1.24	82.44±0.68
8	82.35±0.39	81.63±0.38	82.23±0.52	82.19±0.72	82.64±0.58	82.55±0.18	82.85±0.28	82.87±0.09
16	82.43±0.61	82.12±1.10	81.30±0.79	82.11±0.93	82.56±0.26	81.88±0.85	83.34±0.57	82.90±0.39
32	81.57±0.47	81.39±0.62	81.76±0.27	81.28±0.57	82.47±1.30	82.06±0.41	82.35±0.55	82.56±0.89
64	82.01±0.79	82.33±0.83	81.97±0.61	82.01±0.26	82.44±0.74	81.61±0.75	82.06±0.51	83.44±0.38
128	82.39±0.92	82.18±0.56	81.74±0.19	82.22±0.74	81.58±0.23	82.66±0.33	83.07±0.30	82.85±0.45

Таблица 21 — Тест. точность (цел.) ($\uparrow$) при переводе *Юные*→*Взр.* для нашего метода с разным числом гауссовских компонент в потенциалах.

$\begin{smallmatrix} L \\ K \end{smallmatrix}$	1	2	4	8	16	32	64	128
1	17.41±0.28	17.42±0.36	18.10±1.41	17.83±0.41	17.97±0.69	18.42±0.86	17.69±0.37	18.07±0.61
2	19.07±0.81	17.47±0.83	16.87±0.25	16.93±0.56	21.05±1.86	17.38±0.69	17.22±0.76	17.83±0.70
4	17.07±0.53	16.66±0.14	17.02±0.84	18.01±1.79	16.71±0.06	17.07±0.95	16.59±0.41	16.42±0.10
8	16.55±0.22	23.56±7.59	16.37±0.23	16.81±0.95	17.21±1.01	18.37±1.47	17.13±0.77	16.96±0.86
16	17.58±1.58	18.06±1.61	18.25±2.46	17.69±1.87	18.00±0.34	17.19±0.71	17.62±0.93	18.97±2.01
32	17.85±0.10	17.15±0.71	16.50±0.10	21.91±4.05	20.04±2.78	19.31±3.22	18.79±2.03	22.56±1.66
64	21.39±1.32	21.91±4.23	21.00±4.47	18.02±1.24	21.63±3.14	19.56±0.99	17.53±0.47	20.26±4.46
128	22.09±4.91	35.68±21.07	33.80±21.67	20.46±2.39	24.80±5.33	22.73±3.03	22.09±1.25	22.72±7.41

Таблица 22 — Тест. FD ($\downarrow$) полученных латент. кодов при переводе *Юные*→*Взр.* для нашего метода с разным числом гауссовских компонент в потенциалах.

2.7 Технические детали экспериментов

2.7.1 Общие детали

Чтобы минимизировать нашу целевую функцию (2.14), мы параметризуем α_k, r_k, S_k для v_θ и β_l, μ_l, Σ_l для u_ω в (2.11). Следуя стандартным практикам глубокого обучения, мы параметризуем логарифмы $\log \alpha_k$, $\log \beta_l$ вместо прямой параметризации α_k, β_l . Переменные r_k , μ_l параметризуются напрямую как многомерные векторы. Мы рассматриваем диагональные матрицы S_k , Σ_l и параметризуем их через их диагональные значения $\log(S_k)_{i,i}$ и $\log(\Sigma_l)_{i,i}$, соответственно. Мы инициализируем параметры, следуя схеме из [66]. Во всех наших экспериментах мы используем оптимизатор Adam.

2.7.2 Детали эксперимента со смесями гауссовских распределений

Мы используем $K = L = 5$, $\varepsilon = 0.05$, $lr = 3e - 4$. При обучении мы делаем $2 \cdot 10^4$ градиентных шагов с размером выборок 128. Для алгоритма LightSB мы используем параметры, представленные авторами в официальном репозитории.

2.7.3 Детали эксперимента по переводу изображений

Мы используем код и модель декодера из <https://github.com/podgorskiy/ALAE>, данные и извлечённые нейросетью атрибуты для набора данных FFHQ скачаны из <https://github.com/ngushchin/LightSB/>. В класс *Взрослые* мы включаем изображения с атрибутом *Возраст* ≥ 44 ; в класс *Юные* – с *Возраст* $\in [16, 44]$. Мы исключили изображения с лицами детей, чтобы увеличить точность классификации по атрибуту *пол*. Для экспериментов с нашим методом мы используем взвешенную дивергенцию D_{KL} с параметрами τ , указанными в разделе 2.6.4, и полагаем $K = L = 10$, $\varepsilon = 0.05$, $lr = 1$, размер выборок – 128. Мы выполняем $5 \cdot 10^3$ градиентных шагов с использованием оптимизатора Adam [85] и планировщика MultiStepLR с параметрами $\gamma = 0.1$,

milestones= [500,1000]. Для тестирования метода [66, LightSB] мы используем официальный код (см. ссылку выше) и инструкции, предоставленные авторами.

Базовые методы. Для методов OT-FM и UOT-FM мы параметризуем векторное поле $(v_{t,\theta})_{t \in [0,1]}$ для переноса массы с помощью двухслойной полносвязной нейросети с 512 скрытыми нейронами и ReLU активацией. Параметр времени t перед подачей в сеть дополнительно кодируется с помощью синусоидального признакового отображения. Скорость обучения для оптимизатора Adam установлена равной $1e-4$. Для получения оптимального транспортного плана $\pi^*(x,y)$, используются дискретные OT методы из пакета POT [86], построенные на решениях (планах $\pi^*(x,y)$) дискретных OT задач. В частности, для UOT-FM мы используем `ot.unbalanced.sinkhorn` с регуляризацией, равной 0.05. Число шагов инференса установлено равным 100. Для получения результатов UOT-FM на Рис. 2.4 мы запустили метод на 3K эпох с параметром `reg_m` $\in [5e-4, 5e-3, 5e-2, 0.5, 1, 10, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6]$ и привели средние значения финальных метрик по 3 независимым запускам с разными параметрами `seed`. В Таблицах 5, 6, 7 приведены результаты для каждого перевода для одного выбранного параметра, указанного в каждой из таблиц. Мы используем сохраненные веса модели UOT-FM, чтобы визуализировать ее качество на Рис. 2.5. Для [22, UOT-SD], [21, UOT-GAN] мы используем официальный код, предоставленный авторами, см. ссылки:

<https://github.com/Jae-Moo/Unbalanced-Optimal-Transport-Generative-Model>

https://github.com/uhrerlab/unbalanced_ot

Поскольку методы UOT-SD, UOT-GAN ранее не применялись к набору данных FFHQ, мы настроили перебор по сетке параметров и следовали инструкциям авторов по их настройкам. Для UOT-SD, UOT-GAN мы использовали трехслойную нейросеть с 512 скрытыми нейронами и ReLU активацией. Мы обучали UOT-SD и UOT-GAN в течение 10K итераций, установили размер случайных выборок равным 128 и использовали оптимизатор Adam [85] с $lr = 10^{-5}$ и $lr = 10^{-4}$, соответственно. Для UOT-SD мы использовали дивергенцию D_{KL} с их параметром несбалансированности $\tau = 0.002$. Для остальных параметров мы использовали значения по умолчанию, предоставленные авторами для задач генерации CIFAR-10. Для всех базовых моделей, которые используют энтропийную регуляризацию, мы полагаем $\epsilon = 0.05$.

2.8 Обсуждение

Разработанный метод имеет много преимуществ по сравнению с другими существующими UEOT методами. Во-первых, он не требует сложной max-min оптимизации. Во-вторых, он предоставляет выражение в замкнутой форме для условного $\gamma_\theta(y|x) \approx \gamma^*(y|x)$ UEOT плана. Более того, он позволяет получать выборки как из условной меры $\gamma_\theta(y|x)$, так и из меры маргинала $u_\omega(x) \approx \gamma_x^*(x)$. Кроме того, решающее превосходство этого метода заключается в том, что он имеет неминимаксную целевую функцию оптимизации и не требует использования тяжёлой нейросетевой параметризации. В результате метод сходится за минуты на CPU. Ожидается, что эти преимущества могут усилить использование метода как стандартного и простого базового метода для задачи UEOT с приложениями в разных сферах.

Одним из ограничений метода является использование параметризации в виде смеси гауссовских распределений, что может ограничивать его масштабируемость. Это указывает на необходимость разработки способов оптимизации целевой функции (2.4) с более общей параметризацией, например, нейросетевой.

Глава 3. Метод вычисления полунесбалансированных оптимальных транспортных барицентров

Агрегация данных из нескольких источников может быть формализована как задача поиска *оптимальных транспортных* (ОТ) барицентров, которая заключается в вычислении среднего вероятностных распределений с точки зрения ОТ стоимости. Однако в реальных сценариях наличие выбросов и шума в мерах данных может существенно ухудшать качество традиционных статистических методов вычисления ОТ барицентров. Чтобы решить эту проблему, мы предлагаем новый масштабируемый подход к вычислению *устойчивого* непрерывного барицентра, используя двойственную формулировку *(полу)несбалансированной* задачи ОТ. Насколько нам известно, в данной главе разработан первый алгоритм для вычисления устойчивых ОТ барицентров непрерывных распределений. Наш метод сформулирован как минимаксная задача оптимизации и допускает *общие* функции стоимости. Мы строго теоретически обосновываем предложенный метод и демонстрируем его устойчивость к выбросам и дисбалансу классов с помощью ряда иллюстративных экспериментов.

Основные результаты главы изложены в работе [A4]. Метод, алгоритм и теоретические результаты, представленные в главе и публикации, разработаны и доказаны автором диссертации. Экспериментальное тестирование метода в §3.6.4 и §3.6.5 выполнено автором, а дополнительные иллюстративные эксперименты в §3.6.1-§3.6.3, §3.6.6 — соавтором статьи [A4].

3.1 Введение

Мир полон данных, и точный анализ этих данных позволяет решать ряд задач в мире, связанных с наукой, медициной, инженерией и т.д. Распространённая трудность в анализе данных возникает из-за двух факторов: (i) огромного количества данных и (ii) того, что данные поступают из нескольких источников, к примеру, из разных научных экспериментов, больниц или инженерных испытаний. Одним из многообещающих способов справиться с этими трудностями является осуществление *агрегации данных*. Это означает

уменьшение специфичных для конкретного источника характеристик и сохранение только независимой от источника информации для решения рассматриваемого практического случая.

Недавно возникло направление исследований [14; 15; 31; 37; 38], которое фокусируется на решении задачи агрегации данных в рамках задачи поиска оптимальных транспортных (ОТ) барицентров. Для заданного набора опорных распределений, представляющих данные из разных источников, задача состоит в том, чтобы найти геометрически осмысленное среднее этих распределений, минимизируя среднюю ОТ стоимость от опорных распределений до искомого.

Изначально введённая для достаточно специфичной постановки (квадратичные евклидовы функции стоимости ОТ) [16], область ОТ барицентров чрезвычайно развилась за последнее десятилетие. В настоящее время, в этой области может применяться глубокое обучение, и методы могут быть адаптированы к постановкам с высокоразмерными данными, например, изображениям. Однако текущие исследования барицентров склонны игнорировать типичное и важное свойство данных, возникающее в реальных приложениях: наличие нежелательного шума и выбросов [35]. Это мотивирует разработку *устойчивого* фреймворка ОТ барицентров, который (i) наследует все достижения текущих исследований барицентров, например, допускает глубокое обучение и может быть адаптирован к высоким размерностям; (ii) разумно справляется с упомянутыми выше ограничениями реальных данных. Чтобы удовлетворить обе цели, мы предлагаем опираться на недавние техники непрерывного *несбалансированного* ОТ [22; 87], которые естественным образом согласуются с неточностями в данных.

Основные **результаты** этой главы заключаются в следующем:

1. Разработан новый алгоритм полунесбалансированного ОТ (SUOT) барицентра, который устойчив к выбросам и дисбалансу классов в опорных распределениях (§3.4).
2. Разработаны строгие теоретические основы подхода, включая оценки качества восстановленных транспортных планов (§3.4.1).
3. Проведен ряд экспериментов с модельными данными и изображениями для демонстрации качества метода и его устойчивости к выбросам и дисбалансу классов (§3.6).

В данной главе разработан первый алгоритм построения *устойчивых* ОТ барицентров в *непрерывной* вычислительной постановке (§3.2.3). Существующие

работы, решающие похожие задачи, рассматривают **исключительно дискретные** постановки [35; 36].

Обозначения. На протяжении главы мы обозначаем $\bar{K} = \{1, \dots, K\}$ для $K \in \mathbb{N}$ и используем $s_{[1:K]}$ для обозначения кортежа объектов $(s_1, \dots, s_K)$. Мы определяем $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^{D'}$, $\mathcal{X}_k \subset \mathbb{R}^{D_k}$, $\mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^D$ как компактные подмножества евклидовых пространств. Мы используем $\mathcal{C}(\mathcal{Y})$ для обозначения множества непрерывных функций на $\mathcal{Y}$. Множества борелевских вероятностных (или неотрицательных) мер на $\mathcal{X}$ обозначаются как $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ (или $\mathcal{M}_+(\mathcal{X})$). Для двух мер $\mu_1, \mu_2 \in \mathcal{M}_+(\mathcal{X})$ мы пишем $\mu_1 \ll \mu_2$, чтобы обозначить, что мера μ_1 абсолютно непрерывна относительно меры μ_2 . Совместные вероятностные распределения на $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ с маргиналами $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$ обозначаются как $\Pi(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ и обычно называются *транспортными планами*. Все совместные неотрицательные меры на $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ обозначаются как $\mathcal{M}_+(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$. Для заданной меры $\gamma(x, y) \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ (или $\mathcal{M}_+(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$) мы используем $\gamma_x(x)$, $\gamma_y(y)$ для обозначения её маргиналов. Все вероятностные меры $\gamma(x, y) \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ такие, что $\gamma_y = \mathbb{Q}$ для заданной вероятностной меры $\mathbb{Q}$, обозначаются как $\Pi(\mathbb{Q})$. Мы используем $\gamma(y|x)$ для обозначения условной *вероятностной* меры. Для измеримого отображения T символ $T_\#$ обозначает соответствующий оператор переноса меры (push-forward operator). Сопряжённая по Фенхелю функция к функции $\psi(u)$ обозначается как $\bar{\psi}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{u \in \mathbb{R}} \{ut - \psi(u)\}$.

3.2 Предварительные сведения

В этом разделе мы напомним понятия несбалансированного оптимального транспорта и полунесбалансированного барицентра, относящиеся к этой главе. В §3.2.1 мы формулируем задачу SUOT и её полудвойственную формулировку. В §3.2.2 мы формулируем задачу поиска барицентра OT/UOT. Затем, в §3.2.3 мы описываем нашу вычислительную постановку. Для подробностей об OT мы отсылаем к [8; 29; 88], о несбалансированном OT - [20; 28; 33], об OT барицентрах - [16; 89]. Везде в данной главе предполагается, что исходные меры $\mathbb{P}, \mathbb{P}_k (k \in \bar{K})$ абсолютно непрерывны относительно меры Лебега.

Для начала введём понятие ψ -дивергенций, необходимое для наших дальнейших выводов.

ψ -дивергенции для неотрицательных мер. Пусть $\mu_1, \mu_2 \in \mathcal{M}_+(\mathcal{X}')$ — две неотрицательные меры. Тогда для функции $\psi : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{\infty\}$ ψ -дивергенция между μ_1, μ_2 задаётся как:

$$D_\psi(\mu_1 \| \mu_2) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{X}} \psi\left(\frac{d\mu_1}{d\mu_2}(x)\right) d\mu_2(x), \text{ если } \mu_1 \ll \mu_2, \text{ и } +\infty \text{ иначе.}$$

Здесь предполагается, что порождающая функция $\psi(u)$ является выпуклой, неотрицательной, полунепрерывной снизу, обращается в ноль однозначно при $u = 1$ и удовлетворяет свойству $\frac{\psi(u)}{u} \xrightarrow{u \rightarrow \infty} \infty$. Тогда сопряжённая функция $\bar{\psi}(u)$ является неубывающей, и её область определения — $\mathbb{R}$, см. [90]. При этих предположениях D_ψ является корректной мерой различия между двумя неотрицательными мерами. Хорошо известные примеры ψ -дивергенций включают дивергенцию Кульбака–Лейблера D_{KL} [20; 28] и χ^2 -дивергенцию D_{χ^2} . Детальное обсуждение допустимых дивергенций приведено в главе 2 работы.

3.2.1 Оптимальный транспорт

Классическая задача ОТ. Рассмотрим две вероятностные меры $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ и функцию стоимости $c(x, y) \in \mathcal{C}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$. Тогда задача ОТ [6] между $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$ задаётся как

$$\text{OT}_c(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\pi \in \Pi(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y). \quad (3.1)$$

При мягких предположениях о распределениях $\mathbb{P}$, $\mathbb{Q}$ и функции стоимости c минимизатор π^* задачи (3.1) всегда существует, но не гарантируется, что он единственен, см. [29]. В частном случае квадратичной стоимости $c(x, y) = \frac{\|x - y\|^2}{2}$ задача (3.1) сводится к хорошо известному (квадрату) расстояния Васерштейна-2 ($W_2^2(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$). Задача (3.1) допускает *полудвойственную формулировку*:

$$\text{OT}_c(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \sup_{f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})} \left[\int_{\mathcal{X}} f^c(x) d\mathbb{P}(x) + \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \right], \quad (3.2)$$

где $f^c(x) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{y \in \mathcal{Y}} \int_{\mathcal{Y}} (c(x, y) - f(y)) d\mu(y)$ является c -преобразованием. Заметим, что стандартное c -преобразование в двойственной задаче ОТ обычно определяется как $f^c(x) = \inf_{y \in \mathcal{Y}} \{c(x, y) - f(y)\}$. Здесь, для будущих нужд, мы заменяем классическое c -преобразование на *слабое c -преобразование* [91, Теорема

1.3], [77]. Этот переход корректен, поскольку инфимум в слабом преобразовании в любом случае достигается на некоторой $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ с носителем в множестве $\arg \inf_{y \in \mathcal{Y}} \{c(x, y) - f(y)\}$.

Несбалансированная & полунесбалансированная задачи ОТ.

Стандартная формулировка задачи ОТ влечёт различные проблемы [20; 49], такие как чувствительность к выбросам, неспособность справляться с дисбалансом классов в исходной и целевой мерах и неприменимость к общим неотрицательным мерам. Мы рассматриваем перенос массы между *вероятностными мерами* и фокусируемся на первых двух проблемах. К счастью, их можно преодолеть, ослабив жёсткие ограничения на маргиналы в задаче ОТ, что приводит к задаче несбалансированного ОТ [28; 33, UOT]. Задача UOT между вероятностными мерами $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ имеет вид

$$\text{UOT}_{c, \psi, \varphi}(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \inf_{\gamma \in \mathcal{M}_+(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\gamma(x, y) + D_\psi(\gamma_x \| \mathbb{P}) + D_\varphi(\gamma_y \| \mathbb{Q}) \quad (3.3)$$

где $c(x, y) \in \mathcal{C}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ — непрерывная функция стоимости, а D_ψ , D_φ — ψ -дивергенции на $\mathcal{X}$ и $\mathcal{Y}$, соответственно. Мы можем настраивать степень штрафа за несовпадение маргинальных распределений, вводя *параметр несбалансированности* $\tau > 0$ и рассматривая $D_\psi = \tau D_{\psi'}$, $D_\varphi = \tau D_{\varphi'}$. Неформально, при $\tau \rightarrow +\infty$ соответствующая задача UOT стремится к классической задаче ОТ (3.1). Более строго, классическая задача ОТ (3.1) является частным случаем задачи UOT (3.3), где ψ -дивергенции D_ψ , D_φ определены так, что $D_{\psi'}(\mathbb{P}' \| \mathbb{Q}') = 0$, если $\mathbb{P}' = \mathbb{Q}'$, и $+\infty$ иначе. Эквивалентно, это означает, что порождающие функции ψ , φ являются выпуклыми индикаторами множества $\{1\}$, а их сопряжённые функции задаются как $\bar{\psi}(t) = \bar{\varphi}(t) = t$.

В этой главе мы фокусируемся на задаче *полунесбалансированного* ОТ (SUOT), т.е. на случае, когда ослабляется только первое ограничение на маргиналы в задаче ОТ (3.1):

$$\text{SUOT}_{c, \psi}(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \inf_{\gamma \in \Pi(\mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\gamma(x, y) + D_\psi(\gamma_x \| \mathbb{P}). \quad (3.4)$$

Заметим, что минимизатор γ^* задачи (3.4) всегда существует благодаря компактности пространства $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ (что влечёт компактность $\Pi(\mathbb{Q})$), непрерывности функции стоимости $c(x, y)$ и полунепрерывности снизу функции ψ (что влечёт полунепрерывность снизу оптимизируемого функционала по γ).

Полудвойственная задача SUOT имеет вид

$$\text{SUOT}_{c,\psi}(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \sup_{f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})} \left\{ - \int_{\mathcal{X}} \bar{\psi}(-f^c(x)) d\mathbb{P}(x) + \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \right\}. \quad (3.5)$$

Заметим, что при мягких предположениях о функции стоимости $c(x, y)$ оптимальный потенциал f^* задачи (3.5) всегда существует, см. [33, Теорема 4.14]. Когда $\bar{\psi}(t) = t$, задача (3.5) сводится к классической двойственной задаче (3.2) для сбалансированной задачи ОТ (3.1).

3.2.2 Полунесбалансированный оптимальный транспортный барицентр

Рассмотрим вероятностные меры $\mathbb{P}_k \in \mathcal{P}(\mathcal{X}_k)$ и непрерывные функции стоимости $c_k(x, y) : \mathcal{X}_k \times \mathcal{Y} \mapsto \mathbb{R}$, $k \in \bar{K}$. Для заданных весов $\lambda_k \geq 0$ таких, что $\sum_{k=1}^K \lambda_k = 1$, классическая задача поиска оптимальных транспортных (ОТ) барицентров заключается в нахождении минимизатора суммы ОТ стоимостей с фиксированными первыми маргиналами $\mathbb{P}_{[1:K]}$:

$$\inf_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \sum_{k=1}^K \lambda_k \text{OT}_{c_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q}). \quad (3.6)$$

Чтобы обеспечить устойчивость оценивания барицентра, естественно рассмотреть ослабление маргиналов $\mathbb{P}_{[1:K]}$, т.е. заменить задачи ОТ в (3.6) на задачи SUOT. Пусть $\psi_{[1:K]}$ - набор ψ -дивергенций. Тогда задача поиска SUOT барицентра имеет вид

$$\mathcal{L}^* \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \mathcal{B}_u(\mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \sum_{k=1}^K \lambda_k \text{SUOT}_{c_k, \psi_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q}). \quad (3.7)$$

Очевидно, что задача поиска SUOT барицентра (3.7) включает в себя стандартную задачу ОТ (3.6). Мы также отметим, что в принципе можно заменить ОТ на задачу UOT (3.3), несбалансированную с обеих сторон [92–94]. Однако практически это не имеет смысла. Действительно, конечная цель заключается в том, чтобы избавиться от потенциальных выбросов и шума во входных данных, а не в барицентре. Поэтому нет необходимости в несбалансированности барицентра.

Благодаря [33, Следствие 2.9] функционалы $\mathbb{Q} \mapsto \text{SUOT}_{c_k, \psi_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q})$ ($k \in \overline{K}$) являются выпуклыми и полунепрерывными снизу. Следовательно, функционал $\mathbb{Q} \mapsto \mathcal{B}_u(\mathbb{Q})$ также является выпуклым и полунепрерывным снизу. Заметим, что $\mathcal{P}(\mathcal{Y})$ является слабо компактным. Тогда, благодаря теореме Вейерштрасса [88, Вох 1.1], функционал $\mathcal{B}_u(\mathbb{Q})$ имеет по крайней мере один минимизатор, что означает, что барицентр $\mathbb{Q}^*$ существует. Тем не менее, мы не можем утверждать, что он единственен, поскольку не доказано, что функционал $\mathbb{Q} \mapsto \mathcal{B}_u(\mathbb{Q})$ является строго выпуклым.

3.2.3 Вычислительная постановка

В реальном сценарии распределения $\mathbb{P}_k$ не заданы в явном виде и могут быть оценены только по эмпирическим выборкам. Предположим, что нам даны N_k эмпирических выборок $x_{[1:N_k]}^k \sim \mathbb{P}_k, k \in \overline{K}$. Наша цель - найти аппроксимации $\hat{\gamma}_k$ SUOT планов γ_k^* между мерами $\mathbb{P}_k$ и неизвестным SUOT барицентром $\mathbb{Q}^*$ для заданных функций стоимости и ψ -дивергенций $c_k, \psi_k, k \in \overline{K}$. После этого мы можем использовать обученные планы для получения выборок из условных планов, т.е. получать новые точки $y \sim \hat{\gamma}_k(\cdot | x_k)$ из (аппроксимированного) барицентра, используя выборки $x_k \sim (\hat{\gamma}_k)_x$ как входы. На самом деле получение выборок из левых маргиналов обученных планов не является простой задачей, поскольку маргинал не может быть легко оценен по обученным планам или потенциалам. К счастью, мы можем справиться с этой проблемой, используя метод *выборки с отклонением* [95], см. §3.4.2 для дополнительных деталей.

Важно отметить, что обученные планы должны допускать *новые* входные данные, т.е. такие, которые не обязательно присутствуют в обучающих наборах данных. Эта постановка обычно называется *непрерывной* [15; 31; 37] и существенно отличается от дискретной [8; 96]. Последняя нацелена на решение задачи поиска барицентра между *эмпирическими* мерами, что делает её применение к новым выборкам данных затруднительным.

3.3 Обзор существующих методов

В этом разделе мы приводим обзор релевантных работ. В первом подразделе мы рассматриваем непрерывные ОТ методы с особым фокусом на несбалансированной постановке. Во втором подразделе рассматриваются наиболее релевантные методы ОТ для задачи поиска барицентра.

Нейросетевые ОТ/UОТ методы. Нейросетевой непрерывный ОТ является популярной и плодотворной областью недавних исследований в генеративном моделировании. Некоторые ключевые методы включают: [11; 12; 97] (на основе ICNN, квадратичная стоимость); [2; 40; 65] (Энтропийный ОТ); [41; 43; 47; 98—100] (мост Шрёдингера); [101—104] (модели согласования потоков). Особую важность для разработанного нами метода представляют минимаксные (состязательные) методы ОТ, основанные на (полу)двойственной формулировке ОТ [3; 4; 63; 64]. Недавно состязательная методология была расширена на несбалансированную постановку [21; 22; 87], что способствовало развитию непрерывных методов ОТ, устойчивых к неточностям в данных.

Непрерывные методы ОТ для задачи поиска барицентра. Мы начнем с краткого обзора непрерывных методов ОТ для задачи поиска барицентра и затем перейдем к текущему состоянию исследований устойчивых (несбалансированных) барицентров. Методы непрерывного ОТ барицентра можно разделить на следующие категории: [38; 48] используют ICNN [105] параметризацию и работают только с квадратичными евклидовыми функциями стоимости (ℓ_2^2); [37] также рассматривает ℓ_2^2 , но использует алгоритм неподвижной точки [106]; [107] строится с использованием моста Шрёдингера; [31; 108] используют условие конгруэнтности; [14; 15] усиливают условие конгруэнтности с помощью нейросетевого ОТ [3] и нейросетевого ОТ, основанного на функции энергии [40], соответственно. Последние работы представляют собой лучшие текущие подходы в области непрерывных ОТ барицентров.

Область вычисления устойчивых барицентров исследована значительно меньше и, насколько нам известно, ограничена исключительно дискретными (§3.2.3) методами [18; 20; 35; 36; 109—111], основанными на разных принципах (MMD регуляризация/алгоритм Sinkhorn/Sliced ОТ и т.д.). В отличие от этого, мы делаем существенный шаг вперёд и предлагаем первый *непрерывный* подход к

вычислению устойчивого барицентра с корректным теоретическим обоснованием и практической валидацией (§3.4, 3.6).

3.4 Предложенный метод

В §3.4.1 мы выводим и исследуем нашу новую целевую функцию оптимизации для обучения SUOT барицентров. В §3.4.2 мы предлагаем алгоритм для решения этой задачи. Доказательства всех теоретических результатов приведены в разделе 3.5.

3.4.1 Вывод целевой функции оптимизации

Чтобы разработать процедуру вычисления барицентра, можно просто подставить двойственную форму задачи SUOT (3.5) в задачу поиска барицентра (3.7) и получить min-max задачу. На самом деле, без дополнительных модификаций это приведёт к min-max-min задаче, поскольку c -преобразования $f_k^{c_k}$ также требуется оптимизировать. В нашей Теореме 3.4.1 ниже мы представляем способ решения задачи оптимизации (3.7) в формате max-min и без оптимизации по распределениям $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$.

Теорема 3.4.1 (Полудвойственная форма задачи поиска SUOT барицентра). *Двойственная форма задачи поиска SUOT барицентра (3.7) имеет вид*

$$\mathcal{L}^* = \sup_{\substack{m \in \mathbb{R}, f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^{c_k}(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right]. \quad (3.8)$$

Далее мы будем говорить, что потенциалы $f_{[1:K]}$ являются m -конгруэнтными или удовлетворяют условию m -конгруэнтности, если $\sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m$ (для некоторого $m \in \mathbb{R}$). Подставляя определение c -преобразования в (3.8), мы получаем нашу итоговую целевую функцию оптимизации.

Следствие 3.4.1.1 (Минимаксная формулировка для задачи (3.8)). *Выполнено:*

$$\mathcal{L}^* = \sup_{\substack{m \in \mathbb{R}, \gamma(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y}) \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \inf \sum_{k=1}^K \lambda_k \underbrace{\left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\gamma_k(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right]}_{\tilde{\mathcal{L}}(f_{[1:K]}, \{\gamma_k(\cdot|x_k)\}_{[1:K]}, m) \stackrel{def}{=}} \quad (3.9)$$

где $\sup$ берётся по $m \in \mathbb{R}$ и m -конгруэнтным потенциалам $f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y})$, а $\inf$ — по условным планам $\gamma_k(\cdot|x_k)$.

Интересно, что в частном случае, когда по крайней мере один из членов $SUOT_{c_k, \psi_k}$ в правой части (3.7) сводится к OT_{c_k} , условие m -конгруэнтности в (3.9) превращается в условие конгруэнтности $\sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv 0$, которое обычно появляется в сбалансированных постановках [14; 15].

Следствие 3.4.1.2 (Условие конгруэнтности для специальной задачи $SUOT$ барицентра). *Предположим, что $\overline{\Psi}_1(t) = t$, т.е. $SUOT_{c_1, \psi_1} = OT_{c_1}$ в (3.7). Тогда двойственная форма (3.9) принимает следующий вид:*

$$\sup_{\substack{f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv 0}} \inf_{\gamma(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\overline{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\gamma_k(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) \right]. \quad (3.10)$$

Теорема 3.4.2 ниже демонстрирует два важных свойства истинных планов γ^* , решающих задачу поиска $SUOT$ барицентра (3.7). Во-первых, левые маргиналы этих планов $(\gamma_k^*)_x$ можно охарактеризовать через оптимальные потенциалы f_k^* , что позволяет нам построить процедуру получения выборки из плотностей маргиналов, см. §3.4.2. Во-вторых, Теорема гарантирует, что семейство оптимальных планов действительно является одним из решений (3.9).

Теорема 3.4.2 (Условные планы $SUOT$ барицентра содержатся в оптимальных седловых точках). *Предположим, что существуют m и $\{f_k^*(y) \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})\}_{k=1}^K$, которые доставляют максимум в задаче (3.9). Предположим, что $c_k(x, y)$ являются непрерывными функциями стоимости, а $\overline{\Psi}_k$ — непрерывными дифференцируемыми функциями. Пусть $\{\gamma_k^*\}_{k=1}^K$ — семейство $SUOT$ планов между $\mathbb{P}_k$ и некоторым барицентром $\mathbb{Q}^*$. Тогда для каждого плана γ_k^**
(a) *маргинал плана может быть представлен как:*

$$d(\gamma_k^*)_x(x) = \nabla \overline{\Psi}_k(-(f_k^*)^{c_k}(x)) d\mathbb{P}_k(x); \quad (3.11)$$

(b) *соответствующий условный план $\gamma_k^*(\cdot|x_k)$ удовлетворяет*

$$\gamma_k^*(\cdot|x_k) \in \arg \min_{\gamma_k(\cdot|x_k)} \tilde{\mathcal{L}}(f_{[1:K]}^*, \{\gamma_k(\cdot|x_k)\}_{[1:K]}, m). \quad (3.12)$$

Теорема (3.4.2) показывает, что для некоторых оптимальных седловых точек $\{(f_k^*, \gamma_k^*)\}_{k=1}^K$ задачи (3.9) выполняется, что $\{\gamma_k^*\}_{k=1}^K$ является семейством истинных SUOT планов между $\mathbb{P}_{[1:K]}$ и $\mathbb{Q}^*$. В то же время, для любого семейства оптимальных $f_{[1:K]}^*$ множества $\arg \min_{\gamma_k(\cdot|x_k)}$ могут содержать не только оптимальные SUOT планы $\{\gamma_k^*\}_{k=1}^K$, но и другие функции, что является известной проблемой *ложных решений* нейросетевых методов ОТ [4].

Тем не менее, в Теореме 3.4.3 ниже мы показываем, что если тройка $(\hat{m}, \{\hat{f}_k\}_{k=1}^K, \{\hat{\gamma}_k\}_{k=1}^K)$ достаточно хорошо решает задачу (3.9) и выполнены некоторые дополнительные предположения, то восстановленные условные планы $\{\hat{\gamma}(\cdot|x_k)\}_{k=1}^K$ близки к условным планам истинных SUOT планов $\{\gamma_k^*(\cdot|x_k)\}_{k=1}^K$. Благодаря этому результату мы заключаем, что когда Алгоритм 1 (§3.4.2), оптимизирующий (3.9), сошёлся почти к оптимуму, его решения близки к истинным условным планам.

Теорема 3.4.3 (Оценки качества восстановленных планов). *Рассмотрим восстановленные $\hat{m}$ -конгруэнтные потенциалы $\hat{f}_{[1:K]}$ такие, что $\hat{f}_k \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$, $k \in \overline{K}$, и восстановленные условные планы $\{\hat{\gamma}_k(\cdot|x_k)\}_{k=1}^K$, $x_k \sim \mathbb{P}_k$ такие, что $\hat{\gamma}_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$, $k \in \overline{K}$. Предположим, что условия Теоремы 3.4.2 выполнены, $\mathcal{Y}$ является выпуклым множеством, и отображения $y \mapsto c_k(x_k, y) - \hat{f}_k(y)$ являются β -сильно выпуклыми на $\mathcal{Y}$, $k \in \overline{K}$. Также пусть $0 < \eta \stackrel{\text{def}}{=} \nabla \bar{\Psi}(-b)$, где b - верхняя оценка $b = \max_{k \in \overline{K}} \max_{f_k \in \{\hat{f}_k, f_k^*\}} \max_{x_k \in \mathcal{X}_k, y \in \mathcal{Y}} \{c_k(x_k, y) - f_k(y)\}$. Введём разрывы двойственности:*

$$\begin{aligned} \delta_1(\hat{f}_{[1:K]}, \hat{\gamma}_{[1:K]}) &\stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\mathcal{L}}(\hat{f}_{[1:K]}, \hat{\gamma}_{[1:K]}, \hat{m}) - \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \tilde{\mathcal{L}}(\hat{f}_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, \hat{m}); \\ \delta_2(\hat{f}_{[1:K]}) &\stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}^* - \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \tilde{\mathcal{L}}(\hat{f}_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, \hat{m}). \end{aligned}$$

Тогда $\frac{2}{\eta\beta}(\delta_1 + \delta_2) \geq \sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} \mathbb{W}_2^2(\hat{\gamma}_k(\cdot|x), \gamma_k^*(\cdot|x)) d\mathbb{P}_k(x)$.

Теорема 3.4.3 устанавливает оценки качества восстановленных планов $\{\hat{\gamma}_k(\cdot|x_k)\}_{k=1}^K$, исследуя *разрывы двойственности*, т.е. ошибки решения внутренней и внешней задач оптимизации в (3.9). Заметим, что условия сильной выпуклости не гарантируются на практике, но обычно используются в связанных работах [63; 64], см. [15, §4] для дополнительных деталей.

3.4.2 Параметризация и практическая процедура оптимизации

Параметризация. Чтобы реализовать оптимизацию по распределениям $\gamma(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ ($k \in \overline{K}$) в (3.9), мы рассматриваем их параметризацию стохастическими или детерминированными функциями, используя стратегию, определённую в [15, §4.1] и [4, §4.1]. Чтобы реализовать оптимизацию по условным планам $\gamma_k(\cdot|x_k)$ в (3.9), мы определяем вспомогательное пространство $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^{D_s}$, безатомное распределение $\mathbb{S} \in \mathcal{P}(\mathcal{S})$ и измеримые отображения $T_k : \mathcal{X}_k \times \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{Y}$. Для каждого плана γ_k мы рассматриваем представление с использованием отображения T_k такое, что $\gamma_k(\cdot|x) = T_k(x, \cdot)_{\#}\mathbb{S}$. Используя стохастическую параметризацию условных планов, мы можем переформулировать целевую функцию оптимизации (3.9) как:

$$\sup_{\substack{m \in \mathbb{R}, T_{[1:K]} \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k = m}} \inf_{T_{[1:K]}} \underbrace{\sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\overline{\Psi}_k \left(\int_{\mathcal{S}} \left(f_k(T_k(x_k, s)) - c_k(x_k, T_k(x_k, s)) \right) d\mathbb{S}(s) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right]}_{\mathcal{L}(f_{[1:K]}, T_{[1:K]}, m) \stackrel{\text{def}}{=}}. \quad (3.13)$$

Мы обозначаем выражение под $\sup \inf$ в (3.13) как $\mathcal{L}(f_{[1:K]}, T_{[1:K]}, m)$. В некоторых постановках стохастичность условных планов $\gamma(\cdot|x)$ не требуется. Тогда мы можем рассмотреть измеримое отображение $T_k : \mathcal{X}_k \rightarrow \mathcal{Y}$, которое задаёт *детерминированные* условные планы как $\gamma_k(\cdot|x) = \delta_{T_k(x)}(\cdot)$.

Для решения (3.13) мы параметризуем отображения T_k и потенциалы f_k ($k \in \overline{K}$) как нейросети $T_{k,\omega} : \mathbb{R}^{D_k} \times \mathbb{R}^{D_s} \mapsto \mathbb{R}^D$ и $f_{k,\theta} : \mathbb{R}^D \mapsto \mathbb{R}$ с весами $\omega \stackrel{\text{def}}{=} \omega_{[1:K]} \in \Omega$, $\theta \stackrel{\text{def}}{=} \theta_{[1:K]} \in \Theta$. Здесь $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 \times \dots \times \Omega_K$ и $\Theta = \Theta_1 \times \Theta_2 \times \dots \times \Theta_K$ - пространства параметров для отображений и потенциалов соответственно. Заметим, что $\mathbb{R}^{D_s}$ обозначает стохастическую размерность, которую следует опустить в случае детерминированных отображений. Чтобы обеспечить условие m -конгруэнтности для потенциалов, мы параметризуем их как $f_{k,\theta} = g_{k,\theta} - \sum_{n \neq k} \frac{\lambda_n}{\lambda_k(K-1)} g_{n,\theta} + \frac{m}{K\lambda_k}$, где $g_{k,\theta}$ обозначают вспомогательные нейросети. Здесь мы вдохновляемся похожими стратегиями из [14; 15; 31].

Обучение. Напомним, что мы работаем в непрерывной вычислительной постановке задачи поиска барицентра, т.е. распределения $\mathbb{P}_{[1:K]}$ доступны лишь через эмпирические выборки данных. Таким образом, мы оцениваем целевую функцию оптимизации (3.13) по выборкам методом Монте-Карло. В частности, целевая функция оптимизируется с помощью алгоритма стохастического градиентного спуска-подъёма по случайным выборкам из распределений $\mathbb{P}_k$ и

Algorithm 1: SUOT барицентр с полунесбалансированным нейросетевым оптимальным транспортом

Вход: Распределения $\mathbb{P}_{1:K}, \mathbb{S}$, доступные по выборкам; стоимости переноса $c_k : \mathcal{X}_k \times \mathcal{Y} \mapsto \mathbb{R}$; отображения $T_{k,\omega}$ и m -конгруэнтные потенциалы $f_{k,\theta}$, $k \in \bar{K}$; число N_T внутренних итераций; размеры выборок.

Выход: Обученные (стохастические) отображения $T_{[1:K],\omega^*}$, аппроксимирующие SUOT планы между $\mathbb{P}_k$ и барицентром $\mathbb{Q}^*$.

повторять

Получить выборки $X_k \sim \mathbb{P}_k$, $k \in \bar{K}$; для каждого $x_k \in X_k$ получить выборки вспомогательного набора $S[x_k] \sim \mathbb{S}$;

$$\widehat{\mathcal{L}}_f \leftarrow - \sum_{k \in \bar{K}} \lambda_k \left[\frac{1}{|X_k|} \sum_{x_k \in X_k} \bar{\Psi} \left(\sum_{s_k \in S[x_k]} \frac{f(T_k(x_k, s)) - c(x_k, T_k(x_k, s))}{|S[x_k]|} \right) - m \right];$$

Обновить θ , используя $\frac{\partial \widehat{\mathcal{L}}_f}{\partial \theta}$, чтобы *максимизировать* $\widehat{\mathcal{L}}_f$;

для $n_T = 1, 2, \dots, N_T$ **выполнять**

Получить выборки $X_k \sim \mathbb{P}_k$; для каждого $x_k \in X_k$:

 получить выборки вспомогательного набора $S[x_k] \sim \mathbb{S}$;

$$\widehat{\mathcal{L}}_{T_k} \leftarrow \frac{1}{|X_k|} \sum_{x_k \in X_k} \sum_{s_k \in S[x_k]} \frac{c(x_k, T_k(x_k, s)) - f(T_k(x_k, s))}{|S[x_k]|}$$

Обновить ω , используя $\frac{\partial \widehat{\mathcal{L}}_T}{\partial \omega}$, чтобы *минимизировать* $\widehat{\mathcal{L}}_T$;

конец

пока не сошлось;

вспомогательного распределения $\mathbb{S}^1$. Для простоты мы заменяем минимизацию целевой функции $\mathcal{L}(f_{\theta, [1:K]}, T_{\omega, [1:K]})$ по $T_{\omega, [1:K]}$ на прямую минимизацию с-преобразования $\int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{S}} (c_k(x_k, T_k(x_k, s)) - f_k(T_k(x_k, s))) d\mathbb{S}(s) d\mathbb{P}_k(x_k)$, которое имеет то же множество минимизаторов. Мы подробно описываем нашу процедуру оптимизации в Алгоритме 1.

Получение выборки. Наш подход к оцениванию SUOT барицентра ослабляет ограничения на маргиналы, связанные со входными распределениями $\mathbb{P}_k$. Это означает, что во время получения выборки входные точки x_k следует получать не из распределений $\mathbb{P}_k$, а из левых маргиналов обученных планов $(\hat{\gamma}_k)_x$. Однако получение выборки из этих маргиналов не задано в явном виде и требует

¹Получение выборки из стохастического распределения опускается, когда мы имеем дело с детерминированными отображениями $T_{\omega, [1:K]}$.

использования существующих техник получения выборки из *перевзвешенных* распределений, например *метода выборки с отклонением*.

Эти техники применяются следующим образом. Благодаря Теореме 3.4.2 (а) мы можем аппроксимировать отношение плотностей мер $(\gamma_k^*)_x$ и $\mathbb{P}_k$: $\frac{d(\gamma_k^*)_x}{d\mathbb{P}_k(x)} \approx \nabla \bar{\Psi}(-(\hat{f}_k)^c(x))$, где $\hat{f}_k$ обозначает обученный потенциал. Соответственно, мы можем (1) получить выборки $X_k \sim \mathbb{P}_k$ и выборки той же размерности из равномерного распределения $u_k \sim U$; (2) вычислить константу $c \stackrel{\text{def}}{=} \max(\nabla \bar{\Psi}(-(\hat{f}_k)^c(x)))$; (3) принять выборки X'_k , которые удовлетворяют неравенству $u_k \leq \frac{\nabla \bar{\Psi}(-(\hat{f}_k)^c(X'_k))}{c}$, и отклонить остальные.

3.5 Доказательства теоретических результатов

3.5.1 Доказательства Теоремы 3.4.1 и Следствия 3.4.1.1

Доказательство Теоремы 3.4.1. Подставляя двойственную форму (3.5) в (3.7), мы можем сформулировать задачу поиска барицентра как нахождение

$$\mathcal{L}^* = \min_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \sup_{f_1, \dots, f_K \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})} \underbrace{\sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^c(x)) d\mathbb{P}_k(x_k) + \int_{\mathcal{Y}} f_k(y) d\mathbb{Q}(y) \right]}_{\mathcal{F}(\mathbb{Q}, f_{[1:K]}) \stackrel{\text{def}}{=}} \quad (3.14)$$

где мы заменяем $\inf$ на $\min$ благодаря существованию SUOT барицентра, см. §3.2.2. Заметим, что компактность пространства $\mathcal{Y}$ влечёт слабую компактность $\mathcal{P}(\mathcal{Y})$. В то же время функционал $\mathbb{Q} \mapsto \mathcal{F}(\mathbb{Q}, f_{[1:K]})$ является непрерывным и линейным по $\mathbb{Q}$. При этом он является вогнутым по $f_{[1:K]}$. Действительно, выпуклая сопряжённая функция к порождающей функции ψ является выпуклой и неубывающей по определению, а операция s -преобразования является вогнутой, см. [14, Предложение A.1 (iii)]. Поскольку суперпозиция вогнутой невозрастающей функции $-\bar{\Psi}_k(\cdot)$ и выпуклой функции $-f_k^c(\cdot)$, то есть $-\bar{\Psi}_k(-f_k^c(\cdot))$, также является вогнутой функцией (для каждого $k \in \overline{K}$), то мы можем применить минимаксную теорему [112, Следствие 1] и

поменять местами $\min$ и $\sup$ в (3.14):

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}^* &= \sup_{f_1, \dots, f_K \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})} \min_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^c(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + \int_{\mathcal{Y}} f_k(y) d\mathbb{Q}(y) \right] = \\
&\sup_{f_1, \dots, f_K \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})} \left[\sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^c(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + \min_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \int_{\mathcal{Y}} \underbrace{\sum_{k=1}^K \lambda_k f_k(y) d\mathbb{Q}(y)}_{\bar{f}(y) \stackrel{\text{def}}{=}} \right] = \\
&\sup_{f_1, \dots, f_K \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})} \underbrace{\left[\sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^c(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + \min_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \int_{\mathcal{Y}} \bar{f}(y) d\mathbb{Q}(y) \right]}_{\mathcal{G}(f_1, \dots, f_K) \stackrel{\text{def}}{=}}. \quad (3.15)
\end{aligned}$$

Теперь используем следующий факт: $\inf_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \int_{\mathcal{Y}} \bar{f}(y) d\mathbb{Q}(y) = \inf_{y \in \mathcal{Y}} \bar{f}(y)$. Предположим, что истинное значение $m \stackrel{\text{def}}{=} \min_{y \in \mathcal{Y}} \bar{f}(y)$ известно. Тогда мы можем ограничить $\sup$ в (3.15) потенциалами $f_{[1:K]}$, удовлетворяющими условию m -конгруэнтности: $\sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m$. Действительно, для каждого кортежа $(f_1, \dots, f_K)$ рассмотрим кортеж $(\tilde{f}_1, \dots, \tilde{f}_K) \stackrel{\text{def}}{=} (f_1, \dots, f_K + \frac{m - \bar{f}}{\lambda_K})$, удовлетворяющий условию конгруэнтности. Для этого кортежа $\inf_{y \in \mathcal{Y}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \tilde{f}_k = m$ и мы имеем:

$$\begin{aligned}
&\mathcal{G}(\tilde{f}_1, \dots, \tilde{f}_K) - \mathcal{G}(f_1, \dots, f_K) = \\
&\lambda_K \int_{\mathcal{X}_K} [-\bar{\Psi}_K(-\tilde{f}_K^c(x_K)) + \bar{\Psi}_K(-f_K^c(x_K))] d\mathbb{P}_K(x_K) + \cancel{m} - \cancel{m} = \\
&\lambda_K \int_{\mathcal{X}_K} \left[\bar{\Psi}_K(-f_K^c(x_K)) - \bar{\Psi}_K(-(f_K + \frac{m - \bar{f}}{\lambda_K})^c(x_K)) \right] d\mathbb{P}_K(x_K) \geq 0. \quad (3.16)
\end{aligned}$$

Здесь неравенство в строке (3.16) следует из свойств функции s -преобразования и выпуклой сопряжённой к порождающей функции дивергенции $\bar{\Psi}$. Во-первых, s -преобразование является убывающей функцией своего аргумента, см. [14, Предложение A.1 (i)]. Таким образом,

$$f_K + \frac{m - \bar{f}}{\lambda_K} \leq f_K + \frac{\cancel{m} - \cancel{m}}{\lambda_K} = f_K \implies (f_K + \frac{m - \bar{f}}{\lambda_K})^{c_K} \geq f_K^{c_K}.$$

Во-вторых, выпуклая сопряжённая функция $\bar{\Psi}_K$ является неубывающей, откуда

$$-f_K^{c_K} \geq -(f_K + \frac{m - \bar{f}}{\lambda_K})^{c_K} \implies \bar{\Psi}_K(-f_K^{c_K}) \geq \bar{\Psi}_K(-(f_K + \frac{m - \bar{f}}{\lambda_K})^{c_K}).$$

Из этого неравенство (3.16) становится очевидным. Это означает, что переход к конгруэнтному кортежу корректен для известного значения m . Важно отметить,

что на практике это значение не задано и должно оптимизироваться. Таким образом, итоговая целевая функция оптимизации может быть записана как

$$\mathcal{L}^* = \sup_{\substack{m \in \mathbb{R} \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \mathcal{G}(f_1, \dots, f_K) = \sup_{\substack{m \in \mathbb{R} \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \left[\sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^c(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right] \quad (3.17)$$

где (3.17) совпадает с (3.8). $\square$

Доказательство Следствия 3.4.1.1. Подставляя определение с-преобразования в (3.8), мы получаем

$$\sup_{\substack{m \in \mathbb{R} \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k \left(- \inf_{\mu(y) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\mu(y) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right] = \mathcal{L}^* = \quad (3.18)$$

$$\sup_{\substack{m \in \mathbb{R} \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} \inf_{\mu(y) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \left\{ -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\mu(y) \right) \right\} d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right]. \quad (3.19)$$

При переходе от (3.18) к (3.19) мы меняем местами операцию взятия $\inf$ по $\mu(y) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ и $\bar{\Psi}_k$. Это возможно, поскольку $-\bar{\Psi}_k$ монотонно невозрастающая, и инфимум в (3.18) достигается.

Теперь заметим, что отображение

$$(x_k, \mu) \mapsto \left\{ -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\mu(y) \right) \right\} \quad (3.20)$$

является измеримым и ограниченным снизу. Действительно, пространства $\mathcal{X}_k$, $\mathcal{Y}$ и $\mathcal{P}(\mathcal{Y})$ компактны, а потенциалы $f_k(y)$ и функции стоимости $c_k(x_k, y)$ непрерывны, поэтому функция $(x_k, \mu) \mapsto - \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\mu(y)$ ограничена сверху, т.е. $\exists B_k \in \mathbb{R}$:

$$\forall (x_k, \mu) \in \mathcal{X}_k \times \mathcal{P}(\mathcal{Y}) : - \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\mu(y) \leq B_k.$$

Так как $-\bar{\Psi}_k$ монотонна невозрастающая и $\text{dom}(\bar{\Psi}_k) = (-\infty, \underbrace{\lim_{u \rightarrow \infty} \frac{\psi(u)}{u}}_{=+\infty}) = \mathbb{R}$, то:

$$\forall (x_k, \mu) \in \mathcal{X}_k \times \mathcal{P}(\mathcal{Y}) : -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\mu(y) \right) \geq -\bar{\Psi}_k(B_k) > -\infty.$$

Последнее неравенство показывает, что отображение в (3.20) действительно ограничено снизу; его измеримость очевидна. Благодаря свойствам этого отображения, мы можем воспользоваться правилом перестановки между интегралом и $\inf$ [113, Предложения 7.27 and 7.50] и получить

$$\sup_{\substack{m \in \mathbb{R} \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\inf_{\substack{\gamma_k(\cdot|x_k): \\ \mathcal{X}_k \mapsto \mathcal{P}(\mathcal{Y})}} \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\gamma_k(y|x_k) \right) \right] d\mathbb{P}_k(x_k) + m \quad (3.21)$$

где $\inf$ берётся по семействам измеримых стохастических отображений $\{\gamma_k(\cdot|x_k)\}_{[1:K]}$. Заметим, что (3.21) совпадает с (3.9) после тривиальной перестановки операций суммирования и $\inf$. Это завершает доказательство. $\square$

Доказательство Следствия 3.4.1.2. Поскольку $\text{SUOT}_{c_1} = \text{OT}_{c_1}$, мы имеем $\bar{\Psi}_1 = \text{Id}$. Тогда подставляя $\tilde{f}_1 := f_1 - \frac{m}{\lambda_1}$ и $\bar{\Psi}_1 = \text{Id}$ в (3.9), мы получаем условие конгруэнтности следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^* = & \sup_{\substack{m, f_{[1:K]} \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k)} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\gamma_k(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right] = \\ & \sup_{\substack{m, f_{[1:K]} \\ \lambda_1 \tilde{f}_1 + \sum_{k=2}^K \lambda_k f_k \equiv 0}} \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \left[\lambda_1 \int_{\mathcal{X}_1} \int_{\mathcal{Y}} \left(c_1(x_1, y) - \left(\tilde{f}_1(y) + \frac{m}{\lambda_1} \right) \right) d\gamma_1(y|x_1) d\mathbb{P}_1(x_1) + \right. \\ & \left. \sum_{k=2}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\gamma_k(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right] = \\ & \sup_{\lambda_1 \tilde{f}_1 + \sum_{k=2}^K \lambda_k f_k \equiv 0} \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \left[\lambda_1 \int_{\mathcal{X}_1} -\bar{\Psi}_1 \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_1(x_1, y) - \tilde{f}_1(y)) d\gamma_1(y|x_1) \right) d\mathbb{P}_1(x_1) + \right. \\ & \left. \sum_{k=2}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\gamma_k(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) \right]. \end{aligned}$$

$\square$

3.5.2 Доказательство Теоремы 3.4.2

Ниже мы напомним вспомогательный теоретический результат, который будет использоваться в доказательстве Теоремы 3.4.2.

Теорема 3.5.1 (Связь между решениями двойственных задач ОТ и UOT [22]). *Предположим, что $\bar{\Psi}$ является непрерывно дифференцируемой функцией. Тогда, если существует оптимальный потенциал f^* , доставляющий максимум в двойственной задаче UOT, f^* является решением следующей задачи*

$$OT_c(\tilde{\mathbb{P}}, \tilde{\mathbb{Q}}) = \sup_f \int_{\mathcal{X}} f^c(x) d\tilde{\mathbb{P}}(x) + \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\tilde{\mathbb{Q}}(y)$$

где $d\tilde{\mathbb{P}}(x) = \nabla \bar{\Psi}_1(-(f^*)^c(x)) d\mathbb{P}(x)$ и $d\tilde{\mathbb{Q}}(y) = \nabla \bar{\Psi}_2(-f^*(y)) d\mathbb{Q}(y)$.

Эта теорема подчёркивает связь между решениями классической задачи ОТ и её несбалансированного аналога. Заметим, что в случае задачи SUOT: $\bar{\Psi}_2(y) = y$, поэтому мера $\tilde{\mathbb{Q}}$ сводится к $\mathbb{Q}$. Теперь мы готовы доказать нашу Теорему 3.4.2.

Доказательство Теоремы 3.4.2. Ниже мы показываем, что оптимальные потенциалы $f_{[1:K]}^*$, доставляющие максимум в двойственной задаче SUOT барицентра (3.8), также являются оптимальными для каждой из задач $SUOT_{c_k, \Psi_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q})$. Напомним, что задача SUOT барицентра (3.7) допускает минимизатор, который мы обозначаем как $\mathbb{Q}^*$. Тогда:

$$\sum_{k=1}^K \lambda_k SUOT_{c_k, \Psi_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q}^*) \stackrel{(3.8)}{=} \sup_{\substack{m \in \mathbb{R} \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^{c_k}(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + m \right] = (3.22)$$

$$\sup_{\substack{m \in \mathbb{R}, f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^{c_k}(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + \underbrace{\int_{\mathcal{Y}} \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k(y) d\mathbb{Q}^*(y)}_{=m} \leq (3.23)$$

$$\underbrace{\sup_{f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y})} \sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(-f_k^{c_k}(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + \int_{\mathcal{Y}} \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k(y) d\mathbb{Q}^*(y)}_{= \sum_{k=1}^K \lambda_k SUOT_{c_k, \Psi_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q}^*)} = (3.24)$$

Здесь переход от строки (3.22) к (3.23) следует из того факта, что оптимизация проводится по m -конгруэнтным потенциалам. Если затем снять это ограничение

на потенциалы, значение $\sup$ может стать больше, что объясняет переход между (3.23)-(3.24). Важно, что финальная целевая функция в строке (3.24) равна исходной целевой функции в строке (3.22). Таким образом, неравенство в строке (3.23) обращается в равенство. Это доказывает, что потенциалы $f_{[1:K]}^*$, доставляющие максимум в задаче SUOT барицентра (3.8), совпадают с оптимальными потенциалами для каждой из задач SUOT.

Тогда, благодаря Теореме 3.5.1, задача SUOT барицентра (3.24) допускает формулировку:

$$\mathcal{L}^* = \sum_{k=1}^K \lambda_k \text{SUOT}_{c_k, \psi_k}(\mathbb{P}_k, \mathbb{Q}^*) = \sum_{k=1}^K \lambda_k \text{OT}_{c_k}(\tilde{\mathbb{P}}_k, \mathbb{Q}^*) \quad (3.25)$$

где каждое из распределений $\tilde{\mathbb{P}}_k$ ($k \in \bar{K}$) задаётся через оптимальный потенциал f_k^* , доставляющий максимум в задаче $\text{OT}_{c_k}(\tilde{\mathbb{P}}_k, \mathbb{Q}^*)$ в её двойственной форме (3.2): $d\tilde{\mathbb{P}}_k(x_k) = \nabla \bar{\Psi}(-(f_k^*)^{c_k}(x_k))d\mathbb{P}_k(x_k)$. Таким образом, оптимальные SUOT планы теперь соответствуют оптимальным ОТ планам $\gamma_k^*(x, y)$, принадлежащим $\Pi(\tilde{\mathbb{P}}_k, \mathbb{Q}^*)$, т.е. имеющим маргиналы $(\gamma_k^*)_x = \tilde{\mathbb{P}}_k$, $(\gamma_k^*)_y = \mathbb{Q}^*$.

Теперь зафиксируем $k \in \bar{K}$. Наша цель - показать, что

$$\gamma_k^*(\cdot | x_k) \in \arg \inf_{\gamma_k(\cdot | x_k)} \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k^*(y)) d\gamma(\cdot | x_k),$$

где $\inf$ берётся по измеримым отображениям $\gamma_k(\cdot | x_k)$. Тогда, повторяя выводы Следствия 3.4.1.1, мы легко получим, что $\gamma_k^*(\cdot | x_k) \in \arg \inf_{\gamma_k(\cdot | x_k)} \mathcal{L}(f_k^*, \gamma_k(\cdot | x_k))$.

Чтобы доказать первое, мы снова используем тот факт, что γ_k^* является решением сбалансированной задачи ОТ между перемасштабированным маргиналом $\tilde{\mathbb{P}}_k$ и $\mathbb{Q}^*$. Заметим, что $\nabla \bar{\Psi}_k$ является непрерывной функцией, поскольку предполагается, что $\bar{\Psi}_k$ является непрерывно дифференцируемой функцией. Это влечёт, что $\tilde{\mathbb{P}}_k$ является абсолютно непрерывным распределением относительно $\mathbb{P}_k$. Таким образом, мы можем использовать [29, Remark 5.13], где утверждается, что для каждого $y \in \text{Supp}(\gamma_k^*(\cdot | x_k))$ выполняется $y \in \arg \inf_{y' \in \mathcal{Y}} (c_k(x_k, y') - f_k^*(y'))$. Последнее утверждение эквивалентно тому, что $\gamma_k^*(\cdot | x_k) \in \arg \inf_{\gamma_k(\cdot | x_k)} \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k^*(y)) d\gamma(\cdot | x_k)$, что завершает доказательство. Заметим, что поскольку инфимум достигается по крайней мере на одном отображении $\gamma_k^*(\cdot | x_k)$, то $\arg \inf_{\gamma_k(\cdot | x_k)}$ в последнем равенстве на самом деле является $\arg \min_{\gamma_k(\cdot | x_k)}$.

□

3.5.3 Доказательство Теоремы 3.4.3

Теорема предоставляет анализ разрывов двойственности. Нам даны аппроксимации: $\widehat{m}$; $\widehat{f}_{[1:K]}$, которые являются $\widehat{m}$ -конгруэнтными; $\widehat{\gamma}_{[1:K]}$. Напомним, что разрывы двойственности определены следующим образом:

$$\delta_1(\widehat{f}_{[1:K]}, \widehat{\gamma}_{[1:K]}) = \widetilde{\mathcal{L}}(\widehat{f}_{[1:K]}, \widehat{\gamma}_{[1:K]}, \widehat{m}) - \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \widetilde{\mathcal{L}}(\widehat{f}_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, \widehat{m}); \quad (3.26)$$

$$\delta_2(\widehat{f}_{[1:K]}) = \mathcal{L}^* - \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \widetilde{\mathcal{L}}(\widehat{f}_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, \widehat{m}). \quad (3.27)$$

Доказательство Теоремы 3.4.3. Наше доказательство существенно расширяет доказательство [15, Теорема 4.2] для случая классической функции стоимости.

Часть 1. Несколько обозначений.

Для начала введём несколько обозначений ($\mathbb{Q}^*$ — SUOT барицентр):

$$\mathcal{V}_k(f_k, \gamma_k) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{X}_k} -\overline{\Psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k(y)) d\gamma_k(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k); \quad (3.28)$$

$$\widetilde{\mathcal{V}}_k(f_k, \gamma_k) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{V}_k(f_k, \gamma_k) + \int_{\mathcal{Y}} f_k(y) d\mathbb{Q}^*(y); \quad (3.29)$$

$$\mathcal{J}_k(f_k) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \mathcal{V}_k(f_k, \gamma_k); \quad (3.30)$$

$$\widetilde{\mathcal{J}}_k(f_k) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{J}_k(f_k) + \int_{\mathcal{Y}} f_k(y) d\mathbb{Q}^*(y); \quad (3.31)$$

Заметим, что выполняется:

$$\mathcal{L}^* = \sup_{\substack{m \in \mathbb{R}, \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \left\{ \sum_{k=1}^K \lambda_k \mathcal{J}_k(f_k) + m \right\} = \sup_{\substack{m \in \mathbb{R}, \\ f_{[1:K]} \in \mathcal{C}^K(\mathcal{Y}) \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k f_k \equiv m}} \inf_{\gamma(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \left\{ \sum_{k=1}^K \lambda_k \mathcal{V}_k(f_k, \gamma_k) + m \right\}.$$

Также, если $f_{[1:K]}$ являются m -конгруэнтными, то $\sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{Y}} f_k(y) d\mathbb{Q}^*(y) = m$, и поэтому:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^K \lambda_k \widetilde{\mathcal{V}}(f_k, \gamma_k) &= \sum_{k=1}^K \lambda_k \mathcal{V}_k(f_k, \gamma_k) + m = \widetilde{\mathcal{L}}(f_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, m); \\ \sum_{k=1}^K \lambda_k \widetilde{\mathcal{J}}_k(f_k) &= \sum_{k=1}^K \lambda_k \mathcal{J}_k(f_k) + m = \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \widetilde{\mathcal{L}}(f_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, m). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Теперь мы начинаем доказательство.

Часть 2. Анализ разрыва двойственности δ_1 .

Сначала выразим разрыв двойственности δ_1 через введенные выше $\mathcal{V}_k$ (3.28), $\mathcal{J}_k$ (3.30) следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \delta_1 &= \tilde{\mathcal{L}}(\hat{f}_{[1:K]}, \hat{\gamma}_{[1:K]}, \hat{m}) - \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \tilde{\mathcal{L}}(\hat{f}_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, \hat{m}) \\
 &= \sum_{k=1}^K \lambda_k \{ \mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \hat{\gamma}_k) - \mathcal{J}_k(\hat{f}_k) \} \\
 &= \sum_{k=1}^K \lambda_k \delta_{1,k}(\hat{f}_k, \hat{\gamma}_k), \\
 \text{где } \delta_{1,k}(\hat{f}_k, \hat{\gamma}_k) &\stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \hat{\gamma}_k) - \mathcal{J}_k(\hat{f}_k); \tag{3.33}
 \end{aligned}$$

Мы анализируем разрывы двойственности $\delta_{1,k}$ для каждого конкретного $k \in [1, K]$ по отдельности. Для удобства введём функцию $\hat{g}_k(x_k, y) \stackrel{\text{def}}{=} c_k(x_k, y) - \hat{f}_k(y)$, $x_k \in \mathcal{X}_k$, $y \in \mathcal{Y}$. Заметим, что $\hat{g}_k$ является β -сильно выпуклой по второму аргументу по предположению теоремы. Определим отображения $T_k^{\hat{f}} : \mathcal{X}_k \rightarrow \mathcal{Y}$ следующим образом:

$$T_k^{\hat{f}}(x_k) \stackrel{\text{def}}{=} \arg \inf_{y \in \mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y).$$

Заметим, что отображение $T_k^{\hat{f}}$ корректно определено (поскольку $\hat{g}_k$ сильно выпукла) и является борелевским (см. доказательство [15, Теорема 4.2]). Оно задаёт семейство условных распределений:

$$\begin{aligned}
 x_k &\mapsto \gamma_k^{\hat{f}}(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y}); \\
 \gamma_k^{\hat{f}}(\cdot|x_k) &\stackrel{\text{def}}{=} \delta_{T_k^{\hat{f}}(x_k)}(\cdot). \tag{3.34}
 \end{aligned}$$

Для любого семейства $\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ имеем:

$$\mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \gamma_k) = \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) \tag{3.35}$$

$$\geq \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\psi}_k \left(- \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) \tag{3.36}$$

$$= \int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\psi}_k \left(- \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k^{\hat{f}}(y|x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) = \mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \gamma_k^{\hat{f}}),$$

где при переходе от (3.35) к (3.36) мы используем свойства $\bar{\Psi}_k$ и $T_k^{\hat{f}}$:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k(y|x_k) &\geq \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \Rightarrow \\ - \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k(y|x_k) &\leq -\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \xRightarrow{\bar{\Psi}_k \text{ не убывает}} \\ \bar{\Psi}_k\left(- \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k(y|x_k)\right) &\leq \bar{\Psi}_k\left(-\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))\right) \Rightarrow \\ -\bar{\Psi}_k\left(- \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k(y|x_k)\right) &\geq -\bar{\Psi}_k\left(-\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))\right). \end{aligned}$$

Из приведённого выше мы заключаем, что $\gamma_k^{\hat{f}}$ минимизирует функционал $\gamma_k \mapsto \mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \gamma_k)$. В частности, оно доставляет значение $\mathcal{J}_k(\hat{f}_k)$:

$$\mathcal{J}_k(\hat{f}_k) = \mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \gamma_k^{\hat{f}}). \quad (3.37)$$

С точки зрения (3.37) разрыв двойственности $\delta_{1,k}$ можно проанализировать следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta_{1,k}(\hat{f}_k, \hat{\gamma}_k) &= \mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \hat{\gamma}_k) - \mathcal{V}_k(\hat{f}_k, \gamma_k^{\hat{f}}) \\ &= \int_{\mathcal{X}_k} \left\{ \bar{\Psi}_k\left(-\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))\right) - \bar{\Psi}_k\left(- \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\hat{\gamma}_k(y|x_k)\right) \right\} d\mathbb{P}_k(x_k) \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\geq \eta \int_{\mathcal{X}_k} \left\{ \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\hat{\gamma}_k(y|x_k) - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \right\} d\mathbb{P}_k(x_k) \quad (3.39)$$

$$= \eta \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \left\{ \hat{g}_k(x_k, y) - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \right\} d\hat{\gamma}_k(y|x_k) d\mathbb{P}_k(x_k) \quad (3.40)$$

$$\geq \frac{\eta\beta}{2} \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \|y - T_k^{\hat{f}}(x_k)\|_2^2 d\hat{\gamma}_k(y|x_k) d\mathbb{P}_k(x_k). \quad (3.41)$$

Переход от (3.38) к (3.39). Заметим, что:

$$-\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \geq - \underbrace{\int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\hat{\gamma}_k(y|x_k)}_{\stackrel{\text{def}}{=} \hat{g}_k^{\gamma}} \geq - \max_{x_k \in \mathcal{X}_k; y \in \mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) \geq -b.$$

Свойства первого порядка выпуклой дифференцируемой функции $\bar{\Psi}_k$ дают:

$$\nabla \bar{\Psi}_k(-\hat{g}_k^{\gamma}) \geq \nabla \bar{\Psi}_k(-b) = \eta;$$

$$\bar{\Psi}_k(-\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))) \geq \bar{\Psi}_k(-\hat{g}_k^\gamma) + \nabla \bar{\Psi}_k(-\hat{g}_k^\gamma) [\hat{g}_k^\gamma - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))]$$

На их основе мы получаем:

$$\bar{\Psi}_k(-\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))) - \bar{\Psi}_k(-\hat{g}_k^\gamma) \geq \eta [\hat{g}_k^\gamma - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))],$$

что обосновывает переход от (3.38) к (3.39).

Переход от (3.40) к (3.41). Заметим, что $T_k^{\hat{f}}(x_k)$ является минимизатором отображения $y \mapsto \hat{g}_k(x_k, y)$. Поэтому, вследствие β -сильной выпуклости $\hat{g}_k$ по второму аргументу, выполняется:

$$\frac{\beta}{2} \|T_k^{\hat{f}}(x_k) - y\|_2^2 \leq \hat{g}_k(x_k, y) - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)),$$

что обосновывает этот переход.

Часть 3. Анализ разрыва δ_2 .

Заметим, что мы работаем при условиях Теоремы 3.4.2. В частности, мы предполагаем, что существуют m^* и m^* -конгруэнтные потенциалы $\{f_k^* \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})\}_{k=1}^K$, которые доставляют максимум в (3.9). Также мы обозначаем $\{\gamma_k^*\}_{k=1}^K$ как семейство оптимальных SUOT планов между $\mathbb{P}_k$ и $\mathbb{Q}^*$.

При этих предположениях мы замечаем, что:

$$\mathcal{L}^* \stackrel{\text{см. (3.8)}}{=} \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k(- (f_k^*)^{c_k}(x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k) + m^* \right] \quad (3.42)$$

$$= \sum_{k=1}^K \lambda_k \left[\int_{\mathcal{X}_k} -\bar{\Psi}_k\left(-\int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k^*(y)) d\gamma_k^*(y|x_k)\right) d\mathbb{P}_k(x_k) + m^* \right] \quad (3.43)$$

$$= \sum_{k=1}^K \lambda_k \tilde{\mathcal{V}}_k(f_k^*, \gamma_k^*) \quad (3.44)$$

где переход от (3.42) к (3.43) следует из доказательства Теоремы 3.4.2.

В частности,

$$\int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k^*(y)) d\gamma_k^*(y|x_k) = (f_k^*)^{c_k}(x_k).$$

Благодаря (3.44) и (3.32) разрыв δ_2 можно разложить следующим образом:

$$\delta_2 = \mathcal{L}^* - \inf_{\gamma_k(\cdot|x_k) \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \tilde{\mathcal{L}}(\hat{f}_{[1:K]}, \gamma_{[1:K]}, \hat{m})$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k=1}^K \lambda_k (\tilde{\mathcal{V}}_k(f_k^*, \gamma_k^*) - \tilde{\mathcal{J}}_k(\hat{f}_k)) \\
&\stackrel{\text{см. (3.37)}}{=} \sum_{k=1}^K \lambda_k (\tilde{\mathcal{V}}_k(f_k^*, \gamma_k^*) - \tilde{\mathcal{V}}_k(\hat{f}_k, \gamma_k^{\hat{f}})) \\
&= \sum_{k=1}^K \lambda_k \delta_{2,k}(\hat{f}_k), \\
&\text{где} \quad \delta_{2,k}(\hat{f}_k) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\mathcal{V}}_k(f_k^*, \gamma_k^*) - \tilde{\mathcal{V}}_k(\hat{f}_k, \gamma_k^{\hat{f}}).
\end{aligned}$$

Далее мы анализируем разрыв $\delta_{2,k}$ для каждого конкретного $k \in [1 : K]$:

$$\delta_{2,k}(\hat{f}_k) = \int_{\mathcal{X}_k} \left\{ \bar{\Psi}_k \left(-\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \right) - \bar{\Psi}_k \left(-(f_k^*)^{c_k}(x_k) \right) \right\} d\mathbb{P}_k(x_k) \quad (3.45)$$

$$\begin{aligned}
&+ \int_{\mathcal{Y}} \{f_k^*(y) - \hat{f}_k(y)\} d\mathbb{Q}^*(y) \\
&\geq \int_{\mathcal{X}_k} \left\{ (f_k^*)^{c_k}(x_k) - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \right\} \underbrace{\nabla \bar{\Psi}_k \left(-(f_k^*)^{c_k}(x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k)}_{=d(\gamma_k^*)_x(x_k), \text{ см. (3.11)}} \\
&+ \int_{\mathcal{Y}} \{f_k^*(y) - \hat{f}_k(y)\} d\mathbb{Q}^*(y)
\end{aligned} \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \{c_k(x_k, y) - f_k^*(y)\} \underbrace{d\gamma_k^*(y|x_k) d(\gamma_k^*)_x(x_k)}_{=d\gamma_k^*(x_k, y)} + \int_{\mathcal{Y}} f_k^*(y) d\mathbb{Q}^*(y) \\
&- \int_{\mathcal{X}_k} \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) d(\gamma_k^*)_x(x_k) - \int_{\mathcal{Y}} \hat{f}_k(y) d\mathbb{Q}^*(y)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \{c_k(x_k, y) - \cancel{f_k^*(y)}\} d\gamma_k^*(x_k, y) + \cancel{\int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} f_k^*(y) d\gamma_k^*(x_k, y)} \\
&- \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \underbrace{\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))}_{\dots\dots\dots} d\gamma_k^*(x_k, y) - \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \underbrace{\hat{f}_k(y)}_{\dots\dots\dots} d\gamma_k^*(x_k, y)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \{\underbrace{\hat{g}_k(x_k, y)}_{\dots\dots\dots} - \underbrace{\hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k))}_{\dots\dots\dots}\} d\gamma_k^*(x_k, y) \\
&= \int_{\mathcal{X}_k} \left\{ \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k^*(y|x_k) - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \right\} \nabla \bar{\Psi}_k \left(-(f_k^*)^{c_k}(x_k) \right) d\mathbb{P}_k(x_k) \quad (3.47)
\end{aligned}$$

$$\geq \eta \int_{\mathcal{X}_k} \left\{ \int_{\mathcal{Y}} \hat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k^*(y|x_k) - \hat{g}_k(x_k, T_k^{\hat{f}}(x_k)) \right\} d\mathbb{P}_k(x_k) \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned}
&= \eta \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \left\{ \widehat{g}_k(x_k, y) - \widehat{g}_k(x_k, T_k^{\widehat{f}}(x_k)) \right\} d\gamma_k^*(y|x_k) d\mathbb{P}_k(x_k) \\
&\geq \frac{\eta\beta}{2} \int_{\mathcal{X}_k} \int_{\mathcal{Y}} \|y - T_k^{\widehat{f}}(x_k)\|_2^2 d\gamma_k^*(y|x_k) d\mathbb{P}_k(x_k)
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Переход от (3.45) к (3.46) следует из свойств первого порядка выпуклой дифференцируемой функции $\overline{\Psi}_k$:

$$\overline{\Psi}_k(-\widehat{g}_k(x_k, T_k^{\widehat{f}}(x_k))) \geq \overline{\Psi}_k(-(f_k^*)^{c_k}(x_k)) + \nabla \overline{\Psi}_k(-(f_k^*)^{c_k}(x_k))[(f_k^*)^{c_k}(x_k) - \widehat{g}_k(x_k, T_k^{\widehat{f}}(x_k))].$$

Переход от (3.47) к (3.48). Поскольку $T_k^{\widehat{f}}$ минимизирует отображение $y \mapsto \widehat{g}_k(x_k, y)$, то:

$$\int_{\mathcal{Y}} \widehat{g}_k(x_k, y) d\gamma_k^*(y|x_k) - \widehat{g}_k(x_k, T_k^{\widehat{f}}(x_k)) \geq 0. \tag{3.50}$$

Также заметим, что:

$$-(f_k^*)^{c_k}(x_k) = - \int_{\mathcal{Y}} (c_k(x_k, y) - f_k^*(y)) d\gamma_k^*(y|x_k) \geq - \max_{x_k \in \mathcal{X}_k, y \in \mathcal{Y}} \{c_k(x_k, y) - f_k^*(y)\} \geq -b,$$

и, следовательно,

$$\nabla \overline{\Psi}_k(-(f_k^*)^{c_k}(x_k)) \geq \nabla \overline{\Psi}_k(-b) = \eta. \tag{3.51}$$

Совокупность (3.50) и (3.51) обосновывает этот переход.

Часть 4. Соберём всё вместе.

Суммирование неравенств для $\delta_{1,k}$ (3.41) и $\delta_{2,k}$ (3.49) даёт:

$$\begin{aligned}
&\delta_{1,k}(\widehat{f}_k, \widehat{\gamma}_k) + \delta_{2,k}(\widehat{f}_k) \\
&\geq \frac{\eta\beta}{2} \left\{ \int_{\mathcal{X}_k \times \mathcal{Y}} \|y - T_k^{\widehat{f}}(x_k)\|_2^2 d\widehat{\gamma}_k(y|x_k) d\mathbb{P}_k(x_k) + \int_{\mathcal{X}_k \times \mathcal{Y}} \|y - T_k^{\widehat{f}}(x_k)\|_2^2 d\gamma_k^*(y|x_k) d\mathbb{P}_k(x_k) \right\} \\
&\geq \frac{\eta\beta}{2} \int_{\mathcal{X}_k} \mathbb{W}_2^2(\widehat{\gamma}_k(\cdot|x_k), \gamma_k^*(\cdot|x_k)) d\mathbb{P}_k(x_k),
\end{aligned}$$

где последнее неравенство получается аналогично соответствующему неравенству в доказательстве [15, Теорема 4.2].

Агрегирование неравенств для $\delta_{1,k} + \delta_{2,k}$ с весами λ_k завершает доказательство теоремы:

$$\delta_1 + \delta_2 = \sum_{k=1}^K \lambda_k (\delta_{1,k} + \delta_{2,k}) \geq \frac{\eta\beta}{2} \sum_{k=1}^K \lambda_k \int_{\mathcal{X}_k} \mathbb{W}_2^2(\widehat{\gamma}_k(\cdot|x), \gamma_k^*(\cdot|x)) d\mathbb{P}_k(x).$$

□

3.6 Эксперименты

В этом разделе мы оцениваем нашу модель с помощью различных экспериментов. В §3.6.1 мы сравниваем численную точность нашего метода с базовыми методами. В §3.6.2 мы исследуем два ключевых свойства нашего метода **U-NOTV**: устойчивость к дисбалансу классов и устойчивость к выбросам. В частности, мы показываем, что эти свойства можно контролировать, настраивая параметр несбалансированности τ . В §3.6.3 мы оцениваем нашу модель для общих функций стоимости, используя функцию стоимости, инвариантную к форме и цвету и отличную от квадратичной функции стоимости, на наборе данных изображений. В §3.6.4, §3.6.5 мы тестируем нашу модель в задаче поиска барицентра для сбалансированного/полунесбалансированного ОТ для гауссовских распределений с вычислимыми истинными решениями. Кроме того, в §3.6.6 мы иллюстрируем ещё одно интересное применение U-NOTV в более высоких размерностях, показывая его способность манипулировать изображениями с помощью интерполяции их распределений на многообразиях изображений. Мы приводим детали относительно методик проведения экспериментов и базовых методов в §3.7. Код нашей модели написан с использованием фреймворка PyTorch и находится в открытом доступе по адресу <https://github.com/milenagazdieva/U-NOTBarycenters>.

3.6.1 Оценивание барицентра на синтетических наборах данных

Базовые методы. Мы стремимся оценить, насколько точно наша модель оценивает оптимальный барицентр $\mathbb{Q}^*$ и соответствующие транспортные отображения $T^*_{[1:K]}$. Поскольку наша работа является первой попыткой рассмотреть непрерывные SUOT барицентры, не существует базовых методов для прямого сравнения. Поэтому мы тщательно разработали *две базовые модели для сравнения с нашим подходом*. Эти базовые модели мотивированы эквивалентностью между ОТ барицентром двух распределений и интерполяцией между ними [29]. Каждая базовая модель выводится из двух подходов к обучению несбалансированного ОТ отображения T_{uot} между $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$: (i) полудвойственной (semi-dual) модели UOT (UOTM) [22] и (ii) модели ОТ

отображения (ОТМ) [64], объединенных с методом получения UOT выборки на основе подвыборок [32]. Поскольку задача SUOT эквивалентна задаче ОТ между перемасштабированными распределениями, мы проводим интерполяцию смещения, используя T_{uot} , чтобы аппроксимировать барицентр. В частности, мы рассматриваем следующую задачу поиска SUOT барицентра:

$$\inf_{\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})} \{\lambda_1 \text{OT}_{c_1}(\mathbb{P}_1, \mathbb{Q}) + \lambda_2 \text{SUOT}_{c_2}(\mathbb{P}_2, \mathbb{Q})\}, \quad (3.52)$$

где c_1, c_2 являются квадратичными функциями стоимости $c_k(x, y) = \frac{\|x - y\|^2}{2}$, $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{2}$. Пусть $T_1 \stackrel{\text{def}}{=} \lambda_1 Id + \lambda_2 T_{uot}$. Тогда $T_{1\#}\mathbb{P}_1$ и T_1 аппроксимируют распределение барицентра $\mathbb{Q}^*$ и транспортное отображение из $\mathbb{P}_1$ в $\mathbb{Q}^*$, соответственно. Заметим, что мы должны рассмотреть расстояние OT_{c_1} для первого распределения $\mathbb{P}_1$, чтобы гарантировать, что вычисленный барицентр $\mathbb{Q} = T_{1\#}\mathbb{P}_1$ имеет единичную массу в двух базовых методах. Поскольку задача ОТ является частным случаем задачи SUOT, наш метод может быть естественным образом применён и к этому случаю. Мы тестируем U-NOTB на модельном наборе данных *Spiral-to-Gaussian Mixture* (S→GM) (Рис. 3.1a).

Экспериментальные результаты. На Рис. 3.1 представлена качественная визуализация результатов нашей модели и двух базовых методов. Поскольку не существует формулы в замкнутой форме для задач поиска непрерывного SUOT барицентра, мы используем библиотеку POT [86] для вычисления SUOT барицентра $\mathbb{Q}^*$ между двумя дискретными эмпирическими распределениями и соответствующего ОТ отображения T_1^* , которые рассматриваются как истинные решения (Рис. 3.1б). На Рис. 3.1в-3.1д мы визуализируем распределение спирали $\mathbb{P}_1$, вычисленное транспортное отображение T_1 и барицентр $\mathbb{Q} = T_{1\#}\mathbb{P}_1$. Заметим, что, поскольку мы задаем OT_{c_1} для $\mathbb{P}_1$ в уравнении (3.52), метод отбраковки в этом случае не применяется. Рис. 3.1 показывает, что наша модель и другие базовые методы демонстрируют достойные результаты.

Таблица 23 предоставляет количественную оценку результатов нашей модели для более детального анализа. Вычисленный барицентр $\mathbb{Q}_{\omega^*}$ и транспортное отображение T_{1,ω^*} каждого метода оцениваются с двух точек зрения. Во-первых, оценивается различие между распределениями $\mathbb{Q}_{\omega^*}$ и $\mathbb{Q}^*$ путём измерения расстояния Васерштейна-2 $\mathbb{W}_2^2(\mathbb{Q}_{\omega^*}, \mathbb{Q}^*)$ (метрика $\mathbb{W}_2$). Во-вторых, оценивается ошибка между оптимальным и истинным транспортными отображениями путём измерения $\mathcal{L}_2$ -нормы

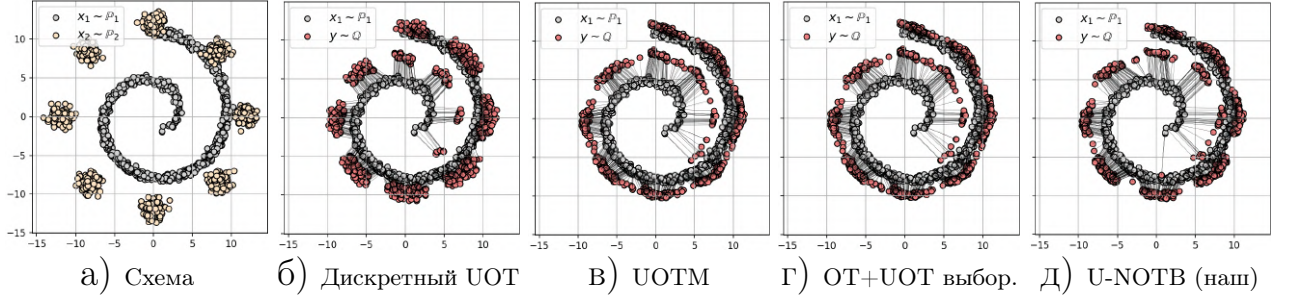


Рис. 3.1 — Транспортное отображение $T_1(x_1)$, $x_1 \sim \mathbb{P}_1$ и распределение UOT барицентра $\mathbb{Q} = T_{1\#}\mathbb{P}_1$ полученные с помощью дискретного UOT метода, UOTM, OT на подвыборках UOT и нашего метода в $Spiral \rightarrow Gaussian Mixture$.

Данные	Метрика	UOTM	OT на подвыборках UOT	U-NOTB (ours)
$Spiral \rightarrow Gaussian Mixture$	$\mathcal{L}_2$	0.65	0.31	0.25
	$\mathbb{W}_2$	0.29	0.15	0.12
$Moon \rightarrow Spiral$	$\mathcal{L}_2$	0.89	0.64	0.52
	$\mathbb{W}_2$	0.59	0.93	0.81

Таблица 23 — Сравнение на модельных данных.

между транспортными отображениями (метрика $\mathcal{L}_2$), т.е. $\int_{\mathcal{X}_1} \|T_{1,\omega^*}(x_1) - T_1^*(x_1)\|_2^2 d\mathbb{P}_1(x_1)$. Как показано в Таблице 23, наша модель позволяет достичь наиболее точного оценивания барицентра по трём из четырёх оценок, вычисленных по двум метрикам ($\mathbb{W}_2$ и $\mathcal{L}_2$) на двух наборах модельных данных.

3.6.2 Вычисление барицентра, устойчивого к выбросам и дисбалансу классов в данных

В этом разделе мы рассматриваем два ключевых свойства нашей модели U-NOTB: (i) устойчивость к дисбалансу классов, (ii) устойчивость к выбросам. Известно, что значение OT функционала $OT_c(\cdot, \cdot)$ чувствительно к выбросам и проблемам дисбаланса классов в данных. Как следствие, OT барицентр также в значительной степени подвержен влиянию этих факторов. Чтобы устранить эту чувствительность, рассматривается задача UOT, которая обобщает традиционную OT задачу, ослабляя ограничения на маргинальные распределения. Это ослабление приводит к двум важным свойствам. Во-первых, даже при наличии дисбаланса классов процесс перевзвешивания позволяет модели корректно сопоставлять моды распределений [32]. Во-вторых, модель демонстрирует устойчивость к выбросам, обеспечивая надёжный перенос мер

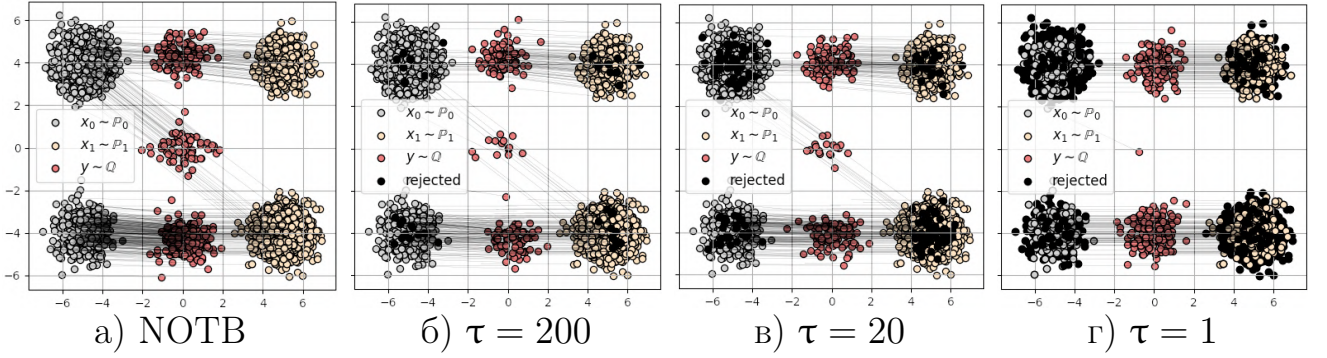


Рис. 3.2 — Условные планы $\gamma_k(y|x)$ и барицентр $\mathbb{Q}$, полученные с помощью NOTV и нашего метода в эксперименте по поиску барицентра смеси гауссовских распределений. Мы проводим эксперименты для различных значений параметра несбалансированности $\tau \in \{1, 20, 200\}$.

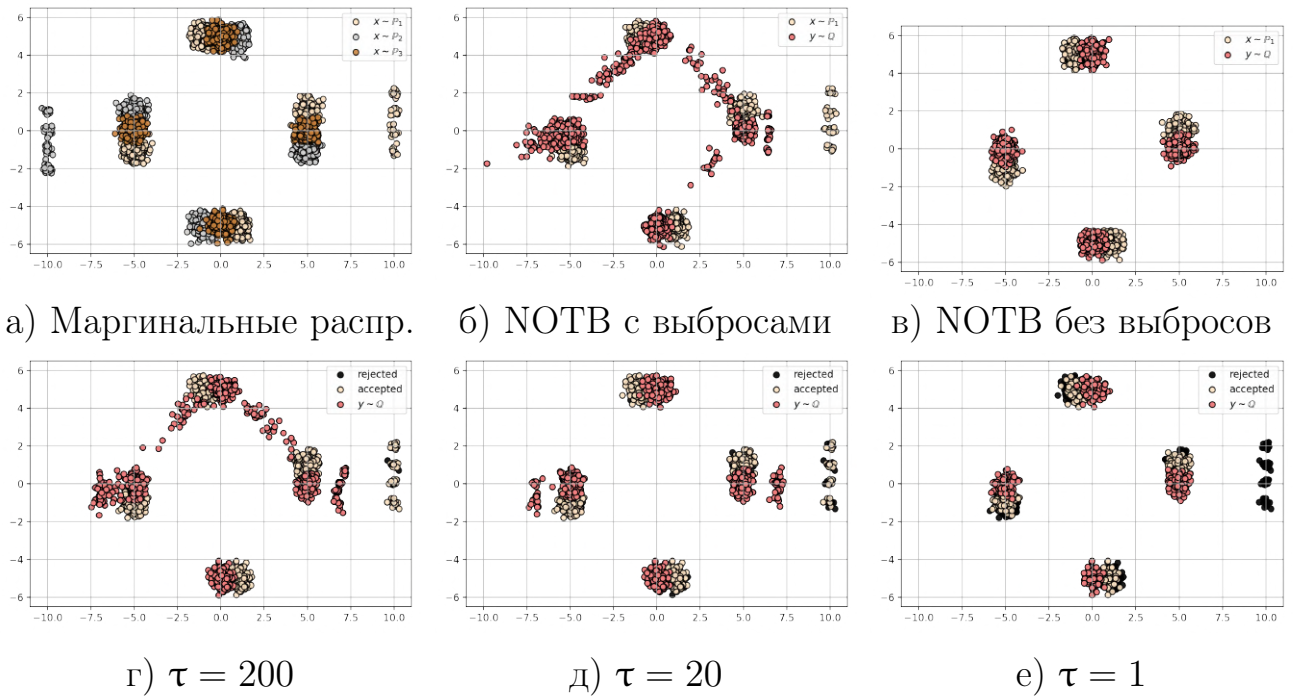


Рис. 3.3 — Вычисленный барицентр $\mathbb{Q}$, полученный из $x \sim \mathbb{P}_1$ с помощью NOTV и нашего метода для смеси гауссовских распределений с 5% выбросов. Мы проводим эксперименты для различных значений параметра несбалансированности $\tau \in \{1, 20, 200\}$. Для сравнения мы дополнительно обучили NOTV на данных без выбросов, как показано на подрисунке (с).

несмотря на наличие выбросов [22; 49]. Цель этого раздела состоит в следующем: (1) исследовать, присущи ли эти два свойства нашей модели U-NOTV, сравнив её с ОТ аналогом [15], и (2) показать, что данной устойчивостью можно управлять с помощью параметра несбалансированности τ .

Устойчивость к дисбалансу классов. Проблема дисбаланса классов в данных относится к случаю, когда каждый класс имеет различную долю

в $\mathbb{P}_k$. Данная проблема может приводить к нежелательным результатам при вычислении стандартного ОТ барицентра. Например, на Рис. 3.2 мы рассматриваем верхние моды и нижние моды для каждого распределения как классы 1 и 2, соответственно. В $\mathbb{P}_1$ 75% данных сосредоточено в классе 1 (верхние левые белые точки), тогда как только 25% сосредоточено в классе 1 для $\mathbb{P}_2$ (верхние правые жёлтые точки). В результате сбалансированный ОТ барицентр [15, NOTV] порождает моду между двумя мажоритарными модами $\mathbb{P}_k$, что может быть нежелательным явлением для барицентра (Рис. 3.2а).

Как показано на Рис. 3.2, мы тестируем нашу модель с различными значениями параметра несбалансированности $\tau \in \{1, 20, 200\}$ (уравнение 3.3). Кроме того, для сравнения мы проводим эксперименты с ОТ аналогом в сбалансированной постановке. Важно отметить, что по мере увеличения τ задача UOT сходится к задаче ОТ, что уменьшает гибкость в выборе маргинальных распределений [87]. Когда $\tau = 1$, наш несбалансированный барицентр демонстрирует устойчивые результаты, порождая моды барицентра между парой ближайших мод $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$. Наша модель отбрасывает часть выборок из мажоритарных мод, перевзвешивая их так, чтобы привести в лучшее соответствие моды исходных распределений. Более того, наш несбалансированный барицентр обеспечивает управляемость устойчивостью через τ . По мере увеличения τ гибкость в выборе маргинальных распределений в задаче UOT уменьшается. Таким образом, при $\tau = 200$ наша модель принимает почти все выборки, и UOT барицентр становится близок к ОТ барицентру. Мы считаем, что эта адаптивность UOT барицентра даёт практические преимущества в реальных сценариях.

Устойчивость к выбросам. Для оценки устойчивости метода к выбросам мы провели эксперименты на модельном наборе данных, включающем небольшую долю выбросов. Как показано на Рис. 3.3, набор данных состоит из трёх маргинальных распределений: $\mathbb{P}_1$ (бежевые точки), $\mathbb{P}_2$ (серые точки) и $\mathbb{P}_3$ (оранжевые точки). Выбросы, составляющие 5% от маргиналов $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$, были добавлены в самую внешнюю моду маргиналов. Мы протестировали нашу модель для различных параметров τ и сравнили её со сбалансированным ОТ аналогом. Аналогично экспериментам на устойчивость к дисбалансу классов, ожидалось, что меньшие значения τ обеспечат большую устойчивость к выбросам за счёт большей гибкости в выборе маргинальных распределений.

Для сравнительного анализа мы также протестировали подход NOTB для вычисления ОТ барицентра на данных без выбросов. Цель этого эксперимента — продемонстрировать желаемое поведение барицентра, когда в наборе данных нет выбросов. На Рис. 3.3 мы видим, что барицентр, полученный с помощью нашего U-NOTB подхода при $\tau = 1$, близок к ОТ барицентру, вычисленному в сценарии без выбросов. Этот результат показывает, что наша модель обеспечивает устойчивость к выбросам, отбрасывая выбросы при достаточно малых τ . По мере увеличения τ наша модель принимает большую долю выбросов. Поэтому выбросы слева и справа начинают влиять на барицентр, из-за чего образуются нежелательные моды барицентра между мажоритарными модами распределений $\mathbb{P}_k$. В итоге уменьшение τ повышает устойчивость к выбросам, тогда как увеличение τ даёт более точный барицентр за счёт учёта всех точек данных. Такая возможность настраивать τ обладает потенциалом для широкого круга приложений, где могут требоваться разные уровни толерантности к выбросам.

3.6.3 Эксперимент форма-цвет

Ниже приводятся детали эксперимента, демонстрирующего применение задачи поиска UOT барицентра с общими функциями стоимости. А именно, рассматривается постановка задачи с общими функциями стоимости и наличием нежелательных выбросов в маргинальных распределениях, см. Рис. 3.4.

- **Распределение форм $\mathbb{P}_1$.** Первое маргинальное распределение состоит из черно-белых изображений цифр ‘2’ (49% обучающего набора данных), ‘3’ (50%) и ‘7’ (1% - *выбросы*) из данных MNIST.
- **Распределение цветов $\mathbb{P}_2$.** Второе маргинальное распределение состоит из трёх цветов: красного (вероятностная масса $p_0 = 0.495$), зелёного ($p_1 = 0.495$), белого ($p_2 = 0.01$ - *выбросы*).
- **Многообразие.** Мы предварительно обучили генератор StyleGAN [84] $G: \mathcal{Z} \rightarrow \mathbb{R}^{3 \times 32 \times 32}$ на наборе данных цветных MNIST цифр ‘2’ и ‘3’. Пусть E_θ^k — нейросеть, которая кодирует каждый маргинал $\mathbb{P}_k$ в латентное пространство $\mathcal{Z}$. В ходе эксперимента мы переносим $x_k \sim \mathbb{P}_k$ в точку барицентра y_k по правилу $y_k = G \circ E_\theta^k(x_k)$, тем самым ограничивая преобразованные изображения цветными MNIST цифрами ‘2’ и ‘3’.

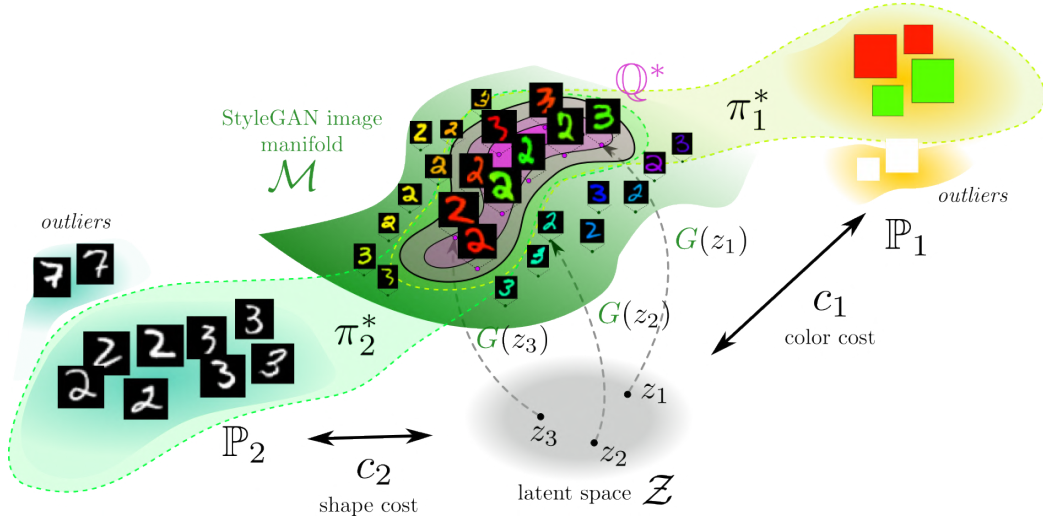


Рис. 3.4 — Полунесбалансированный барицентр распределений форм ($\mathbb{P}_1$) и цветов ($\mathbb{P}_2$), вычисленный нашим методом U-NOTV в латентном пространстве модели StyleGAN, предварительно обученной на цветных изображениях цифр '2', '3' из MNIST. Наш метод позволяет успешно устранять выбросы во входных распределениях.

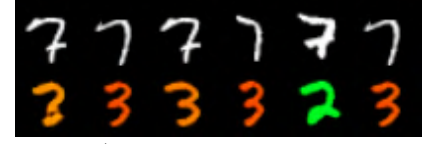
- **Общие стоимости переноса.** Для выборки из первого маргинала $x_1 \sim \mathbb{P}_1$ и соответствующей ей точки барицентра y_1 мы используем следующую *стоимость, сохраняющую форму*: $c_1(x_1, y_1) = \frac{1}{2} \|x_1 - H_g(y_1)\|^2$, где H_g — оператор обесцвечивания. Для выборки из второго маргинала $x_2 \sim \mathbb{P}_2$ и соответствующей точки барицентра y_2 мы используем следующую *стоимость, сохраняющую цвет*: $c_2(x_2, y_2) = \frac{1}{2} \|x_2 - H_c(y_2)\|^2$, где H_c — оператор проекции цвета, определенный в [15].

Результаты нашего метода с параметром $\tau = 10$ представлены на Рис. 3.5, где демонстрируются примеры вычисленного отображения $(x_k, T_k(x_k, s))$ для точек x_k внутри распределения, см. Рис. 3.5а, 3.5в, и для выбросов, см. Рис. 3.5б, 3.5г. Ожидаемо, обученные отображения для точек внутри распределения сохраняют форму ($\mathbb{P}_1 \rightarrow \mathbb{Q}^*$) и цвет ($\mathbb{P}_2 \rightarrow \mathbb{Q}^*$). В свою очередь, отображения для выбросов не имеют разумной интерпретации.

Наряду с качественными результатами мы приводим *доли принятия* входных точек x_k , см. объяснение нашей процедуры получения выборки в §3.4.2. Важно, что доля принятия выбросов намного меньше по сравнению с типичными выборками из распределений. В частности, если x_1 является черно-белой цифрой '7', она будет принята (и обработана отображением T_1) только с вероятностью 0.19, тогда как для черно-белых цифр '2' и '3' тот же показатель равен 0.63. Таким образом, эксперимент демонстрирует

а) Типичные выборки из $\mathbb{P}_1$.

Доля принятия: 63%

б) Выбросы из $\mathbb{P}_1$.

Доля принятия: 19%

в) Типичные выборки из $\mathbb{P}_2$.

Доля принятия: 71.25%

г) Выбросы из $\mathbb{P}_2$.

Доля принятия: 5.5%

Рис. 3.5 — Примеры выборок $x_1 \sim \mathbb{P}_1$ (черно-белые цифры), $x_2 \sim \mathbb{P}_2$ (цветные изображения) и соответствующих им выборок барицентра $y \sim \mathbb{Q}$ (цветные цифры) в эксперименте *форма-цвет*.

применимость нашей методологии устойчивого барицентра к нетривиальным случаям с неевклидовыми стоимостями ОТ.

3.6.4 Сбалансированный ОТ барицентр гауссовских распределений

В этом разделе мы демонстрируем качество нашего метода и базовых подходов в задаче поиска ОТ барицентра для гауссовских распределений с вычислимыми истинными решениями.

В задаче поиска сбалансированного ОТ барицентра для гауссовских распределений известно, что истинный барицентр является гауссовским и может быть оценен с использованием процедуры итерации неподвижной точки [106]. Мы тестируем наш метод в данной сбалансированной постановке, имея в виду, что при больших параметрах несбалансированности τ метод должен давать хорошую аппроксимацию решений задачи поиска сбалансированного ОТ барицентра. **В итоге мы показываем, что, хотя наш метод разработан для решения задачи поиска несбалансированного ОТ барицентра, его качество в другой задаче поиска сбалансированного ОТ барицентра сопоставимо с современными лучшими методами.**

Мы рассматриваем $K = 3$ входных гауссовских распределений с весами $\lambda_1 = \lambda_2 = 0.25$, $\lambda_3 = 0.5$ и квадратичными функциями стоимости ОТ $c_k(x, y) = \frac{\|x_k - y\|^2}{2}$, следуя экспериментальной постановке, впервые введённой

в [14] и также использованной в [15, Appendix B.1]. Мы проводим сравнение с тремя недавними подходами для вычисления непрерывного барицентра — [15, NOTB], [14, EgBary] и [37, WIN]. Для подхода EgBary, который решает задачу поиска энтропийно-регуляризованного ОТ (ЕОТ) барицентра, мы рассматриваем малый параметр энтропийной регуляризации $\varepsilon = 0.01$. Для полноты мы также протестировали качество классического подхода [96, FCWB], который аппроксимирует барицентр дискретным распределением на фиксированном числе точек со свободным носителем.

Для нашего метода U-NOTB мы рассматриваем KL дивергенции и варьируем параметр несбалансированности $\tau \in [1, 10^1, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5]$, ожидая, что при больших τ наш метод даст хорошие результаты при решении сбалансированной задачи. Мы оцениваем качество методов с помощью взвешенной метрики процента необъясненной дисперсии (unexplained variance percentage) $\mathcal{L}_2\text{-UVP}(\hat{T}) = 100 \cdot \left[\frac{\|\hat{T} - T^*\|_{L^2(\mathbb{P})}^2}{\text{var}(\mathbb{Q}^*)} \right] \%$, где $\mathbb{Q}^*$ — заданный истинный ОТ барицентр. Для непрерывных базовых методов (NOTB, EgBary, WIN) мы приводим результаты из [15, Table 3]. В частности, для нашего метода и EgBary, которые обучают оптимальные планы, мы рассматриваем барицентрические проекции данных планов. Для оценки FCWB мы сначала вычисляем дискретный барицентр с использованием большого числа выборок из входных распределений $\mathbb{P}_k$. Затем мы вычисляем оптимальные планы между входными распределениями и данным распределением барицентра [86] и рассматриваем их барицентрические проекции. В Таблице 24 представлена взвешенная сумма значений $\mathcal{L}_2\text{-UVP}$ относительно весов барицентра λ_k .

Метод/Размерность	2	4	8	16	64
Наш ($\tau = 1$)	3.10	2.39	1.64	1.44	1.39
Наш ($\tau = 10^1$)	0.03	0.09	0.06	0.08	0.09
Наш ($\tau = 10^2$)	<u>0.02</u>	<u>0.03</u>	0.03	<u>0.05</u>	0.07
Наш ($\tau = 10^3$)	0.02	0.03	0.04	0.05	0.08
Наш ($\tau = 10^4$)	0.02	0.03	0.04	0.05	0.08
NOTB	0.01	0.02	<u>0.04</u>	0.04	<u>0.08</u>
EgBary	0.02	0.05	0.06	0.09	0.84
WIN	0.03	0.08	0.13	0.25	0.75
FCWB	2.17	6.51	18.68	35.80	100.47

Таблица 24 — $\mathcal{L}_2\text{-UVP}$ для нашего метода, NOTB, EgBary ($\varepsilon = 0.01$), WIN и FCWB, $D = 2, 4, 8, 16, 64$.

Таблица показывает, что при $\tau = 10^2$ наш подход даёт результаты, сопоставимые с лучшим современным методом для вычисления непрерывного **сбалансированного** барицентра — NOTB. Дальнейшее увеличение τ не помогает улучшить результаты, что может объясняться связанными численными неустойчивостями. При этом дискретный метод ОТ барицентра даёт худшие результаты, а метрика $\mathcal{L}_2$ -UVP резко возрастает с увеличением размерности D . Это ожидаемо, поскольку дискретные распределения плохо аппроксимируют непрерывные. Этот аспект ранее был исследован и обоснован в [37, §5.1].

3.6.5 Полунесбалансированный ОТ барицентр гауссовских распределений

В этом разделе демонстрируется качество нашего метода и базовых подходов в задаче поиска полунесбалансированного ОТ барицентра гауссовских распределений с вычислимыми истинными решениями.

Недавняя работа [27] предоставляет итерационную процедуру для вычисления несбалансированного SUOT барицентра для гауссовских распределений с использованием квадратичной стоимости и KL дивергенций. Мы тестируем наш метод с различными параметрами τ в этой постановке и показываем, что он стабильно превосходит современный лучший сбалансированный метод [15, NOTB].

Метод	$\tau = 10^{-2}$	$\tau = 10^{-1}$	$\tau = 1$	$\tau = 10$	$\tau = 10^2$	$\tau = 10^3$	$\tau = 10^4$
Наш	0.31	0.20	0.15	0.17	0.17	0.17	0.17
NOTB	1.71	1.22	0.47	0.21	0.20	0.19	0.19

Таблица 25 — BW₂-UVP между вычисленными и истинными несбалансированными барицентрами для нашего метода и NOTB. Результаты приведены для различных параметров $\tau = 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10, 10^2, 10^3, 10^4$.

Мы рассматриваем тот же набор гауссовских распределений, веса и квадратичную функцию стоимости, что и в эксперименте со сбалансированными гауссовскими распределениями, см. раздел 3.6.4. В качестве базового метода мы рассматриваем современный лучший сбалансированный метод [15, NOTB]. Чтобы вычислить истинный барицентр, мы запускаем алгоритм *Hybrid Bures-Wasserstein Gradient Descent* [27, §4.3] решения задачи поиска SUOT

барицентра гауссовских распределений. Алгоритм разработан для случая KL дивергенций и снабжён параметром несбалансированности, который мы обозначаем как τ .

Мы рассматриваем параметры $\tau \in [10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10, 10^2, 10^3, 10^4]$. Для каждого параметра мы вычисляем соответствующий истинный SUOT барицентр и обучаем наш метод U-NOTB с KL дивергенциями. Затем мы оцениваем качество нашего метода и NOTB, измеряя взвешенную метрику процента необъяснённой дисперсии Буреса-Васерштейна для неявно заданных барицентров $\hat{\mathbb{Q}}$:

$$\text{BW}_2^2\text{-UVP}(\hat{\mathbb{Q}}) \stackrel{\text{def}}{=} 100 \cdot \left[\frac{\text{BW}_2^2(\hat{\mathbb{Q}}, \mathbb{Q}^*)}{\frac{1}{2}\text{var}(\mathbb{Q}^*)} \right] \%$$

где $\text{BW}_2^2(\mathbb{Q}_1, \mathbb{Q}_2) = \mathbb{W}_2^2(\mathcal{N}(\mu_{\mathbb{Q}_1}, \Sigma_{\mathbb{Q}_1}), \mathcal{N}(\mu_{\mathbb{Q}_2}, \Sigma_{\mathbb{Q}_2}))$ — метрика Буреса-Васерштейна, $\mu_{\mathbb{Q}}$, $\Sigma_{\mathbb{Q}}$ обозначают средние и ковариации соответствующего распределения $\mathbb{Q}$, см. [48]. Чтобы получить выборки из вычисленного барицентра $\hat{\mathbb{Q}}$, мы сначала получаем входные точки x_k либо из входных распределений $\mathbb{P}_k$ (для NOTB), либо из левых маргиналов обученных планов (для нашего U-NOTB). Здесь получение выборки из левых маргиналов планов можно выполнить с помощью процедуры метода отбраковки, см. §3.4.2. Затем мы получаем новые точки из вычисленного барицентра, пропуская точки x_k через обученные стохастические или детерминированные отображения T_k , которые параметризуют обученные планы. В Таблице 25 представлена взвешенная сумма значений $\text{BW}_2^2\text{-UVP}$ относительно весов барицентра λ_k .

Мы видим, что наш несбалансированный метод U-NOTB **превосходит** NOTB для **всех** рассматриваемых параметров несбалансированности τ . Разница особенно заметна для малого параметра τ . Это ожидаемо, поскольку при малых τ решения задачи поиска несбалансированного барицентра существенно отличаются от сбалансированного случая. При больших τ это различие становится меньше, поэтому сбалансированному методу NOTB удаётся достаточно хорошо аппроксимировать барицентр, но всё же хуже, чем U-NOTB.

3.6.6 Манипулирование изображениями с помощью интерполяции распределений изображений на многообразии

В этом разделе мы представляем новое применение U-NOTV для манипулирования изображениями высокой размерности. В частности, мы рассматриваем сценарии, характеризующиеся дисбалансом классов в маргинальных распределениях. Данный эксперимент демонстрирует **потенциал разработанного подхода в задаче манипулирования изображениями**: обучение барицентров между различными распределениями изображений позволяет выполнять управляемые переходы между семантическими атрибутами. Более того, модель демонстрирует большую **устойчивость к дисбалансу классов** в этой практической задаче в сравнении с другими базовыми методами.

Для заданных нескольких распределений изображений $\{\mathbb{P}_k\}_{k=1}^K$ мы стремимся одновременно обучить все UOT барицентры $\mathbb{Q}_{\lambda_{1:K}}$ для произвольного кортежа $(\lambda_k)_{k=1}^K$, удовлетворяющего $\sum_{k=1}^K \lambda_k = 1$, $0 \leq \lambda_k \leq 1$. Для этого мы параметризуем транспортные отображения $\{T_k\}_{k=1}^K$ как функции условной переменной $\lambda_{1:K}$, записываемые как $T_k(\lambda_{1:K}, \cdot)$. Заметим, что похожее обуславливание на веса барицентра также используется в Алгоритме 2 из [38].

С помощью обученного условного транспортного плана мы выполняем манипулирование изображениями, преобразуя заданное изображение $x \sim \mathbb{P}_k$ в точку барицентра $y \sim \mathbb{Q}_{\lambda_{1:K}}$. В частности, мы рассматриваем $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$ как наборы изображений юных и пожилых людей, соответственно, из набора данных FFHQ [84]. Важно отметить, что **отношения числа мужчин к числу женщин** в $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$ примерно **равны 1:2 и 3:1**, соответственно. Таким образом, данные по своей природе демонстрируют **дисбаланс классов** между маргиналами. Здесь мы приводим точные экспериментальные настройки:

- **Маргинальные распределения** $\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2$ состоят из изображений FFHQ юных (от 5 до 20 лет) и пожилых (от 50 лет) людей. Для каждого распределения мы случайным образом разделяем соответствующий набор изображений на обучающую и тестовую части в соотношении 90% к 10%.
- **Многообразие StyleGAN**. Пусть $G : \mathcal{W}^+ \rightarrow \mathbb{R}^{3 \times 256 \times 256}$ — предварительно обученный генератор StyleGAN2-ada [114], который отображает пространство $\mathcal{W}^+$ в изображения размером 256×256 . Пусть $E : \mathbb{R}^{3 \times 256 \times 256} \rightarrow \mathcal{W}^+$ — предварительно обученный e4e-кодировщик для

FFHQ [115]. Заметим, что E отображает изображение $x \in \mathbb{R}^{3 \times 256 \times 256}$ в соответствующий вектор $w \in \mathcal{W}^+$, т.е. $G(w) \approx x$. Заметим также, что $\mathcal{W}^+ \subset \mathbb{R}^{18 \times 512}$. Чтобы преобразованные изображения оставались на многообразии FFHQ, мы параметризуем транспортное отображение как: $T_{k,\omega}(x) := G \circ S_{k,\omega} \circ E(x)$, где $x \in \mathbb{R}^{3 \times 256 \times 256}$ и $S_{k,\omega} : \mathbb{R}^{18 \times 512} \rightarrow \mathbb{R}^{18 \times 512}$.

- **Общая стоимость переноса.** Чтобы манипулирование изображениями было осмысленным, мы используем квадратичную функцию стоимости в латентном пространстве $\mathcal{W}^+$, определённую как:

$$c(x, y) = \alpha \|E(y) - E(x)\|^2. \quad (3.53)$$

Здесь мы полагаем $\alpha = 10^{-2}$.

- **Параметризация нейросети.** Пусть $(\lambda_1, \lambda_2) := (1 - t, t)$. Чтобы сгенерировать $\mathbb{Q}_{\lambda_{1:2}}$ из $x \sim \mathbb{P}_k$, мы обуславливаем транспортное отображение $T_{k,\omega}$ на t следующим образом:

$$T_{k,\omega}(t, x) = G(S_{k,\omega}(t, E(x))). \quad (3.54)$$

Мы параметризуем $S_{1,\omega}(t, z) = z + t \text{NN}_{1,\omega}(t, z)$ и $S_{2,\omega}(t, z) = z + (1 - t) \text{NN}_{2,\omega}(t, z)$. Заметим, что $S_{1,\omega}$ и $S_{2,\omega}$ переносят латентный вектор юных и пожилых людей в барицентр, соответственно. Мы выбрали эту эвристическую параметризацию $S_{k,\omega}$, чтобы обеспечить $S_{1,\omega}(t, x) \approx x$ при $t \approx 0$ и $S_{2,\omega}(t, y) \approx y$ при $t \approx 1$. Кроме того, функции потенциалов f_1, f_2 также обуславливаются на переменную t следующим образом:

$$f_{1,\theta}(t, x) = \frac{V_\theta(t, E(x))}{1 - t} + m_\theta(t), \quad f_{2,\theta}(t, x) = -\frac{V_\theta(t, E(x))}{t} + m_\theta(t) \quad (3.55)$$

где $V_\theta : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{18 \times 512} \rightarrow \mathbb{R}$. Заметим, что $(1 - t)f_{1,\theta} + tf_{2,\theta} = m_\theta(t)$. Здесь $m_\theta(t)$ можно рассматривать как параметризацию константы конгруэнтности в момент времени t . Чтобы избежать численной нестабильности в (3.55) при t , близких к 0 или 1, мы получаем выборки t из равномерного распределения на интервале $[0.05, 0.95]$.

Результаты. Как обсуждалось, маргиналы $\mathbb{P}_1, \mathbb{P}_2$ демонстрируют дисбаланс классов относительно пола: $\mathbb{P}_1$ содержит более 60% женщин, тогда как $\mathbb{P}_2$ состоит менее чем из 30% женщин. Мы оцениваем количественно качество нашего транспортного отображения, измеряя, насколько хорошо оно сохраняет пол в таком случае дисбаланса классов. В частности, мы измеряем точность

сохранения пола при преобразовании юного человека x в барицентр $T_1(t, x)$ при $t=0.9$. Для нашей модели мы приводим точность сохранения пола для принятых изображений. Для сравнения мы включаем результаты метода NOTB на всем тестовом наборе данных. Для базовой модели мы предварительно вычисляем глобальное латентное направление $v_{global} := \mathbb{E}_{y \sim \mathbb{P}_2}[E(y)] - \mathbb{E}_{x \sim \mathbb{P}_1}[E(x)]$ и измеряем точность согласования пола между $x \sim \mathbb{P}_1$ и $x + tv_{global}$.

Как показано в Таблице 26, наша модель достигает высокой точности 88%, существенно превосходя другие методы, имеющие точность менее 70%. Это демонстрирует, что наша модель работает устойчиво в условиях дисбаланса классов. Более того, только 36.1% принятых выборок были изображениями женщин. Учитывая, что более 60% данных в $\mathbb{P}_1$ составляли выборки женщин, это показывает, что значительная доля выборок женщин была отклонена для работы с дисбалансом классов. Качественные примеры приведены на Рис. 3.6, 3.7.

Метод	Баз. метод	NOTB	U-NOTB
Доля принятия	-	-	67.9% (592 / 872)
Точность	69.8% (609 / 872)	63.4% (553 / 872)	88.0% (521 / 592)

Таблица 26 — Точность сохранения пола для $x \sim \mathbb{P}_1$ и $T_1(t, x)$ при $t=0.9$. U-NOTB позволяет использовать метод отбраковки для работы с дисбалансом классов.

Метрика оценки. Чтобы классифицировать пол изображений, мы используем открытую python библиотеку OpenCV. В частности, мы адаптировали код из следующего github репозитория:

<https://github.com/smahesh29/Gender-and-Age-Detection>

3.7 Детали экспериментов

В этом разделе мы приводим дополнительные детали экспериментов.

3.7.1 Описание экспериментов на модельных данных

Наборы данных Moon, Spiral и 8-Gaussian. Наборы данных, использованные в разделе 3.6.1, были реализованы по аналогии с [87].

Наборы данных для эксперимента с дисбалансом классов. Распределения $\mathbb{P}_1$, $\mathbb{P}_2$ задаются как смеси гауссовских распределений $\frac{3}{4}\mathcal{N}((-5, 4), 0.4^2) + \frac{1}{4}\mathcal{N}((-5, -4), 0.4^2)$ и $\frac{1}{4}\mathcal{N}((5, 4), 0.4^2) + \frac{3}{4}\mathcal{N}((5, -4), 0.4^2)$, соответственно.

а) Принятые выборки из $\mathbb{P}_1$.

б) Соотв. выборки из барицентра.

Рис. 3.6 — Примеры случайно выбранных (а) принятых выборок $x \sim \mathbb{P}_1$ и (б) соответствующих им выборок из барицентра при $t = 0.9$. Заметим, что доля принятия U-NOTV составляет 67.9%. Приблизительно 36% принятых выборок являются изображениями женщин.



Рис. 3.7 — Примеры отклонённых методом U-NOTV выборок. Приблизительно 80% отклонённых выборок являются изображениями женщин.

Наборы данных для эксперимента с выбросами. Мы рассматриваем три маргинальных распределения, обозначаемые как $\mathbb{P}_1$, $\mathbb{P}_2$ и $\mathbb{P}_3$. Для $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$ мы генерируем наборы данных, состоящие на 95% из типичных данных и на

5% из выбросов; $\mathbb{P}_3$ состоит только из типичных данных. Типичные данные для каждого маргинала следуют модели смеси гауссовских распределений с четырьмя модами и равномерными весами: $\sum_{k=1}^4 \frac{1}{4} \mathcal{N}(m_k, \sigma^2 I)$. Средние и дисперсии для $\mathbb{P}_1$, $\mathbb{P}_2$ и $\mathbb{P}_3$ определены следующим образом:

- $\mathbb{P}_1$: $m_1 = (-5, -1)$, $m_2 = (5, 1)$, $m_3 = (1, -5)$, $m_4 = (-1, 5)$, с $\sigma = 0.1$,
- $\mathbb{P}_2$: $m_1 = (-5, 1)$, $m_2 = (5, -1)$, $m_3 = (1, 5)$, $m_4 = (-1, -5)$, с $\sigma = 0.1$,
- $\mathbb{P}_3$: $m_1 = (-5, 0)$, $m_2 = (5, 0)$, $m_3 = (0, 5)$, $m_4 = (0, -5)$, с $\sigma = 0.1$.

Для выбросов в распределениях $\mathbb{P}_1$ и $\mathbb{P}_2$ мы снова используем модель смеси гауссовских распределений с четырьмя модами, $\sum_{k=1}^4 \frac{1}{4} \mathcal{N}(m_k, \sigma^2 I)$, со средними и дисперсиями, определёнными как:

- выбросы в $\mathbb{P}_1$: $m_1 = (10, 2)$, $m_2 = (10, 1)$, $m_3 = (10, 0)$, $m_4 = (10, -1)$, с $\sigma = 0.02$,
- выбросы в $\mathbb{P}_2$: $m_1 = (-10, 1)$, $m_2 = (-10, 0)$, $m_3 = (10, -1)$, $m_4 = (10, -2)$, с $\sigma = 0.02$.

Детали реализации. Для экспериментов из раздела 3.6.1 и экспериментов с дисбалансом классов мы используем число итераций, равное 10К. Для экспериментов с выбросами из раздела 3.6.2 мы используем 20К итераций. Мы используем размер выборок 1024 и обновляем m с помощью оптимизатора Adam [85] со скоростью обучения 10^{-3} и $(\beta_1, \beta_2) = (0, 0.9)$. Для остальных гиперпараметров мы следуем экспериментальным настройкам из [15].

Метрика оценки. Как обсуждалось в разделе 3.6.1, мы используем метрики $\mathbb{W}_2$ и $\mathcal{L}_2$, определённые как $\mathbb{W}_2^2(T_{1\#}\mathbb{P}_1, \mathbb{Q}^*)$ и $\|T_1 - T_1^*\|_{L^2(\mathbb{P}_1)}^2$, соответственно. Здесь $\mathbb{Q}^*$ и T_1^* обозначают истинные барицентр и транспортное отображение. Чтобы аппроксимировать $(T_1^*, \mathbb{Q}^*)$, мы решаем дискретную задачу поиска несбалансированного барицентра. А именно, мы используем выборку из 2000 точек и решаем задачу несбалансированного оптимального транспорта из $\mathbb{P}_1$ в $\mathbb{P}_2$ с помощью библиотеки Python Optimal Transport (POT) [86]. Полученное дискретное UOT отображение T_{uot}^* затем используется для определения $T_1^* = \lambda_1 \text{Id} + \lambda_2 T_{uot}^*$ и $\mathbb{Q}^* = T_{1\#}^* \mathbb{P}_1$. Используя эти дискретные выборки и транспортные отображения, мы вычисляем аппроксимацию метрик.

Время обучения/получения выборки. Время обучения и получения выборки для нашей модели, а также сравнение с базовыми методами представлены в Таблицах 27, 28. В экспериментах на модельных данных время обучения U-NOTB сопоставимо со временем обучения NOTB [15]. Время получения выборки для U-NOTB обычно в 2-10 раз больше, чем для

NOTB. Этот разрыв обусловлен дополнительной вычислительной сложностью, вносимой методом отбраковки, который требует вычисления c -преобразования функции потенциала $\hat{f}_k$: $\hat{f}_k^c(x) \approx c(x, \hat{T}_k(x)) - \hat{f}(\hat{T}_k(x))$. Этот процесс включает прямой проход через обученную функцию потенциала и требует вычисления функционала стоимости, что создает дополнительную вычислительную нагрузку для экспериментов со StyleGAN. Однако, необходимо подчеркнуть, что благодаря предложенному нами методу получения выборки наш метод U-NOTB приобретает устойчивость к выбросам и дисбалансу классов.

Эксперимент	2D модельные данные (§3.6.1)	Дисбаланс классов (§3.6.2)	Выбросы (§3.6.2)	Форма-цвет (§3.6.3)
UOTM	4–5 мин	-	-	-
UOT на подвыбор.	2 ч	-	-	-
NOTB	6–7 мин	6–7 мин	42–45 мин	-
U-NOTB	6–7 мин	6–7 мин	42–45 мин	3 ч 20 мин
GPU	RTX 2080Ti	RTX 2080Ti	RTX 2080Ti	RTX 3090Ti

Таблица 27 — Время обучения для различных экспериментов.

Эксперимент	2D модельные данные (§3.6.1)	Дисбаланс классов (§3.6.2)	Выбросы (§3.6.2)	Форма-цвет (§3.6.3)
UOTM	0.001 с	-	-	-
UOT на подвыбор.	0.001 с	-	-	-
NOTB	0.001 с	0.001 с	0.001 с	0.02 с
U-NOTB	0.001 с	0.003 с	0.003 с	0.18 с
GPU	RTX 2080Ti	RTX 2080Ti	RTX 2080Ti	RTX 3090Ti

Таблица 28 — Время получения выборки в различных экспериментах. Для экспериментов на модельных данных (§3.6.1, §3.6.2) мы проводили оценку для выборки из 1000 точек. Для эксперимента со StyleGAN (§3.6.3) — из 220 точек.

3.7.2 Эксперименты со StyleGAN

Если не указано иное, мы следуем реализации из [15]. Заметим, что мы используем оптимизаторы Adam с $(\beta_1, \beta_2) = (0, 0.9)$. Точные гиперпараметры для всех экспериментов описаны в Таблице 29.

Эксперимент	2D модельные данные (§3.6.1)	Дисбаланс классов (§3.6.2)	Выбросы (§3.6.2)	Форма-цвет (§3.6.3)
D	2	2	2	512
K	2	2	3	2
τ	5	1,20,200	1,20,200	10
размер выборок	1024	256	256	64
Эпохи	10K	10K	20K	3K
N_T	3	3	5	10
λ_1	1/2	1/2	1/3	1/2
λ_2	1/2	1/2	1/3	1/2
λ_3	-	-	1/3	-
Дивергенция ψ_1	<i>balanced</i>	<i>KL</i>	<i>KL</i>	<i>Softplus</i>
Дивергенция ψ_2	<i>KL</i>	<i>KL</i>	<i>KL</i>	<i>Softplus</i>
Дивергенция ψ_3	-	-	KL	-
$f_{k,\theta}$	<i>MLP</i>	<i>MLP</i>	<i>MLP</i>	<i>ResNet</i>
$T_{k,\omega}$	<i>MLP</i>	<i>MLP</i>	<i>MLP</i>	<i>ResNet</i>
$lr_{f_{k,\theta}}$	$1e-3$	$1e-3$	$1e-3$	$1e-4$
$lr_{T_{k,\omega}}$	$1e-3$	$1e-3$	$1e-3$	$1e-7$
lr_m	$1e-3$	$1e-3$	$1e-3$	$1e-2$

Таблица 29 — Настройки гиперпараметров Алгоритма 1 в разных экспериментах.

3.7.3 Эксперименты с интерполяцией распределений изображений на многообразии изображений

Мы полагаем $(\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_2) = (\text{Softplus}, \text{Softplus})$ и $\tau = 0.1$. Мы используем скорость обучения 10^{-5} , размер выборок 4 и общее число итераций 5K. Для всех нейросетей $\text{NN}_{1,\omega}, \text{NN}_{2,\omega}, V_\theta$ мы используем один и тот же подход к обуславливанию на время: переменная времени t кодируется в 512-мерный вектор $t_{emb} \in \mathbb{R}^{1 \times 512}$ с помощью синусоидального встраивания и объединяется с $z \in \mathbb{R}^{18 \times 512}$. Для $\text{NN}_{1,\omega}, \text{NN}_{2,\omega}$ полученное представление обрабатывается двумя transformer-слоями, каждый с четырьмя головами внимания. Затем оно пропускается через линейный слой с 512 входными и 512 выходными каналами, что даёт выход размера $\mathbb{R}^{18 \times 512}$. Для потенциала V_θ используется похожая архитектура, но с четырьмя transformer-слоями, каждый из которых имеет четыре головы внимания. После этого признаки агрегируются усреднением по токенам и подаются на финальный линейный слой. Для сети $m_\theta(t)$ переменная

времени t также кодируется с помощью синусоидального встраивания, после чего полученное представление пропускается через 2-слойный MLP. Сводка настроек гиперпараметров и время обучения приведены в Таблице 30.

D	K	τ	Размер выборки	#Итер.	N_T	λ_1, λ_2	$\overline{\psi}_1, \overline{\psi}_2$	$f_{k,\theta}, T_{k,\omega}$	$lr_{f_{k,\theta}},$ $lr_{T_{k,\omega}},$ lr_m	Время обучения	GPU
512×18	2	0.1	4	5000	1	1/2	Softplus	Transformer	1e-5	4–5 ч	RTX 3090Ti

Таблица 30 — Гиперпараметры и время обучения для эксперимента с FFHQ.

3.8 Обсуждение

Эта работа продолжает недавнее и плодотворное направление исследований ОТ барицентров. В ней представлен *первый* алгоритм построения *устойчивых* непрерывных барицентров на основе несбалансированного ОТ. Теперь у исследователей барицентров есть новый инструмент глубокого обучения, который позволяет работать с несовершенными данными (с выбросами/шумом/дисбалансом классов) в большом масштабе.

Воспроизводимость. Для прозрачности и воспроизводимости исходный код находится в открытом доступе по адресу <https://github.com/milenagazdieva/U-NOTBarycenters>. Код содержит файл README с дальнейшими инструкциями для воспроизведения наших экспериментов.

Ограничения и будущие направления исследований. На практике мы обнаружили, что практическая процедура оптимизации (Алгоритм 1) может работать нестабильно. В частности, обучение может расходиться при неправильном подборе гиперпараметров, или итоговое качество может зависеть от случайного начального значения. Мы предполагаем, что такое поведение обусловлено опорой на состязательное обучение, и оставляем его тщательное исследование для будущих работ. С теоретической стороны, не гарантируется единственность восстановленного полунесбалансированного ОТ барицентра (§3.2.2). Устранение этих ограничений открывает путь для будущих работ. Ещё одним привлекательным направлением будущих исследований является адаптация альтернативных устойчивых вариантов ОТ/барицентра, например [116; 117], к непрерывной схеме поиска барицентра.

Глава 4. Метод вычисления (полу)частичных оптимальных транспортных отображений

Во многих задачах *непарного* перевода домена, таких как перенос стиля изображений или суперразрешение, важно, чтобы результат перевода оставался похожим на соответствующий входной объект. Хотя в последние годы непрерывные методы оптимального транспорта (ОТ) привлекают всё больше внимания, стало очевидно, что методы, основанные на классической формулировке ОТ, могут плохо сохранять семантическое содержание входных объектов. Эта трудность часто связана с тем, что целевая мера содержит выбросы, шум и нерелевантные классы, к которым классический ОТ особенно чувствителен. Мы решаем эту проблему, рассматривая задачу *неполного транспорта*, частного случая формулировки получастичного ОТ, который смягчает указанные выше трудности за счёт ослабления ограничений на целевой маргинал. В главе предлагается первый масштабируемый алгоритм для вычисления неполных ОТ отображений между непрерывными распределениями. Алгоритм подкреплён теоретическими гарантиями и экспериментами, подтверждающими его способность сохранять ключевые характеристики входных данных при переводе в несовершенный целевой домен.

Основные результаты главы изложены в работе [A5]. Автором диссертации разработаны подход и алгоритм для вычисления получастичных транспортных отображений, доказаны все теоретические результаты главы, выполнены предварительная реализация и тестирование метода при различных параметрах. Адаптация подхода для сравнения с альтернативными методами в §4.5.5 выполнена соавтором работы [A5].

4.1 Введение

Задача **непарного** перевода домена [118, Fig. 2] состоит в нахождении отображения $x \mapsto T(x)$, обычно нейросети, которое переносит выборки x из заданного исходного домена в целевой домен. Ключевая трудность здесь состоит в том, что **соответствие** между доступными выборками данных x из исходного домена и y из целевого домена **не задано**. Таким образом, задача неоднозначна, поскольку может существовать несколько подходящих T .

При решении этой задачи многие методы регуляризуют преобразованные объекты $T(x)$ так, чтобы они наследовали определённые атрибуты соответствующих входных объектов x . В популярных задачах непарного перевода домена [118, Fig. 9] и сверхразрешения [119, Equation 3] изображений обычно используют дополнительные *неконтролируемые* (*unsupervised*) функции потерь идентичности, например $\|T(x) - x\|_1$, чтобы сделать результат перевода $T(x)$ похожим на входные изображения x . То же самое применимо, например, к переводу аудио [120]. Поэтому целевые функции обучения таких методов обычно имеют две компоненты. Первая компонента — это **доменная функция потерь** (основная), заставляющая преобразованные объекты $T(x)$ выглядеть как объекты y из целевого домена. Вторая компонента — это **функция потерь для сохранения сходства** (*similarity loss*), которая является регуляризацией (*опциональной*), стимулирующей преобразованные объекты $T(x)$ наследовать определённые атрибуты входных объектов x . Возникает вопрос: можем ли мы формально **контролировать** степень сходства между выходом $T(x)$ и входом x , при этом обеспечивая, что $T(x)$ всё ещё принадлежит целевому распределению? Хотя настройка веса функции потерь для сохранения сходства является распространённой стратегией, обычно ей не хватает принципиального теоретического обоснования, и она может работать лишь в ограниченной степени. Мы демонстрируем это в §4.5.5.

В этой главе мы решаем указанную выше трудность, рассматривая задачу *неполного оптимального транспорта* (incomplete transport, IT) — частный случай формулировки (полу)частичного ОТ, в котором исходное распределение отображается только в *контролируемую часть* целевого распределения.

Основные результаты главы. В этой главе разработан первый масштабируемый алгоритм для вычисления решений специальной задачи частичного оптимального транспорта, которую мы называем *неполным транспортом*, между непрерывными распределениями (IT, §4.3.1). Для IT мы выводим формулу двойственности, дающую эффективный вычислительный алгоритм (§4.3.2). Мы тестируем наш алгоритм на модельных 2D примерах и задаче непарного перевода домена высокоразмерных изображений (§4.5).

Обозначения. Мы рассматриваем *компактные* польские пространства $(\mathcal{X}, \|\cdot\|_{\mathcal{X}})$, $(\mathcal{Y}, \|\cdot\|_{\mathcal{Y}})$ и используем $\mathcal{P}(\mathcal{X}), \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ для обозначения множеств радоновских вероятностных мер на них. Мы используем $\mathcal{M}_+(\mathcal{X}) \subset \mathcal{M}(\mathcal{X})$ для обозначения множеств конечных неотрицательных и знакопеременных

(радоновских) мер на $\mathcal{X}$, соответственно. Оба множества содержат $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ как подмножество. Для неотрицательной меры $\mu \in \mathcal{M}_+(\mathcal{X})$ её носитель обозначается через $\text{Supp}(\mu) \subset \mathcal{X}$. Он является замкнутым множеством, состоящим из всех точек $x \in \mathcal{X}$, для которых каждая открытая окрестность $A \ni x$ удовлетворяет $\mu(A) > 0$. Мы используем $\mathcal{C}(\mathcal{X})$ для обозначения множества непрерывных функций $\mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$, снабжённого нормой $\|\cdot\|_\infty$. Его двойственное пространство — $\mathcal{M}(\mathcal{X})$, снабжённое нормой $\|\cdot\|_1$. Последовательность $\mu_1, \mu_2, \dots \in \mathcal{M}(\mathcal{X})$ называется слабо-* сходящейся к $\mu^* \in \mathcal{M}(\mathcal{X})$, если для каждого $f \in \mathcal{C}(\mathcal{X})$ выполняется $\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{X}} f(x) d\mu_n(x) = \int_{\mathcal{X}} f(x) d\mu^*(x)$. Для вероятностной меры $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ мы используем $\pi_x \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ и $\pi_y \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ для обозначения её проекций на $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$, соответственно. Дезинтеграция π даёт $d\pi(x, y) = d\pi_x(x) d\pi(y|x)$, где $\pi(y|x)$ обозначает условное распределение $y \in \mathcal{Y}$ для заданного $x \in \mathcal{X}$. Для $\mu, \nu \in \mathcal{M}(\mathcal{Y})$ мы пишем $\mu \leq \nu$, если для всех измеримых $A \subset \mathcal{Y}$ выполняется $\mu(A) \leq \nu(A)$. Для измеримого отображения $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ мы используем $T_\#$ для обозначения соответствующего оператора переноса меры (push-forward) $\mathcal{P}(\mathcal{X}) \rightarrow \mathcal{P}(\mathcal{Y})$.

4.2 Предварительные сведения об оптимальном транспорте

В этом разделе мы напомним основные понятия теории ОТ и введём формулировку задачи частичного ОТ. Для прочих деталей о классическом ОТ мы отсылаем к [8; 29; 88], о частичном ОТ — к [17; 121].

Стандартная формулировка ОТ. Пусть $c : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывная функция стоимости. Для $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$ стоимость ОТ между ними:

$$\text{Cost}(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{T_\# \mathbb{P} = \mathbb{Q}} \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mathbb{P}(x), \quad (4.1)$$

где $\inf$ берётся по измеримым $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, переносящим $\mathbb{P}$ в $\mathbb{Q}$ (транспортным отображениям), см. Рис. 4.1а. Задача (4.1) называется *задачей ОТ Монжа*, а её минимизатор T^* называется *ОТ отображением*.

В некоторых случаях минимизатор T^* задачи (4.1) может не существовать. Поэтому обычно рассматривают *релаксацию Канторовича*:

$$\text{Cost}(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\pi \in \Pi(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y), \quad (4.2)$$

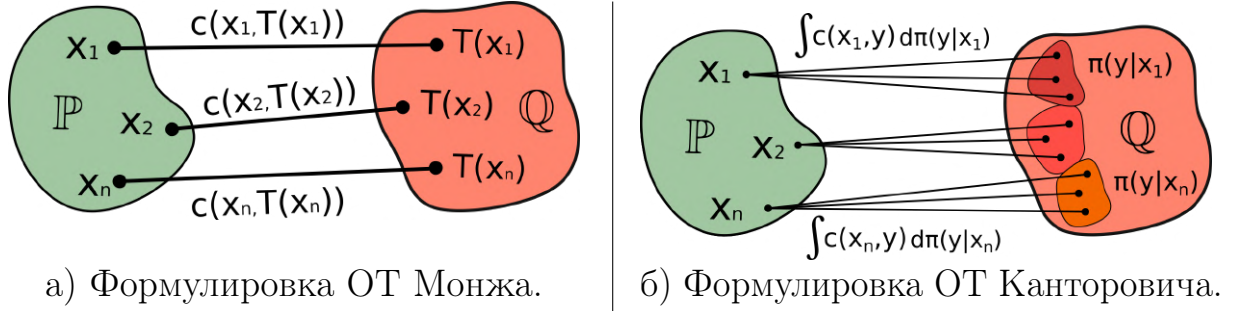


Рис. 4.1 — Классические формулировки оптимального транспорта (ОТ).

где $\inf$ берётся по $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, удовлетворяющим $\pi_x = \mathbb{P}$ и $\pi_y = \mathbb{Q}$, соответственно. Минимизатор $\pi^* \in \Pi(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ в (4.2) всегда существует и называется *ОТ планом*. Широко используемым примером стоимости ОТ для $\mathcal{X} = \mathcal{Y} = \mathbb{R}^d$ является расстояние Васерштейна-1 (W_1), т.е. стоимость ОТ (4.2) при $c(x, y) = \|x - y\|$.

Чтобы пояснить смысл (4.2), мы дезинтегрируем $d\pi(x, y) = d\pi_x(x)d\pi(y|x)$:

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X}} \left\{ \int_{\mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(y|x) \right\} \underbrace{d\mathbb{P}(x)}_{=d\pi_x(x)}. \quad (4.3)$$

Отсюда (4.2) можно рассматривать как расширение (4.1), позволяющее *разделять* массу входных точек $x \sim \mathbb{P}$ (Рис. 4.1б). При мягких предположениях о мерах $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$ значение стоимости ОТ (4.2) совпадает с (4.1), см. [88, Теорема 1.33].

Формулировка частичного ОТ. Пусть $w_0, w_1 \geq m \geq 0$. Рассмотрим

$$\inf_{\substack{m\pi_x \leq w_0\mathbb{P} \\ m\pi_y \leq w_1\mathbb{Q}}} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d[m\pi](x, y), \quad (4.4)$$

где $\inf$ берётся по $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, удовлетворяющим ограничениям в виде неравенств $m\pi_x \leq w_0\mathbb{P}$ и $m\pi_y \leq w_1\mathbb{Q}$. Минимизаторы π^* задачи (4.4) называются *частичными ОТ планами* (Рис. 4.2).

Здесь входами являются две меры $w_0\mathbb{P}$ и $w_1\mathbb{Q}$ с массами w_0 и w_1 . Интуитивно, нам нужно сопоставить $\frac{m}{w_0}$ -ю долю $m\pi_x$ первой меры $w_0\mathbb{P}$ с $\frac{m}{w_1}$ -й долей $m\pi_y$ второй меры $w_1\mathbb{Q}$ (Рис. 4.2); выбор π_x, π_y также является частью этой задачи. Ключевое отличие от задачи (4.2) состоит в том, что ограничения являются *неравенствами*. В

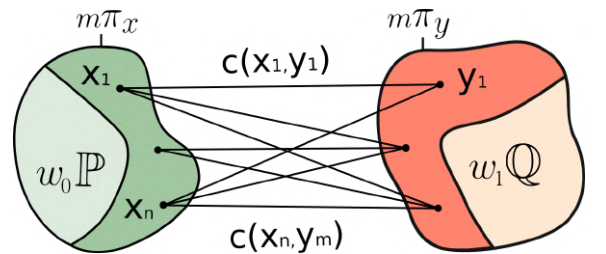


Рис. 4.2 — Формулировка частичного оптимального транспорта.

частном случае $m = w_0 = w_1$ задача (4.4) сводится к (4.2), поскольку ограничения в виде неравенств можно заменить равенствами.

4.3 Основные результаты главы

В этом разделе мы даём определение задачи неполного транспорта (IT) (§4.3.1). Затем мы предлагаем алгоритм для решения задачи IT (§4.3.2). Доказательства всех теорем приведены в §4.10.

4.3.1 Задача неполного транспорта

Популярные методы непарного перевода, например [118, §3.1] и [122, §3], де-факто предполагают, что доступные выборки x, y из входного и выходного доменов получены из распределений данных $\mathbb{P}, \mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{X}), \mathcal{P}(\mathcal{Y})$. В результате в их целевых функциях оптимизации *доменная функция потерь* сравнивает результат перевода $T(x) \sim T\#\mathbb{P}$ и целевые выборки $y \sim \mathbb{Q}$, используя метрику для сравнения *вероятностных мер*, например GAN loss [123]. Таким образом, целевой *домен* отождествляется с вероятностной мерой $\mathbb{Q}$.

Мы выбираем другой подход к определению того, что такое *домен*. Мы по-прежнему предполагаем, что доступные данные получены из распределений данных, т.е. $x \sim \mathbb{P}$, $y \sim \mathbb{Q}$. Однако мы говорим, что целевой домен — это часть $\mathcal{Y}$, где сосредоточена вероятностная масса $\mathbb{Q}^1$, а именно $\text{Supp}(\mathbb{Q}) \subset \mathcal{Y}$. Мы говорим, что отображение T переводит домены, если $\text{Supp}(T\#\mathbb{P}) \subset \text{Supp}(\mathbb{Q})$. Это требование слабее обычного $T\#\mathbb{P} = \mathbb{Q}$. Предположим, что $c(x, y)$ — функция, оценивающая различие между x и y . Мы хотели бы выбрать транспортное отображение T такое, что $T(x) \in \text{Supp}(\mathbb{Q})$, а выход $T(x)$ является *контролируемо похожим* на вход x относительно функции различия $c(x, y)$. Это достигается рассмотрением частного случая формулировки (полу)частичного ОТ, которая ослабляет ограничение $T\#\mathbb{P} = \mathbb{Q}$ и допускает перенос исходного распределения в часть целевого. Ниже мы формализуем эту постановку.

Мы рассматриваем следующую задачу с конечным параметром $w \geq 1$:

$$\text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{T\#\mathbb{P} \leq w\mathbb{Q}} \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mathbb{P}(x) \quad (4.5)$$

¹Согласно стандартной гипотезе о многообразии [124], реальное распределение данных $\mathbb{Q}$ обычно имеет носитель на малоразмерном многообразии $M = \text{Supp}(\mathbb{Q}) \subset [-1, 1]^D$, занимающем **крошечную** часть объемлющего пространства $[-1, 1]^D$.

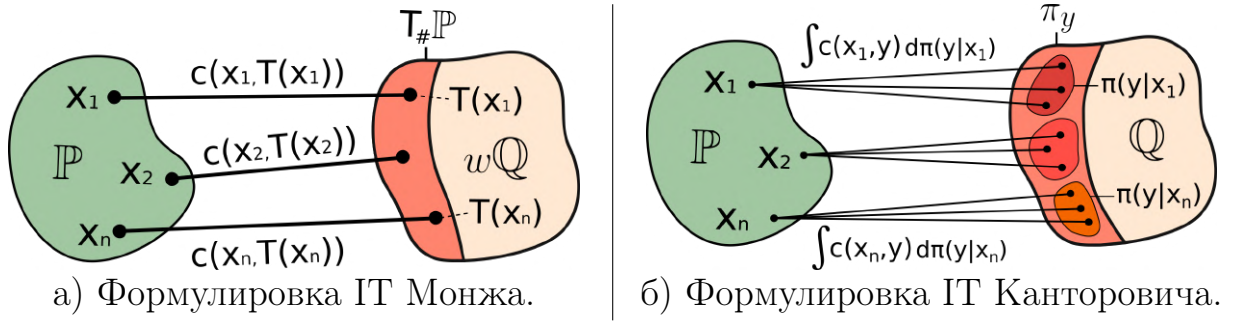


Рис. 4.3 — Формулировки неполного транспорта (ИТ).

и называем (4.5) *задачей неполного транспорта* (ИТ) Монжа (Рис. 4.3а). С увеличением w допустимые отображения T получают больше возможностей перераспределять массу $\mathbb{P}$ по $\text{Supp}(\mathbb{Q})$. Неформально, при $w \rightarrow \infty$ отображения неполного транспорта сохраняют содержание входа наилучшим возможным образом, оставаясь внутри целевого домена.

Как и в (4.1), задача (4.5) может не иметь минимизатора T^* или даже может иметь пустое *допустимое* множество. Поэтому естественно рассмотреть ослабление задачи (4.5) по Канторовичу:

$$\text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y), \quad (4.6)$$

где $\inf$ берётся по множеству $\Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ вероятностных мер $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, у которых первый маргинал $\pi_x = \mathbb{P}$, а второй удовлетворяет $\pi_y \leq w\mathbb{Q}$ (Рис. 4.3б).

Заметим, что задача ИТ (4.6) является частным случаем частичного ОТ (4.4) при $w_0 = t = 1$ и $w_1 = w$. В (4.6) на самом деле можно заменить $\inf$ на $\min$, см. утверждение ниже.

Предложение 4.3.1 (Существование ИТ планов). *Задача (4.6) имеет по крайней мере один минимизатор $\pi^* \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$.*

Мы говорим, что минимизаторы (4.6) являются *ИТ планами*. В общем случае *ИТ стоимость* Канторовича (4.6) всегда даёт нижнюю оценку для соответствующей задачи Монжа (4.5). Ниже мы показываем, что они совпадают в наиболее практически интересном евклидовом случае.

Предложение 4.3.2 (Эквивалентность ИТ стоимостей Монжа и Канторовича). *Пусть $\mathcal{X}, \mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^D$ — компактные множества, $\mathbb{P} \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ — безатомная мера, $\mathbb{Q} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y})$. Тогда ИТ стоимости Монжа (4.5) и Канторовича (4.6) совпадают.*

Однако не гарантируется, что $\inf$ в задаче Монжа (4.5) достигается даже в евклидовом случае. Тем не менее для общих польских пространств $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$

ясно, что если в задаче Канторовича (4.6) существует детерминированный ИТ план вида $\pi^* = [\text{id}_{\mathcal{X}}, T^*] \# \mathbb{P}$, то T^* является ИТ отображением в (4.5), а ИТ стоимости Монжа (4.5) и Канторовича (4.6) совпадают. Далее, для простоты, мы предполагаем, что $\mathcal{X}, \mathcal{Y}, c, \mathbb{P}, \mathbb{Q}$ таковы, что (4.5) и (4.6) совпадают, например, удовлетворяют требованиям предложения 4.3.2.

Задачу ИТ (4.6) можно рассматривать как обобщение задачи ОТ (4.2). Действительно, при $w = 1$ ограничение $\pi_y \leq \mathbb{Q}$ эквивалентно $\pi_y = \mathbb{Q}$, поскольку существует только одна *вероятностная* мера, которая $\leq \mathbb{Q}$, и это сама $\mathbb{Q}$. Таким образом, ИТ (4.6) при $w = 1$ совпадает с ОТ (4.2).

4.3.2 Вычислительный алгоритм для неполного транспорта

Ниже мы разрабатываем нейросетевой алгоритм для вычисления ИТ планов. Для начала мы выводим двойственную задачу для ИТ (4.6).

Теорема 4.3.3 (Двойственная задача для ИТ). *Выполняется*

$$\text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \max_{f \leq 0} \int_{\mathcal{X}} f^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y), \quad (4.7)$$

где $\max$ берётся по неположительным $f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$, а $f^c(x) \stackrel{\text{def}}{=} \min_{y \in \mathcal{Y}} \{c(x, y) - f(y)\}$.

Мы называем функцию f *потенциалом*. В определении f^c минимум достигается, поскольку c, f непрерывны, а $\mathcal{Y}$ компактно. Функция f^c называется c -преобразованием f .

Отличие формулы (4.7) от обычных формул двойственности для ОТ (4.2), основанных на c -преобразовании, см. [88, §1.2], [29, §5], состоит в том, что требуется, чтобы f была неположительной, а второй член умножается на $w \geq 1$. Перепишем член $\int_{\mathcal{X}} f^c(x) d\mathbb{P}(x)$ в (4.7):

$$\int_{\mathcal{X}} f^c(x) d\mathbb{P}(x) = \int_{\mathcal{X}} \min_{y \in \mathcal{Y}} \{c(x, y) - f(y)\} d\mathbb{P}(x) = \inf_{T: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} \int_{\mathcal{X}} \{c(x, T(x)) - f(T(x))\} d\mathbb{P}(x). \quad (4.8)$$

Здесь мы используем перестановку интеграла и $\inf$ [125, Теорема 3А]; в (4.8) $\inf$ берётся по измеримым отображениям. Поскольку $(x, y) \mapsto c(x, y) - f(y)$ является непрерывной функцией на компактном множестве, существует измеримая

Алгоритм 2: Процедура вычисления ИТ отображения между $\mathbb{P}$ и $\mathbb{Q}$ для стоимости переноса $c(x, y)$ и веса w .

Input : распределения $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$, доступные по выборкам; отображение $T_\theta: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$; потенциал $f_\psi: \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}_-$; стоимость переноса $c: \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$; вес $w \geq 1$; число K_T внутренних итераций;

Output : аппроксимация ИТ отображения $(T_\theta)_\# \mathbb{P} \leq w \mathbb{Q}$;

повторять

Получить выборки $X \sim \mathbb{P}$, $Y \sim \mathbb{Q}$;

$\mathcal{L}_f \leftarrow w \cdot \frac{1}{|Y|} \sum_{y \in Y} f_\psi(y) - \frac{1}{|X|} \sum_{x \in X} f_\psi(T_\theta(x))$;

Обновить ψ , используя $\frac{\partial \mathcal{L}_f}{\partial \psi}$, чтобы максимизировать $\mathcal{L}_f$;

для $k_T = 1, 2, \dots, K_T$ **выполнять**

Получить выборку $X \sim \mathbb{P}$;

$\mathcal{L}_T \leftarrow \frac{1}{|X|} \sum_{x \in X} [c(x, T_\theta(x)) - f_\psi(T_\theta(x))]$;

Обновить θ , используя $\frac{\partial \mathcal{L}_T}{\partial \theta}$, чтобы минимизировать $\mathcal{L}_T$;

конец

пока не сошлось;

селекция $T(x) \in \arg \min_{y \in \mathcal{Y}} \{c(x, y) - f(y)\}$, минимизирующая (4.8), см. [126, Теорема 18.19]. Таким образом, $\inf$ можно заменить на $\min$. Объединяя (4.8) и (4.7), получаем эквивалентную задачу поиска седловой точки:

$$\text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \max_{f \leq 0} \min_{T: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} \mathcal{L}(f, T), \quad (4.9)$$

где функционал $\mathcal{L}(f, T)$ определён как

$$\mathcal{L}(f, T) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mathbb{P}(x) - \int_{\mathcal{X}} f(T(x)) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y). \quad (4.10)$$

Функционал $\mathcal{L}(f, T)$ можно рассматривать как лагранжиан, где $f \leq 0$ является множителем для ограничения $T_\# \mathbb{P} - w \mathbb{Q} \leq 0$. Решая (4.9), можно получить ИТ отображения.

Теорема 4.3.4 (ИТ отображения содержатся в оптимальных седловых точках). Пусть f^* — любой максимизатор в (4.7). Если $\pi^* \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ является детерминированным ИТ планом, т.е. решает (4.6) и имеет вид $\pi^* = [\text{id}_{\mathcal{X}}, T^*]_\# \mathbb{P}$ для некоторого измеримого $T^*: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, то

$$T^* \in \arg \min_{T: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} \mathcal{L}(f^*, T).$$

Наша Теорема 4.3.4 утверждает, что в *некоторых* оптимальных седловых точках (f^*, T^*) задачи (4.9) выполняется, что T^* является ИГ отображением между $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$. В общем случае множество $\arg \inf_T$ для оптимального f^* может содержать не только ИГ отображения T^* , но и другие функции (*ложные решения*), см. ограничения в §4.8.

Мы решаем задачу оптимизации (4.9), аппроксимируя отображение T и потенциал f нейросетями T_θ , f_ψ , соответственно. Чтобы сделать f_ψ неположительной, мы используем $x \mapsto -|x|$ в качестве последнего слоя. Нейросети обучаются с помощью стохастического градиентного подъёма-спуска на случайных выборках из $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$. Процедура оптимизации описана в Алгоритме 2.

4.4 Обзор существующих методов

ОТ в генеративных моделях. Популярный способ применения ОТ в генеративных моделях состоит в использовании **стоимости ОТ** в качестве функции потерь для обновления генератора [1; 9; 10], см. обзор в [52]. Эти методы *не релевантны* нашему исследованию, поскольку они не обучают ОТ отображение, а только вычисляют стоимость ОТ.

Недавние работы [3; 4; 41; 62–64] наиболее близки к исследованию, представленному в данной главе. Эти статьи показывают возможность обучать **ОТ отображения** (или планы) путем решения задач поиска седловой точки, выведенных из стандартных формул двойственности для ОТ, основанных на s -преобразовании. Основной принцип нашей целевой функции (4.9) аналогичен их подходу. Ключевое **отличие** состоит в том, что они рассматривают задачи ОТ (4.1), (4.2) и накладывают ограничения в виде *равенств*, например, $T\sharp\mathbb{P} = \mathbb{Q}$, тогда как наш подход накладывает ограничения в виде *неравенств* $T\sharp\mathbb{P} \leq w\mathbb{Q}$, позволяя *частично* согласовывать меры. Мы приводим подробное обсуждение связи с этими работами, а также с фундаментальной литературой по ОТ (4.2) и *частичному* ОТ (4.4) [17; 88; 121] в §4.10, см. библиографические замечания после доказательств Теорем 4.3.3 и 4.3.4.

Для полноты мы также упоминаем другие существующие нейросетевые методы ОТ [2; 11; 12; 65; 127]. Эти методы менее связаны с нашей работой, поскольку они либо уступают по качеству упомянутым выше методам

поиска седловой точки, см. оценку в [13], либо основаны на специальных формулировках ОТ, которые не релевантны нашему исследованию, например, энтропийно-регуляризованном ОТ [8, §4].

Статьи [21; 23; 128] несколько ближе к нашей работе. Они предлагают нейросетевые методы для несбалансированного ОТ [28], которые также могут использоваться для *частичного* согласования мер. Как мы увидим в §4.5.3, UOT не очень хорошо подходит для IT (4.6), поскольку непросто контролировать, как он распределяет вероятностную массу. Кроме того, эти методы рассматривают ОТ между малоразмерными наборами данных или в латентных пространствах.

Дискретные ОТ методы, включая частичный ОТ [19], не релевантны для нас, см. детали в §4.5.4.

Непарный перевод домена [129] является общей задачей, которая включает задачи сверхразрешения изображений [130], дорисовки изображений [131], переноса стиля [132] и т.д. Поэтому мы не упоминаем все существующие подходы, а вместо этого фокусируемся на их общих основных свойствах. Во многих приложениях важно сохранять семантическую информацию во время перевода, например содержание изображения. В большинстве случаев для этого достаточно использовать сверточные нейронные сети. Они сохраняют содержание изображения благодаря своей архитектуре, которая нацелена только на локальные изменения изображения [133]. Однако в некоторых задачах необходимо сохранять дополнительные свойства изображения, например цвет изображения в задаче сверхразрешения. Типичные подходы к таким задачам основаны на подходах типа GANs и используют дополнительные функции потерь *для сохранения сходства*, например базовый метод CycleGAN [118] оценивает сходство с помощью ℓ^1 расстояния. Такие методы наиболее близки к нашей работе. Однако без дополнительных модификаций большинство этих подходов сохраняют свойства изображения только частично, см. [134, Рис. 5]. Как мы показываем в экспериментах (§4.5.5), IT достигает лучшего сходства, чем популярные методы CycleGAN, StarGAN-v2 [135], как в базовой версии, так и в версии, модифицированной для лучшего сохранения содержания изображения.

4.5 Эксперименты

В §4.5.1 мы тестируем метод в иллюстративных модельных 2D примерах и приводим сравнение с альтернативными подходами в §4.5.3. В §4.5.2 мы оцениваем наш метод на задаче непарного перевода изображений, а в §4.5.5 приводим сравнение с другими методами перевода изображений. В §4.5.4 мы приводим сравнение нашего подхода с дискретными методами частичного ОТ. Технические детали обучения (архитектуры, скорости обучения и т.д.) приведены в §4.7. Код написан с использованием фреймворка PyTorch и находится в открытом доступе по адресу

<https://github.com/milenagazdieva/ExtremalNeuralOptimalTransport>.

Транспортные стоимости. Мы проводим эксперименты с квадратичной стоимостью $c(x, y) = \ell^2(x, y)$, поскольку она уже обеспечивает приемлемое качество. Мы немного злоупотребляем обозначением и используем ℓ^2 для обозначения квадратичной ошибки, *нормированной* на размерность. Эксперименты с перцептивной стоимостью приведены в §4.6.1.

4.5.1 Модельные 2D эксперименты

В этом разделе мы приводим 2D примеры '*Wi-Fi*' и '*Accept*', чтобы показать, как выбор w влияет на долю целевой меры $\mathbb{Q}$, в которую отображается вероятностная масса входной меры $\mathbb{P}$. В обоих примерах мера $\mathbb{P}$ является *гауссовской*. В §4.5.3 мы демонстрируем, как другие методы работают на этих модельных примерах '*Wi-Fi*' и '*Accept*'.

В эксперименте '*Wi-Fi*' (Рис. 4.4) целевая мера $\mathbb{Q}$ содержит 3 дуги. Мы приводим обученные ИТ отображения для $w \in [1, \frac{3}{2}, 3]$. Результаты показывают, что, изменяя w , можно контролировать долю $\mathbb{Q}$, в которую будет отображаться масса $\mathbb{P}$. На Рис. 4.4 видно, что при $w = 1$ наш ИТ метод учит все 3 дуги. При $w = \frac{3}{2}$ он захватывает 2 дуги, т.е. $\approx \frac{2}{3}$ меры $\mathbb{Q}$. При $w = 3$ он обучает 1 дугу, что соответствует $\approx \frac{1}{3}$ меры $\mathbb{Q}$.

В эксперименте 'Acsept' (Рис. 4.5) целевая мера $\mathbb{Q}$ является текстом из двух строк. Здесь мы полагаем $w = 2$, и, как и ожидается, наш метод захватывает только одну строку текста, которая является ближайшей к $\mathbb{P}$ по ℓ^2 расстоянию.

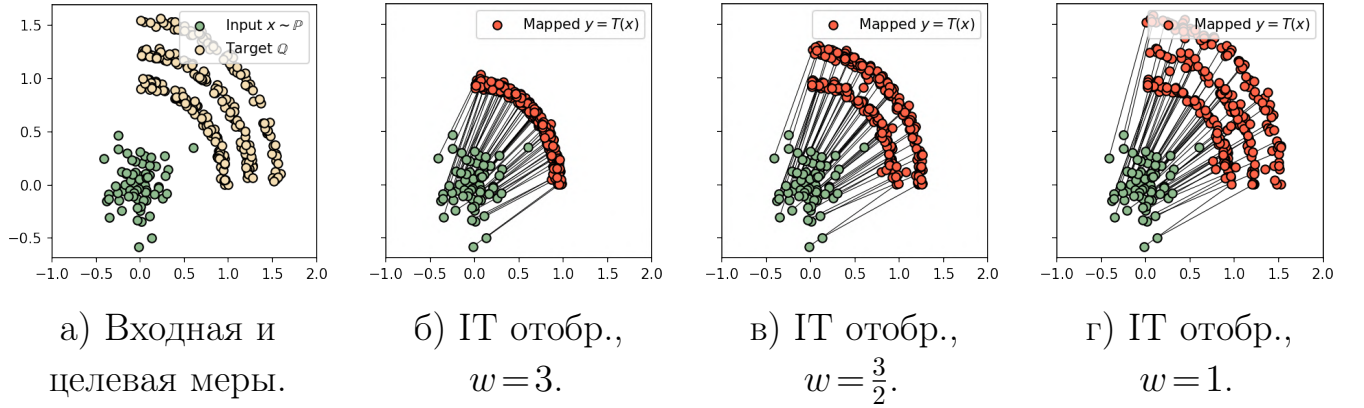


Рис. 4.4 — Отображения неполного транспорта (ИТ), обученные нашим Алгоритмом 2 в эксперименте 'Wi-Fi'.

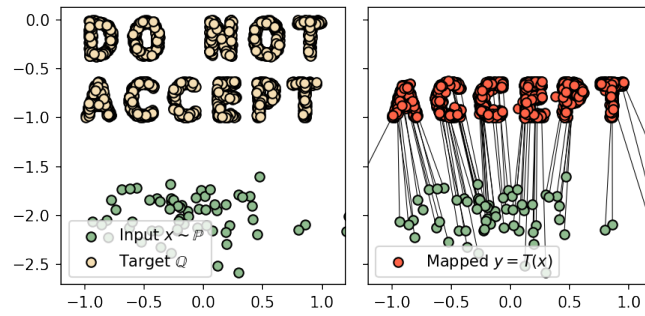


Рис. 4.5 — Обученное ИТ отображение ($w = 2$) в эксперименте 'Acsept'.

4.5.2 Непарный перевод изображений

Здесь мы обучаем ИТ отображения между различными парами наборов данных. Мы тестируем $w \in \{1, 2, 4, 8\}$ во всех экспериментах. Для полноты мы приводим результаты экспериментов с большими весами $w \in \{16, 32\}$ в §4.6.2.

Наборы изображений. Мы используем общедоступные наборы данных в качестве $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$: лица знаменитостей [136], выровненные аниме лица², flickr-faces-HQ [84], лица из комиксов³, изображения сумок из поднабора Amazon Handbags набора данных LSUN [137], обувь [138], текстуры [139] и стулья из

²<https://kaggle.com/reitanaka/alignedanimefaces>

³<https://kaggle.com/datasets/defileroff/comic-faces-paired-synthetic-v2>

набора данных Bonn furniture styles [140]. Размеры наборов данных составляют от 5К до 500К объектов. Мы работаем с изображениями 64×64 и 128×128 .

Разбиение на обучение и тест. Мы используем 90% каждого набора данных для обучения. Оставшиеся 10% откладываются для теста. Все представленные качественные и количественные результаты получены на тестовых изображениях.

Экспериментальные результаты. Наша оценка показывает, что с увеличением w изображения $\hat{T}(x)$, преобразованные нашим ИТ методом, становятся более похожими на соответствующие входы x относительно ℓ^2 . В Таблице 31а мы количественно оцениваем этот эффект, т.е. показываем, что транспортная стоимость $\frac{1}{N_{\text{test}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{test}}} c(x, \hat{T}(x))$ на тестовых данных уменьшается с увеличением w .

Мы качественно демонстрируем этот эффект на Рис. 4.6а, 4.6б, 4.7а, 4.7б и 4.8. В *celeba* (женщины) $\rightarrow$ *anime* (Рис. 4.6б) цвета волос и фона обученных изображений аниме становятся ближе к цветам исходных изображений лиц знаменитостей с увеличением w . Например, в 4-м столбце Рис. 4.6б цвет волос аниме меняется с зелёного на коричневый, что близко к цвету волос соответствующей знаменитости. В 6-м столбце фон становится темнее. В *handbag* $\rightarrow$ *shoes* (Рис. 4.6а) цвет, текстура и размер обуви становятся ближе к соответствующим свойствам исходной сумки. Дополнительно для этого эксперимента мы строим проекции обученных ИТ отображений на первые две главные компоненты $\mathbb{Q}$ (Рис. 4.8). Видно, что проекции близки к $\mathbb{Q}$ при $w = 1$ и становятся ближе к $\mathbb{P}$ с увеличением w . В *ffhq* $\rightarrow$ *comics* изменения в основном затрагивают выражения лиц и индивидуальные характеристики. В *textures* $\rightarrow$ *chairs* изменения в основном связаны с размером стульев, что ожидаемо, поскольку в качестве функции стоимости мы используем попиксельную квадратичную стоимость ℓ^2 . Дополнительные качественные результаты приведены в §4.6.3 (Рис. 4.18, 4.19, 4.20).

Для полноты мы измеряем тестовый FID [141] для преобразованных выборок, см. Таблицу 31б. Мы не вычисляем FID в эксперименте *textures* $\rightarrow$ *chairs* из-за слишком малых размеров тестовых частей наборов данных (500 текстур, 2К стульев). Необходимо отметить, что FID не репрезентативен при $w > 1$. В этом случае обученные ИТ отображения по построению переносят массу только в часть целевой меры $\mathbb{Q}$. В то же время FID проверяет, насколько хорошо преобразованные выборки представляют всё целевое распределение, и

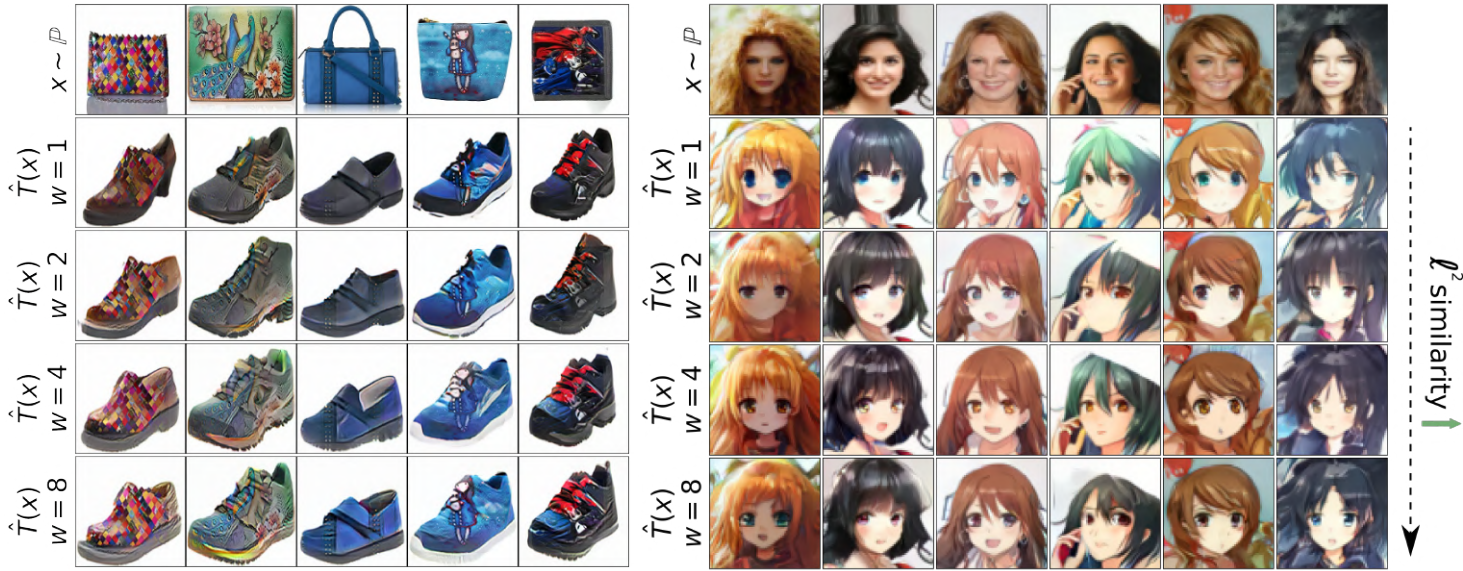
а) *Handbag* $\rightarrow$ *shoes* (128×128).б) *Celeba* (женщины) $\rightarrow$ *anime* (64×64).

Рис. 4.6 — Непарный перевод домена с помощью нашего метода неполного транспорта. Большие веса w дают большее сходство x и $T(x)$ по ℓ^2 .

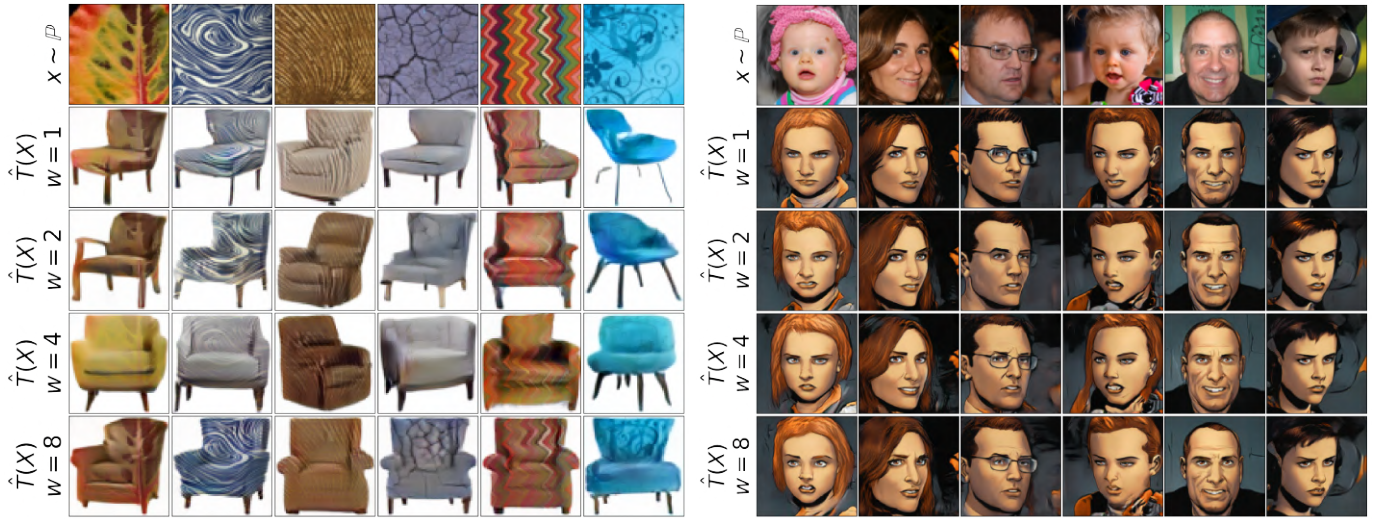
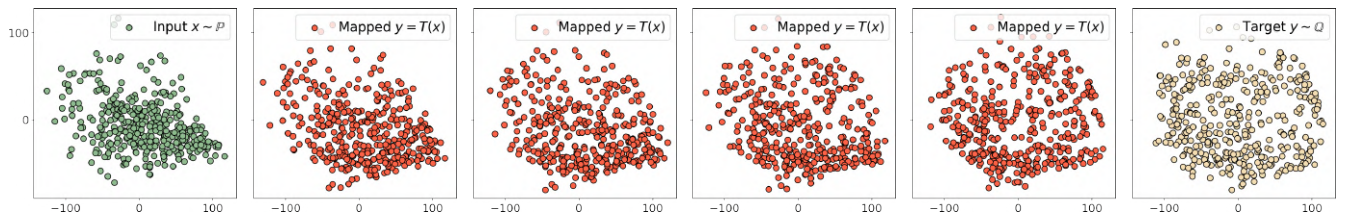
а) *Textures* $\rightarrow$ *chairs* (64×64).б) *Ffhq* $\rightarrow$ *comics* (128×128).

Рис. 4.7 — Непарный перевод домена с помощью нашего ИТ метода.



а) Входная мера.

б) ИТ отобр.,
 $w = 8$.в) ИТ отобр.,
 $w = 4$.г) ИТ отобр.,
 $w = 2$.д) ИТ отобр.,
 $w = 1$.е) Целевая
мера.

Рис. 4.8 — PCA проекции входных $x \sim \mathbb{P}$, отображённых $T(x) \sim T\# \mathbb{P}$ и целевых $y \sim \mathbb{Q}$ для тестовых выборок (эксперимент *handbag* $\rightarrow$ *shoes*).

Эксперимент	$w = 1$	$w = 2$	$w = 4$	$w = 8$
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	0.297	0.154	0.133	0.094
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>	0.368	0.320	0.259	0.252
<i>textures</i> $\rightarrow$ <i>chairs</i>	0.603	0.516	0.474	0.408
<i>ffhq</i> $\rightarrow$ <i>comics</i>	0.224	0.220	0.200	0.196

а) Тестовая ℓ^2 стоимость.

Эксперимент	$w = 1$	$w = 2$	$w = 4$	$w = 8$
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	14.65	20.79	22.18	22.84
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>	27.10	29.70	42.90	53.80
<i>textures</i> $\rightarrow$ <i>chairs</i>	N/A	N/A	N/A	N/A
<i>ffhq</i> $\rightarrow$ <i>comics</i>	20.95	22.38	22.77	23.67

б) Тестовый FID.

Таблица 31 — Тестовые ℓ^2 транспортная стоимость и FID для обученных IT отображений.

очень чувствителен к исчезновению мод [34, Рис. 16]. Поэтому, несмотря на уменьшение стоимости с увеличением w , FID, напротив, увеличивается. Это ожидаемо, поскольку метод учит IT отображения в меньшую часть $\mathbb{Q}$. Важно, что визуальное качество преобразованных изображений $\hat{T}(x)$ не ухудшается.

В §4.5.5 мы сравниваем наш IT метод с другими методами и показываем, что IT лучше сохраняет сходство между входом и выходом.

4.5.3 Модельные 2D иллюстрации других методов

В этом разделе мы демонстрируем, как другие методы работают в экспериментах 'Wi-Fi' и 'Accept'. Начнём с 'Wi-Fi'. Предположим, что мы хотим отобразить $\mathbb{P}$ в ближайшие $\frac{2}{3}$ меры $\mathbb{Q}$, т.е. хотим выучить отображение в 2 из 3 дуг в $\mathbb{Q}$, как на Рис. 4.4в.

На Рис. 4.9г мы показываем дискретный частичный ОТ (4.4) [19] с параметрами $w_0 = m = 1$, $w_1 = \frac{3}{2}$, соответствующими IT (4.6) с $w = \frac{3}{2}$. Чтобы получить дискретное сопоставление, мы запускаем `ot.partial.partial_wasserstein2` из POT⁴. Как и ожидалось, он сопоставляет входную $\mathbb{P}$ с $\frac{2}{3}$ меры $\mathbb{Q}$ и может рассматриваться как истинное решение, совпадающее с нашим Рис. 4.4в.

Сначала мы показываем результаты подхода GAN [123], дополненного дополнительной ℓ^2 функцией потерь с весом $\lambda = 0.5$ (на Рис. 4.9а). Затем мы рассматриваем дискретный несбалансированный ОТ [28] с квадратичной стоимостью $c = \ell^2$. На Рис. 4.9б мы показываем отображение, полученное из решения дискретной UOT задачи с помощью `ot.unbalanced` с параметрами

⁴<https://pythonot.github.io>

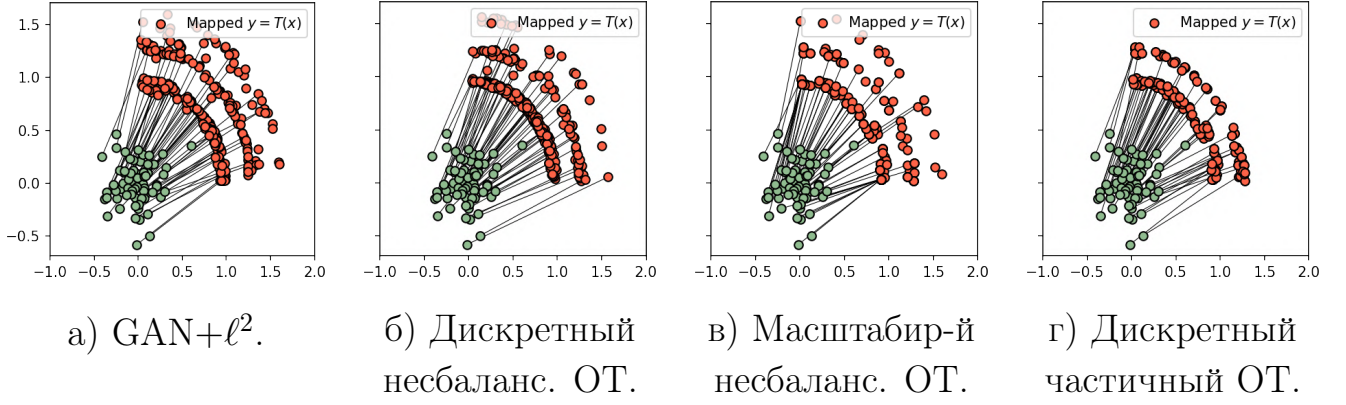


Рис. 4.9 — Транспортные отображения, обученные различными методами в эксперименте 'Wi-Fi'.

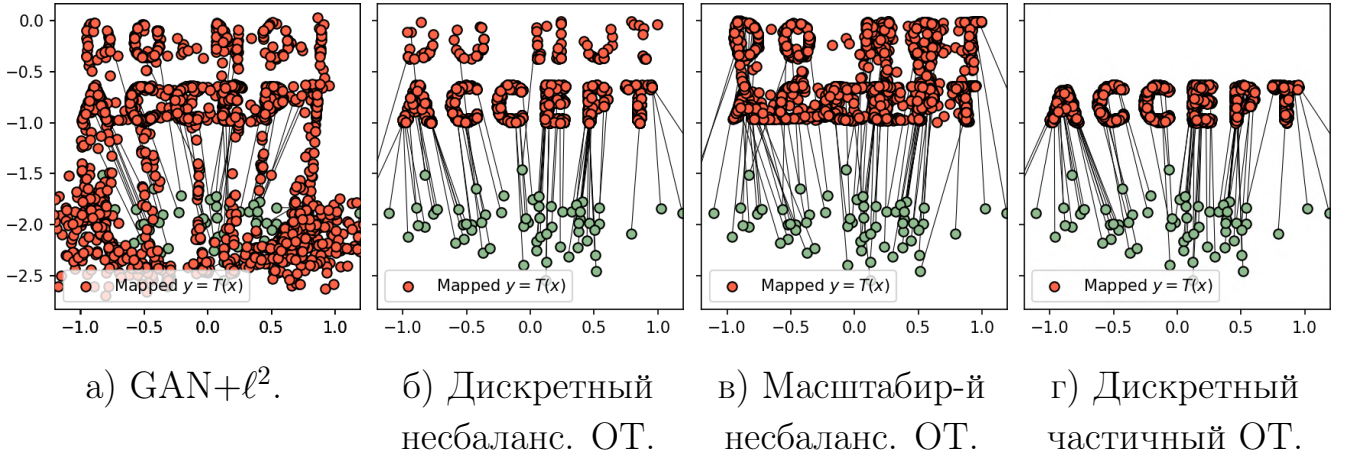


Рис. 4.10 — Транспортные отображения, обученные различными методами в эксперименте 'Accept'.

$m = 1, \text{reg} = 0.1, \text{reg}_m = 1, \text{numItermax} = 200000$. Дополнительно на Рис. 4.9в мы показываем результат нейросетевого метода несбалансированного ОТ [21].⁵ Чтобы сделать их несбалансированную постановку максимально похожей на нашу ИТ, мы зануляем их параметры регуляризации. Остальные параметры используются по умолчанию, за исключением $\lambda_0 = 0.02$ (параметр ℓ^2 функции потерь), $\lambda_2 = 5$ (параметр вариации входной и целевой мер).

Мы видим, что $\text{GAN}+\ell^2$ (Рис. 4.9а) и несбалансированный ОТ (Рис. 4.9б и 4.9в) действительно сопоставляют $\mathbb{P}$ только с *частью* целевой меры $\mathbb{Q}$. Перенесённая масса в основном сосредоточена в двух малых дугах $\mathbb{Q}$, которые являются ближайшими к $\mathbb{P}$ относительно ℓ^2 стоимости. Проблема здесь состоит в том, что часть массы $\mathbb{P}$ распределяется по третьей (самой большой) дуге $\mathbb{Q}$, порождая **выбросы**. Это происходит потому, что несбалансированный ОТ (GAN можно рассматривать как его частный случай) является задачей *без*

⁵https://github.com/uhrerlab/unbalanced_ot

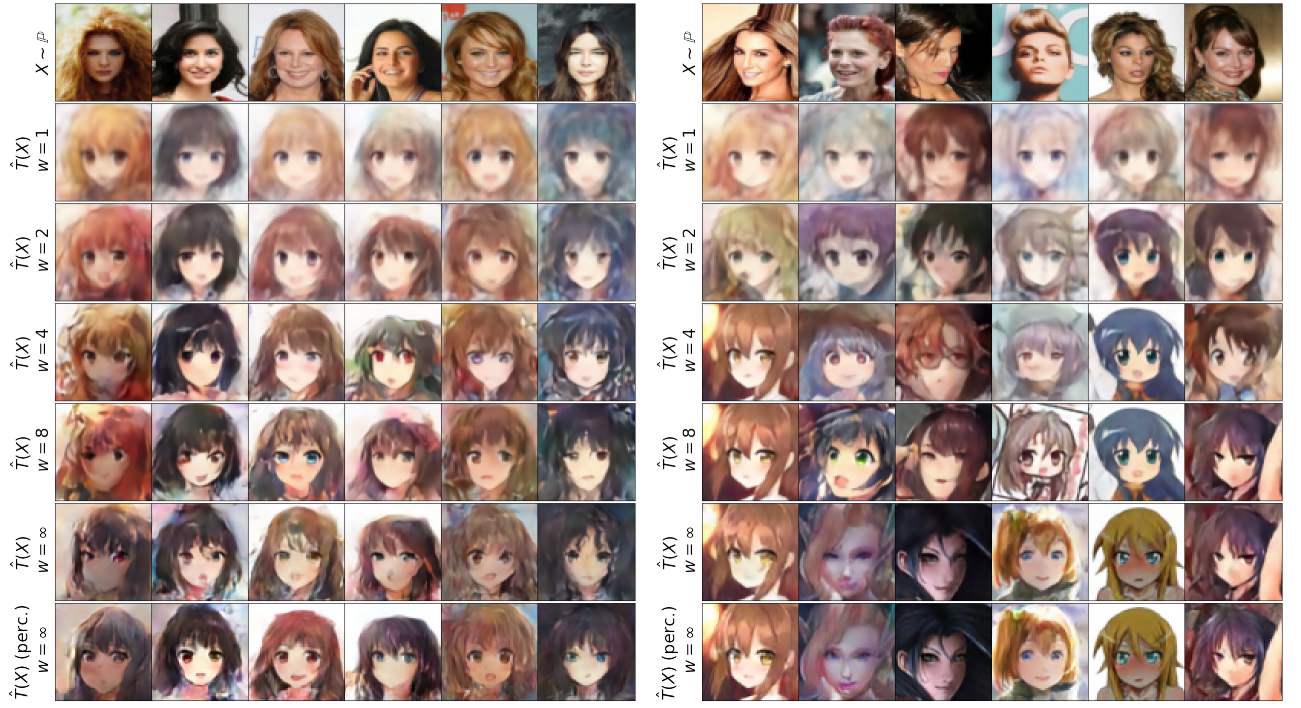
ограничений: распределение массы контролируется с помощью мягкого штрафа (члена функции потерь в виде f -дивергенции). Отсутствие жёстких ограничений, таких как в частичном ОТ (4.4) или ИТ (4.6), затрудняет строгий контроль того, как именно распределяется масса в несбалансированном ОТ.

Для полноты мы также показываем результаты этих методов в эксперименте *'Accept'*, см. Рис. 4.10. Здесь мы тестировали различные гиперпараметры для этих методов, но не достигли желаемого поведения, т.е. не смогли обучить отображение только в текст *'Accept'*. Более того, мы заметили, что $\text{GAN} + \ell^2$ при больших λ даёт нежелательные артефакты (Рис. 4.10а). Это связано с тем, что функции потерь GAN и ℓ^2 противоречат друг другу, но при этом модели всё равно пытались минимизировать их обе. Мы дополнительно обсуждаем этот аспект далее в §4.5.5.

4.5.4 Связь и сравнение с дискретными методами частичного ОТ

Цель перевода домена состоит в восстановлении отображения $x \mapsto T(x)$ между двумя доменами $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$. Мы подходим к этой задаче, аппроксимируя T нейросетью, обученной на эмпирических выборках $X = \{x_1, \dots, x_N\}$, $Y = \{y_1, \dots, y_M\}$, т.е. обучающих наборах данных. Наш метод *обобщается* на новые (ранее не встречавшиеся, тестовые) входные объекты $x_{new} \sim \mathbb{P}$, т.е. обученное отображение $\hat{T}$ можно применять к новым входным объектам, чтобы *генерировать* соответствующие новые объекты целевого домена $\hat{T}(x_{new})$.

В отличие от этого, дискретные методы ОТ (включая дискретный частичный ОТ) *выполняют сопоставление* между эмпирическими распределениями $\hat{\mathbb{P}}_{N=\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta_{x_n}}, \hat{\mathbb{Q}}_{M=\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \delta_{y_m}}$. Поэтому они не позволяют оценивать транспортный план $\pi(y|x_{new})$ или отображение $T(x_{new})$ для данных вне обучающей выборки. У читателя может естественно возникнуть вопрос: почему бы не **интерполировать** решения дискретного ОТ? Например, распространённая стратегия состоит в том, чтобы вычислить барицентрические проекции (barycentric projections, BP) $\bar{T}(x) = \int y d\pi(y|x)$ дискретного ОТ плана π , а затем обучить нейросеть $T_\theta(x) \approx \bar{T}(x)$ для их аппроксимации [2]. Ниже мы исследуем этот подход и показываем, что он не даёт приемлемого качества.



а) Результаты на *тестовых* данных. б) Результаты на *обучающих* данных.

Рис. 4.11 — Непарный перевод изображений с DOT+BP в эксперименте *celeba* → *anime*, визуализированный на тестовых и обучающих наборах данных.

Мы проводим оценку подхода BP в задаче перевода *celeba* → *anime*. Мы решаем задачу дискретного частичного ОТ (DOT) между частями обучающих данных X (11К объектов), Y (50К объектов).⁶ Для этого мы используем алгоритм `ot.partial.partial_wasserstein` с параметрами $w_0 = m = 1$ и варьируем $w_1 \in \{1, 2, 4, 8\}$, см. обозначения в (4.4). Это соответствует нашему IT (4.6) с $w = w_1$. Затем мы обучаем UNet T_θ предсказывать барицентрическую проекцию $\bar{T}$. Мы также имитируем случай $w = \infty$: метод ближайших соседей `NearestNeighbors` из `sklearn.neighbors` настраивается на обучающем наборе данных, а затем используется для поиска дискретных ближайших соседей тестовых объектов. Мы проводим эксперименты с использованием MSE или перцептивной ошибки на основе VGG⁷ в качестве функции потерь для регрессии. Мы визуализируем полученные результаты на Рис. 4.11 и приводим среднюю ℓ^2 **тестовую** транспортную стоимость, FID в Таблице 32.

Известно, что методы BP **плохо работают** в задачах большого масштаба, таких как непарный перевод изображения, из-за *эффекта усреднения*, см. Рисунок 3 и большие значения FID для BP в Таблице 1 из [65]. Действительно,

⁶Мы не используем полные наборы данных, поскольку вычисление дискретного ОТ между ними вычислительно неосуществимо.

⁷github.com/iamalexkorotin/WassersteinIterativeNetworks/src/losses.py

Метрики	$w = 1$	$w = 2$	$w = 4$	$w = 8$	$w = \infty$	$w = \infty$ (перц.)
ℓ^2 стоимость	0.298	0.199	0.184	0.167	0.158	0.165
FID	185.35	137.53	82.67	82.19	82.24	82.45

Таблица 32 — Тестовая ℓ^2 стоимость, FID метода DOT+BP, обученного с ℓ^2 или перцептивной функцией потерь.

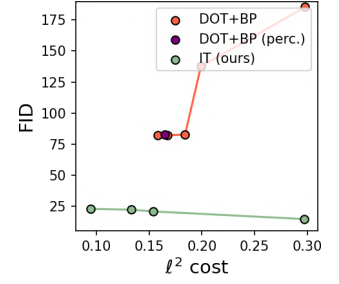


Рис. 4.12 — Тестовый FID, ℓ^2 стоимость нашего IT и DOT+BP.

можно обучить нейросеть аппроксимировать барицентрические проекции $T_\theta(x) \approx \int_{\mathcal{Y}} y d\pi(y|x)$ по дискретному ОТ плану π , однако ясно, что $\int_{\mathcal{Y}} y d\pi(y|x)$ является прямым взвешенным *средним* нескольких изображений y , т.е. некоторым размытым *средним* изображением низкого качества. Такое качество неприемлемо для практических приложений.

Наши качественные результаты действительно показывают, что подход BP при малых w приводит к *эффекту усреднения*. Мы видим, что на обучающем наборе данных этот эффект исчезает с увеличением w , см. Рис. 4.11б. Это ожидаемо, поскольку с увеличением веса условное распределение плана $\pi(y|x)$ стремится к вырожденному распределению, сосредоточенному в ближайшем соседе $NN(x)$ точки x в обучающем наборе данных, т.е. $\pi(y|x) \approx \delta_{NN(x)}$ при $w \rightarrow \infty$. Это означает, что в пределе барицентрическая проекция в точке x является её ближайшим соседом $NN(x)$.

Однако обученная сеть ($w = \infty$) плохо обобщается на ранее не встречавшиеся тестовые данные и порождает изображения недостаточного качества, которое намного хуже, чем для обучающих выборок, см. Рис. 4.11а. Несмотря на то, что тестовая ℓ^2 стоимость и FID уменьшаются с увеличением w , см. Таблицу 32, Рис. 4.12, сгенерированные тестовые изображения имеют низкое качество для всех весов w . При этом значения FID, а также ℓ^2 стоимости намного больше, чем у нашего метода, во всех случаях.

Поскольку известно, что MSE как функция потерь для регрессии плохо работает в задачах с изображениями, мы также проводим эксперимент, в котором обучаем T_θ с использованием перцептивной функции потерь. Однако обучение нейросети с перцептивной функцией потерь не приводит к содержательным улучшениям, см. нижние строки Рис. 4.11б, 4.11а, Таблицу 32. Это подтверждает,

что причины низкого качества метода DOT+BP лежат не в регрессионной части, а в методологии, основанной на барицентрических проекциях.

В заключение, дискретные методы ОТ не являются конкурентами предложенному методу, поскольку не существует прямого и хорошо работающего способа выполнить DOT оценивание для данных вне обучающей выборки в задачах обработки изображений большого масштаба.

4.5.5 Сравнение с другими методами перевода изображений

Напомним, что формулировка неполного транспорта (IT) разработана для увеличения **сходства между входными объектами и результатами перевода** за счёт ослабления ограничения на целевой маргинал. При увеличении параметра w наши отображения на основе IT позволяют лучше контролировать это сходство. Возникает естественный набор вопросов: **(а)** Какие ещё механизмы существуют для увеличения сходства между входом и выходом в задачах перевода? **(б)** В какой степени такое сходство можно контролировать в существующих генеративных моделях? **(с)** Могут ли эти модели достигать уровня сохранения содержания, сопоставимого с методами на основе IT? Мы отвечаем на эти вопросы в следующем обсуждении.

Многие методы перевода основаны на GANs, см. обзоры [129; 142; 143]. Их целевые функции обычно состоят из нескольких функций потерь:

$$\mathcal{L}_{\text{Total}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}_{\text{Dom}}(T) + \lambda \cdot \mathcal{L}_{\text{Sim}}(T) + [\text{other terms}]. \quad (4.11)$$

В (4.11) **функция потерь домена** $\mathcal{L}_{\text{Dom}}$ обычно является классической функцией потерь моделей типа GAN с дискриминатором [123], которая обеспечивает, что обученное отображение $x \mapsto T(x)$ преобразует входные объекты $x \sim \mathbb{P}$ в выборки из целевого распределения данных $\mathbb{Q}$. **Функция потерь для сохранения сходства** $\mathcal{L}_{\text{Sim}}$ (при $\lambda \geq 0$) обычно является функцией потерь *идентичности* $\int_{\mathcal{X}} \|x - T(x)\|_1 d\mathbb{P}(x)$. В более общем случае это может быть произвольная *неконтролируемая* функция потерь вида $\int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mathbb{P}(x)$, стимулирующая выходной объект $T(x)$ быть похожим на входные объекты x относительно заданной функции различия c , например ℓ^1, ℓ^2, ℓ^p , перцептивной и т.д. Другие слагаемые в (4.11) включают специфичные для модели члены

(например, функцию потерь циклической согласованности в CycleGAN), которые не связаны с нашим исследованием.

При обучении модели посредством оптимизации (4.11) естественный способ добиться большего сходства между x и $T(x)$ в (4.11) состоит в увеличении веса λ соответствующего слагаемого в целевой функции. Это прямолинейный подход, но у него есть заметное **ограничение**. Когда λ велико, слагаемое $\lambda \cdot \mathcal{L}_{\text{Sim}}$ доминирует над другими слагаемыми, такими как $\mathcal{L}_{\text{Dom}}$, и модель T просто учится минимизировать эту функцию потерь, игнорируя то, что выходной объект должен быть из целевого распределения данных $\mathbb{Q}$. Другими словами, в (4.11) существует **взаимозависимость** между принадлежностью $T(x)$ целевому распределению данных $\mathbb{Q}$ и сходством между входом x и выходом $T(x)$. Параметр $\lambda \geq 0$ управляет этой взаимозависимостью *реалистичность–сходство*, и ниже мы изучаем, как он влияет на обученное отображение T .

Мы выбираем **CycleGAN** [118] как базовую модель для оценки, поскольку она известна как одна из основных моделей для решения задачи непарного перевода изображений. Мы используем $c = \ell^1$ как функцию потерь для сохранения сходства, поскольку авторы CycleGAN **изначально использовали её в своей статье**.⁸ Мы рассматриваем параметр $\lambda \in [0, 50, 100, 200, 250, 300, 350, 500]$.

Дополнительно мы проводим сравнение с более современной моделью StarGAN-v2 [135]. По умолчанию StarGAN-v2 не использует никакую функцию потерь для сохранения сходства и не заставляет выход быть похожим на вход. Поэтому, аналогично CycleGAN, мы дополняем модель дополнительной ℓ^1 функцией потерь для сохранения сходства и рассматриваем $\lambda \in [0, 1, 10, 50, 100, 200, 500]$.

Мы обучаем обе модели для задач перевода изображений *celeba* $\rightarrow$ *anime* (64×64) и *handbags* $\rightarrow$ *shoes* (128×128) при различных λ и ниже приводим качественные и количественные результаты. В обоих примерах мы приводим как ℓ^2 , так и ℓ^1 транспортные стоимости и FID на **тестовых** объектах. Таблицы 33, 34, 35, 36 показывают транспортные стоимости и FID для GANs. FID и ℓ^2 метрики для нашего метода приведены в основном тексте (Таблицы 31б, 31а), а

⁸Мы также провели отдельный эксперимент по обучению CycleGAN с ℓ^2 функцией потерь идентичности. Однако в этом случае обучение CycleGAN оказалось менее стабильным и, что важно, дало (в основном) худший FID. Неожиданно мы наблюдали более высокие тестовые транспортные стоимости (как ℓ^2 , так и ℓ^1). Поэтому, чтобы не перегружать изложение, мы решили оставить только эксперимент с CycleGAN, обученным с ℓ^1 функцией потерь идентичности.

ℓ^1 стоимость приведена ниже в Таблице 37. Для удобства мы визуализируем пары (FID, Cost) для нашего метода и GANs на Рис. 4.13.

Результаты и обсуждение (CycleGAN). Интересно, что для CycleGAN добавление небольшой функции потерь идентичности $\lambda = 50$ даёт не только уменьшение транспортной стоимости (по сравнению с $\lambda = 0$), но и некоторое улучшение FID. Однако мы видим, что транспортная стоимость в CycleGAN естественным образом уменьшается с увеличением веса λ . К сожалению, это уменьшение сопровождается **ухудшением** визуального качества изображений, см. Рис. 4.14. Хотя при больших λ стоимость для CycleGAN действительно мала, модель **практически бесполезна**, поскольку она портит качество изображений. При очень больших λ CycleGAN, ожидаемо, учит тождественное отображение.

Эксперимент	Стоимость	$\lambda = 0$	$\lambda = 50$	$\lambda = 100$	$\lambda = 200$	$\lambda = 250$	$\lambda = 300$	$\lambda = 350$	$\lambda = 500$
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	ℓ^1	0.48	0.48	0.39	0.26	0.09	0.09	0.09	0.09
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>		0.42	0.36	0.34	0.31	0.32	0.22	0.16	0.07
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	ℓ^2	0.33	0.32	0.24	0.11	0.01	0.02	0.02	0.01
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>		0.51	0.43	0.41	0.35	0.37	0.22	0.14	0.02

Таблица 33 — Тестовые ℓ^1 и ℓ^2 транспортные стоимости CycleGAN.

Эксперимент	$\lambda = 0$	$\lambda = 50$	$\lambda = 100$	$\lambda = 200$	$\lambda = 250$	$\lambda = 300$	$\lambda = 350$	$\lambda = 500$
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	22.9	20.8	35.2	88.8	122.2	123.5	120.0	122.8
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>	27.8	23.4	23.6	37.4	38.5	105.6	144.9	152.9

Таблица 34 — Тестовый FID CycleGAN.

Эксперимент	Стоимость	$\lambda = 0$	$\lambda = 1$	$\lambda = 10$	$\lambda = 50$	$\lambda = 100$	$\lambda = 200$	$\lambda = 500$
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	ℓ^1	0.672	0.355	0.210	0.076	0.050	0.030	0.029
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>		0.562	0.465	0.244	0.087	0.068	0.054	0.048
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	ℓ^2	0.686	0.216	0.094	0.017	0.006	0.002	0.002
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>		0.739	0.584	0.244	0.040	0.023	0.015	0.012

Таблица 35 — Тестовые ℓ^1 и ℓ^2 транспортные стоимости StarGAN-v2.

Эксперимент	$\lambda = 0$	$\lambda = 1$	$\lambda = 10$	$\lambda = 50$	$\lambda = 100$	$\lambda = 200$	$\lambda = 500$
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	19.55	22.40	42.30	99.68	123.76	137.8	139.11
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>	25.45	45.13	22.36	131.8	149.8	155.8	158.8

Таблица 36 — Тестовый FID StarGAN-v2.

Для λ , обеспечивающих приемлемое визуальное качество, CycleGAN даёт транспортную стоимость, которая больше, чем у **стандартного** OT ($w = 1$). Наш результат при $w = 8$ для неё недостижим. Заметим, что в большинстве случаев FID нашего IT метода меньше, чем у CycleGAN.

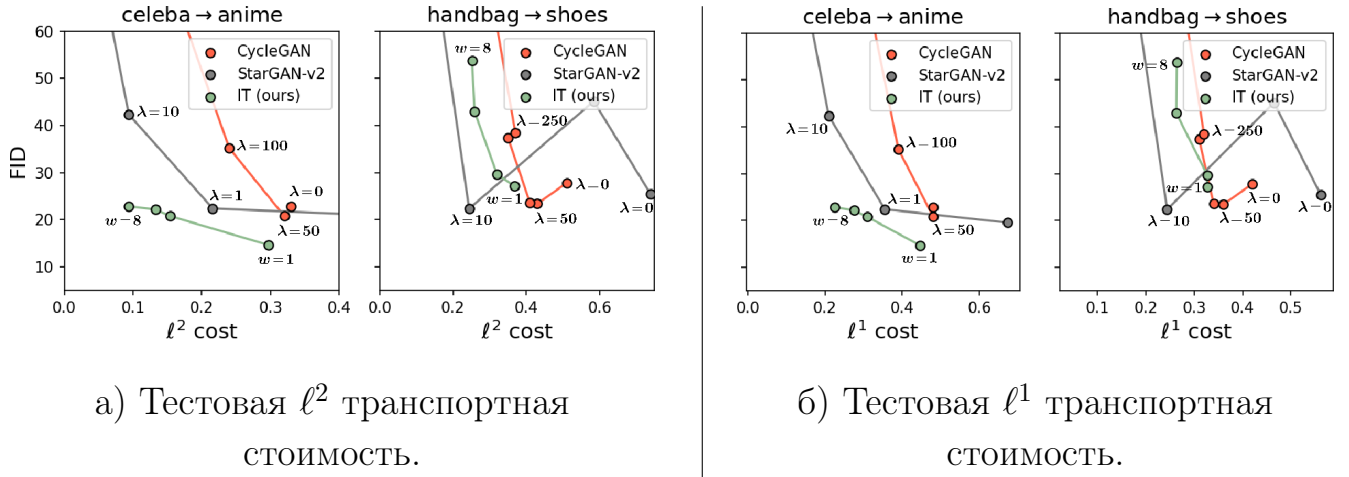


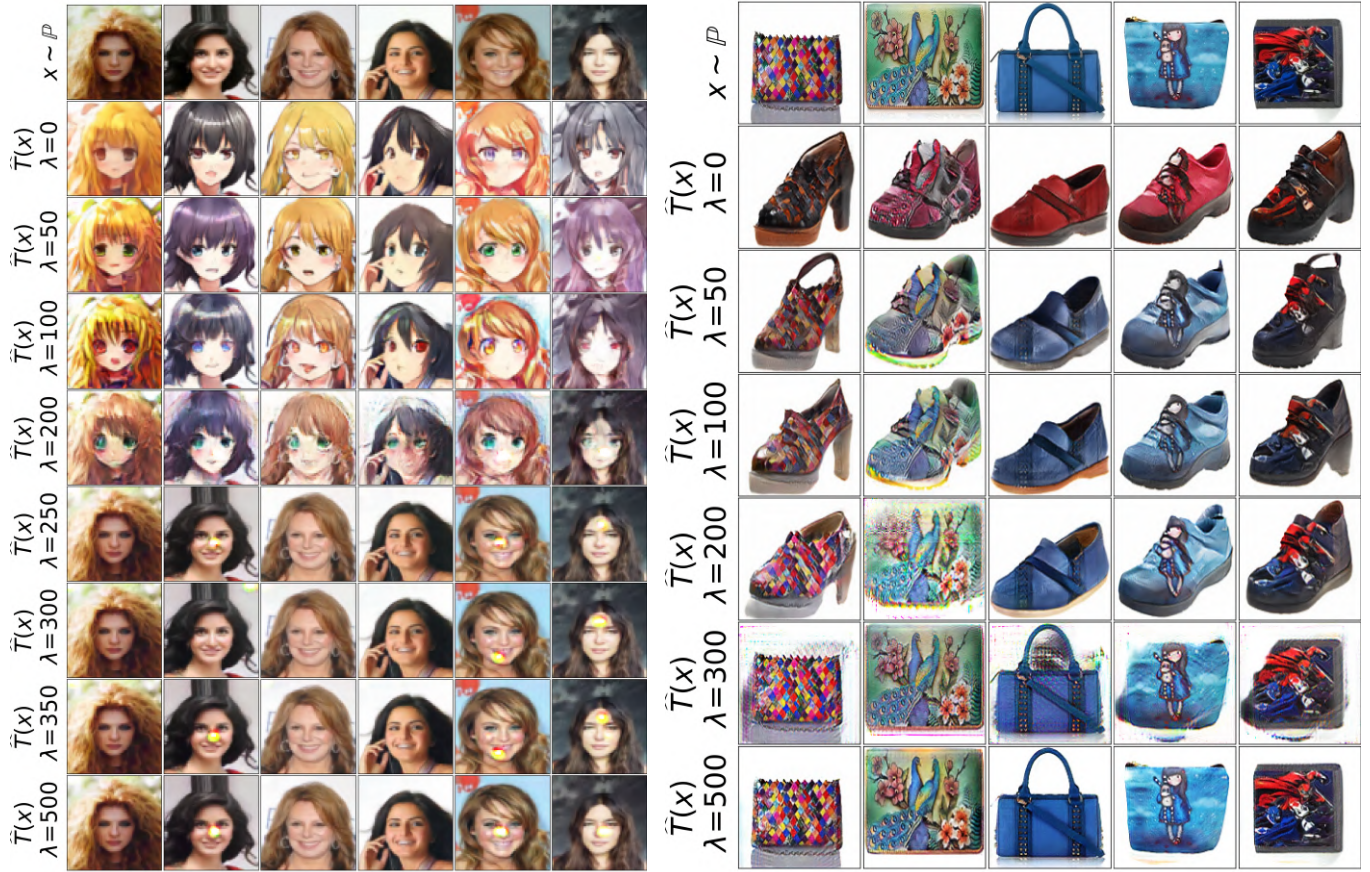
Рис. 4.13 — Сравнение тестового FID и транспортных стоимостей (ℓ^2 и ℓ^1) нашего IT метода и CycleGAN.

Эксперимент	$w = 1$	$w = 2$	$w = 4$	$w = 8$
<i>celeba</i> $\rightarrow$ <i>anime</i>	0.447	0.309	0.275	0.225
<i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>	0.327	0.328	0.263	0.264

Таблица 37 — Тестовая ℓ^1 транспортная стоимость наших IT отображений (обученных с ℓ^2 транспортной стоимостью).

Результаты и обсуждение (StarGAN-v2). В эксперименте *celeba* $\rightarrow$ *anime* результаты StarGAN-v2 похожи на результаты CycleGAN. Наш IT при $w = 2$ легко обеспечивает меньшую транспортную стоимость (лучшее сходство), чем StarGAN-v2. В эксперименте *handbags* $\rightarrow$ *shoes* мы столкнулись с неожиданными наблюдениями. Мы видим, что начиная с $\lambda = 10$ модель **не справляется** с преобразованием некоторых сумок в обувь, т.е. эти сумки остаются почти неизменными. Мы замечаем похожее поведение для модели vanilla GAN в эксперименте 'Accept', см. Рис. 4.10а. Это объясняет низкую стоимость для модели StarGAN-v2 ($\lambda \geq 10$). К нашему удивлению, при $\lambda = 10$ метрика FID также мала, несмотря на то что модель часто порождает **неудачные результаты**, см. выделенные результаты на Рис. 4.15. Заметим, что, хотя FID является широко используемой метрикой, она всё же может давать вводящие в заблуждение оценки, что мы и наблюдаем в последнем случае.

Дополнительно мы приводим большой набор случайно сгенерированных изображений для $\lambda = 10$, чтобы качественно показать, что указанная проблема действительно заметна, см. Рис. 4.16. Эти неудачные результаты демонстрируют *ограниченную практическую применимость* модели. Наш IT метод не страдает от этой проблемы, что мы качественно демонстрируем на том же наборе изображений для различных весов w , см. Рис. 4.19.



а) *Celeba* (жен.) $\rightarrow$ *anime* (64×64).

б) *Handbags* $\rightarrow$ *shoes* (128×128).

Рис. 4.14 — Непарный перевод изображений с помощью CycleGAN, дополненного ℓ^1 функцией потерь идентичности с различными весами λ .

Заключительные замечания. Наш алгоритм при достаточно большом w позволяет достигать большего сходства между входом и выходом без ухудшения качества изображений. В то же время GANs не справляются с этим при $\lambda \rightarrow \infty$. Ниже мы обсуждаем, почему это происходит.

Мы снова подчёркиваем, что типичная целевая функция GAN (4.11) состоит из нескольких слагаемых функции потерь. Каждое слагаемое стимулирует модель достигать определённых свойств (реалистичности, сходства со входом и т.д.). Эти слагаемые в общем случае *противоречат* друг другу, поскольку имеют различные минимумы T . Это приводит к неприятной **взаимозависимости** между слагаемыми функции потерь. Наш анализ показывает, что концептуально нет существенной разницы между CycleGAN и более современной моделью StarGAN-v2. В более общем случае любой метод на основе GAN наследует проблему взаимозависимости *реалистичность-сходство*. Отличия GANs в основном связаны с использованием других архитектур или



а) *Celeba* (жен.) $\rightarrow$ *anime* (64×64).

б) *Handbags* $\rightarrow$ *shoes* (128×128).

Рис. 4.15 — Непарный перевод изображений с помощью StarGAN-v2, дополненного ℓ^1 функцией потерь идентичности с различными весами λ .

дополнительных функций потерь. Поэтому мы считаем, что дополнительные сравнения избыточны, поскольку они могут не дать новых выводов.

В отличие от указанных моделей, **наш метод не является суммой функций потерь**. Наша целевая функция (4.9) может выглядеть как прямая сумма транспортной стоимости и состязательной функции потерь; в нашем методе действительно есть генератор (транспортные отображения T) и дискриминатор (потенциал f), которые обучаются через целевую функцию поиска седловой точки $\max_f \min_T$. Тем не менее это видимое **сходство с методами на основе GAN обманчиво**. Нашу целевую функцию $\max_f \min_T$ можно рассматривать как лагранжиан, и она **нетипична** для GANs: генератор находится во внутренней задаче оптимизации $\min_T$, тогда как в GANs целевая функция имеет вид $\min_T \max_f$. В нашем случае, как и в других нейросетевых двойственных методах ОТ, генератор является состязательным по отношению к дискриминатору, но не наоборот, как в GANs. Дополнительное обсуждение методов ОТ см. в [A1], [3, §4.3] или [63].



Рис. 4.16 — Непарный перевод изображений *handbags* в *shoes* (128×128) с помощью StarGAN-v2, дополненного ℓ^1 функцией потерь идентичности ($\lambda = 10$). Поскольку StarGAN-v2 является стохастическим подходом (один-ко-многим), мы визуализируем несколько сгенерированных объектов для различных векторов шума z . Неудачные результаты (плохо преобразованные сумки, которые остаются почти неизменными) выделены **красным**.

GANs стремятся сбалансировать слагаемые функции потерь $\mathcal{L}_{\text{Dom}}$ и $\mathcal{L}_{\text{Sim}}$. Наша целевая функция оптимизации накладывает ограничение $T\#P \leq wQ$ через обучение потенциала f (также известного как множитель Лагранжа) и среди допустимых отображений T ищет то, которое даёт наименьшую транспортную стоимость. Взаимозависимость реалистичность–сходство отсутствует. Для полноты подчеркнём, что при увеличении w FID в Таблице 316 ухудшается не из-за снижения качества изображений, а потому что наш метод покрывает меньшую часть Q . FID отрицательно реагирует на это [34, Рис. 1b].

4.6 Дополнительные экспериментальные результаты

4.6.1 Перцептивная стоимость

В этом разделе мы показываем, что заявленные выводы остаются справедливыми для транспортных стоимостей, отличных от ℓ^2 . Для этого



Рис. 4.17 — *Celeba* (женщины) $\rightarrow$ *anime* (размер изображений 64×64 , перцептивная стоимость).

Метрики	$w = 1$	$w = 2$	$w = 4$	$w = 8$
Тестовый FID	9.21	12.98	17.24	22.08
Тестовая перцептивная стоимость	0.954	0.794	0.667	0.545
Тестовая ℓ^2 стоимость	0.303	0.209	0.153	0.103

Таблица 38 — Тестовый FID и ℓ^2 , перцептивные транспортные стоимости наших ИТ отображений, обученных с перцептивной транспортной стоимостью.

мы проводим дополнительные эксперименты с использованием *перцептивной* транспортной стоимости из [A1]. Мы используем те же гиперпараметры, что и в наших экспериментах с ℓ^2 стоимостью.

Экспериментальные результаты. Качественные результаты показывают, что сходство между входными изображениями x и изображениями $\hat{T}(x)$, полученными с помощью нашего ИТ метода, обученного с перцептивной стоимостью, растёт с увеличением веса w , см. Рис. 4.17. Таблица 38 количественно подтверждает эти наблюдения, показывая, что как перцептивные, так и ℓ^2 средние транспортные стоимости между входными изображениями и результатами перевода уменьшаются с увеличением w . При этом ИТ, обученный с перцептивной стоимостью, даёт меньший FID, чем ИТ метод, обученный с ℓ^2 стоимостью.

4.6.2 Большие значения весового параметра

В этом разделе мы представляем результаты IT метода, обученного с ℓ^2 стоимостью и параметрами $w = 16, 32$. Мы видим, что, в отличие от CycleGAN, который не переводит изображения лиц в изображения аниме при больших параметрах λ , наш IT метод продолжает переводить лица в аниме даже при больших значениях w . Мы количественно оцениваем полученные результаты в Таблице 39. Как и ожидалось, средние транспортные стоимости уменьшаются с увеличением w , тогда как FID немного увеличивается. Качественные результаты для дополнительных весов приведены на Рис. 4.18.

Метрики	Основные результаты				Дополнительные результаты	
	$w = 1$	$w = 2$	$w = 4$	$w = 8$	$w = 16$	$w = 32$
Тестовый FID	14.65	20.79	22.18	22.84	24.86	28.28
Тестовая ℓ^2 стоимость	0.297	0.154	0.133	0.094	0.091	0.083

Таблица 39 — Тестовые FID и ℓ^2 транспортная стоимость для IT отображений, обученных нашим методом.



Рис. 4.18 — *Celeba* (женщины) $\rightarrow$ *anime* (64×64).

4.6.3 Дополнительные результаты для ℓ^2 стоимости

Ниже мы представляем дополнительные результаты для нашего IT алгоритма, обученного с ℓ^2 стоимостью и параметрами $w = 1, 2, 4, 8$.



Рис. 4.19 — *Handbag* $\rightarrow$ *shoes* (128×128).

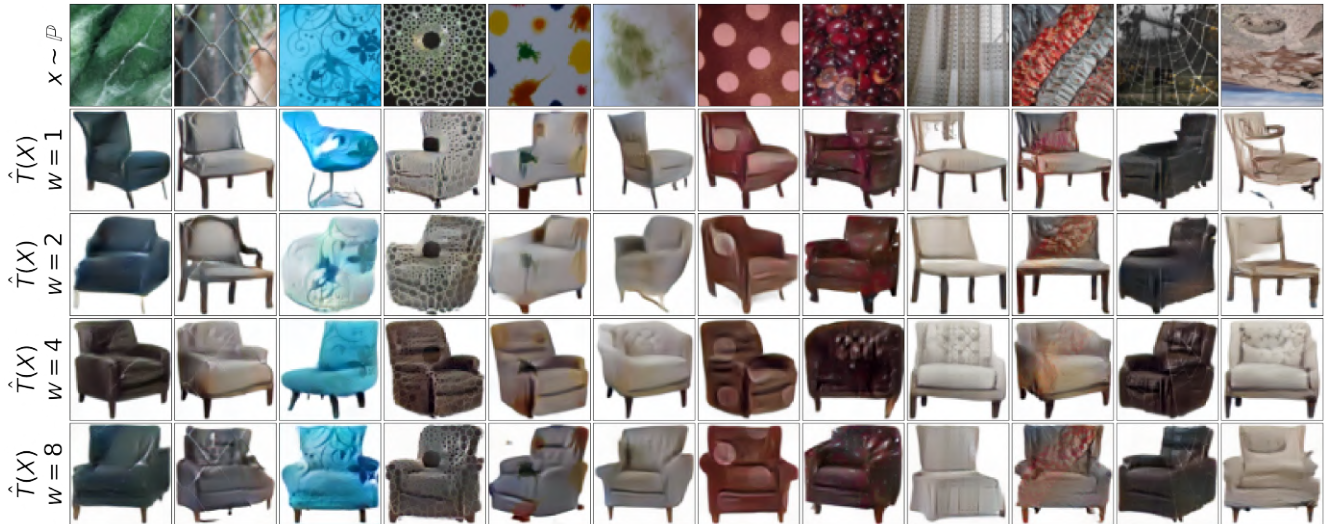


Рис. 4.20 — *Textures* $\rightarrow$ *chairs* (64×64).

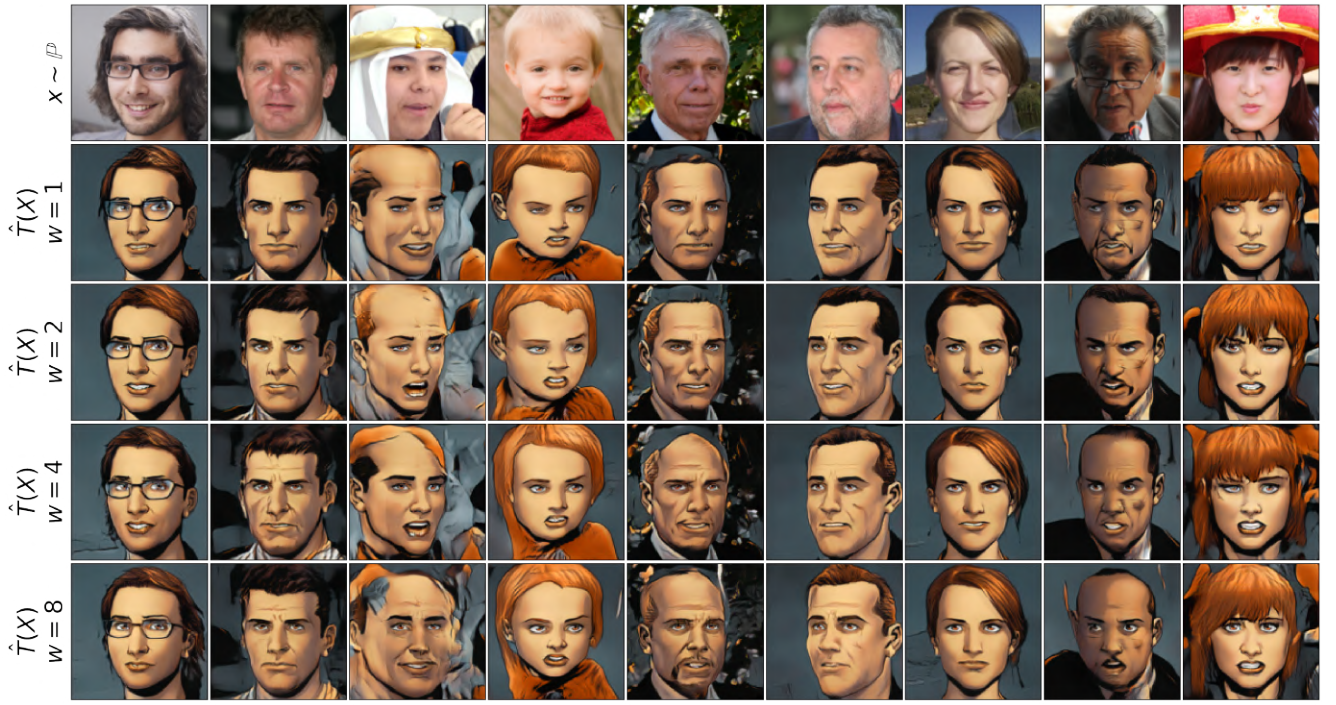


Рис. 4.21 — $Ffhq \rightarrow comics$ (128×128).

4.7 Детали экспериментов

Предобработка. Для всех наборов данных мы нормируем значения RGB-каналов изображений к диапазону $[-1, 1]$. Как в [13], мы сначала перемасштабируем выровненные изображения лиц аниме до размера 512×512 . Затем, чтобы выделить область лица, вырезаем фрагмент размера 256×256 с центром, расположенным на 14 пикселей выше центра изображения. Затем для всех наборов данных, кроме набора текстур, изменяем размер изображений до требуемого разрешения (64×64 или 128×128). Для наборов данных лиц из комиксов и стульев используется аугментация в виде случайного горизонтального отражения. Аналогично [4], изображения текстур мы перемасштабируем так, чтобы меньшая сторона имела размер 300 пикселей, затем применяем случайную обрезку с изменением размера (от 128 до 300 пикселей) и случайные горизонтальные и вертикальные отражения. После этого мы изменяем размер изображений до требуемого разрешения (64×64 или 128×128).

Нейросети. В §4.5.1 мы используем полносвязные сети как для отображения T_θ , так и для потенциала f_ψ . В §4.5.2 мы используем архитектуру UNet [144] для транспортного отображения T_θ и ResNet [145] дискриминатор WGAN-QC [146] в качестве потенциала f_ψ . Мы добавляем дополнительный финальный слой $x \mapsto -|x|$ к f_ψ , чтобы сделать его выходы неположительными.

Оптимизация. Мы используем оптимизатор Adam [85] с параметрами β по умолчанию как для T_θ , так и для f_ψ . Скорость обучения равна $lr = 10^{-4}$. Мы используем планировщик MultiStepLR, который уменьшает lr в 2 раза после $(5+5\cdot w)K$, $(20+5\cdot w)K$, $(40+5\cdot w)K$ и $(70+5\cdot w)K$ итераций f_ψ , где $w \in \{1, 2, 4, 8\}$ – весовой параметр. Размер батча равен $|X| = 256$ для модельного эксперимента 'Wi-Fi', $|X| = 4096$ для модельного эксперимента 'Accept' и $|X| = 64$ для экспериментов по переводу изображений. Число внутренних итераций T_θ равно $k_T = 10$. В модельных экспериментах мы наблюдаем сходимость примерно за 30K общих итераций f_ψ для 'Wi-Fi' и примерно за 70K итераций для 'Accept'. В экспериментах по переводу изображений мы выполняем примерно 70K итераций для наборов данных размера 128×128 и примерно 40K итераций для наборов данных размера 64×64 . В этих экспериментах мы постепенно увеличиваем w в течение первых 20K итераций f_ψ : начинаем с $w = 1$ и линейно увеличиваем его до требуемого значения w (2, 4 или 8).

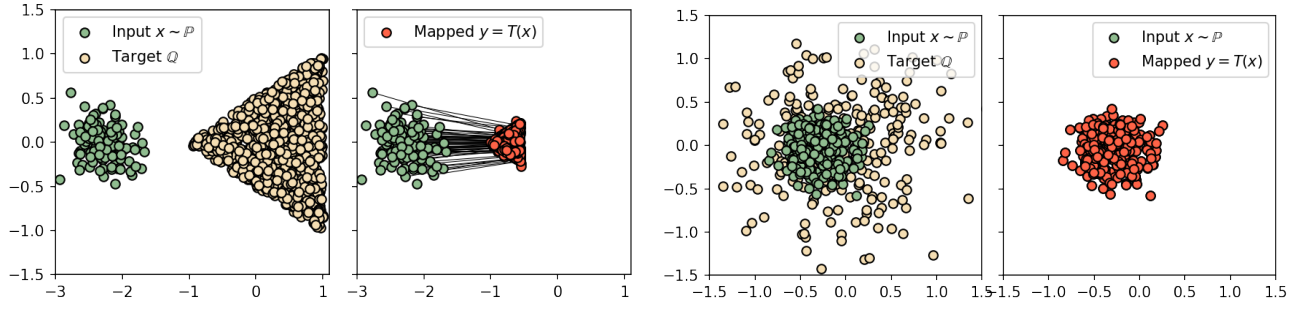
Вычислительная сложность обучения ИТ отображений зависит от набора данных, размера изображений и веса w . Время сходимости увеличивается с ростом w : возможные причины описаны при обсуждении ограничений метода, связанных с *неиспользуемыми выборками* (§4.8). В целом обучение занимает от 2 (для $w = 1$) до 6 (для $w = 8$) дней на одной GPU Tesla V100.

4.8 Ограничения метода

Пересекающиеся носители. Использование ИТ может быть необоснованным, когда $\mathcal{X} = \mathcal{Y}$ и $\text{Supp}(\mathbb{P})$ пересекается с $\text{Supp}(\mathbb{Q})$. Например, если $c(x, y)$ достигает минимума по $y \in \mathcal{Y}$ для заданного $x \in \mathcal{X}$ при $x = y$ (например, для $c = \ell^2$), то ИТ отображения (при больших w) могут стремиться задавать $T(x) = x$ для всех $x \in \text{Supp}(\mathbb{P}) \cap \text{Supp}(\mathbb{Q})$, т.е. не перемещать массу точек x из этого пересечения. Мы приводим иллюстративный модельный 2D пример на Рис. 4.22б.

Ограниченное разнообразие. В некоторых случаях ИТ отображения могут давать вырожденные решения. На Рис. 4.22а мы приводим модельный 2D пример ИТ отображения ($w = 20$), которое отображает все входные объекты почти в одну и ту же точку. На Рис. 4.7а (перевод *texture* $\rightarrow$ *chair*) видно, что с увеличением w ИТ отображение порождает меньше маленьких стульев, но больше крупных кресел. В частности, при $w = 8$ появляются только кресла,

см. Рис. 4.7а. Это связано с тем, что они ближе (по ℓ^2) к текстурам из-за меньшей площади белого фона.

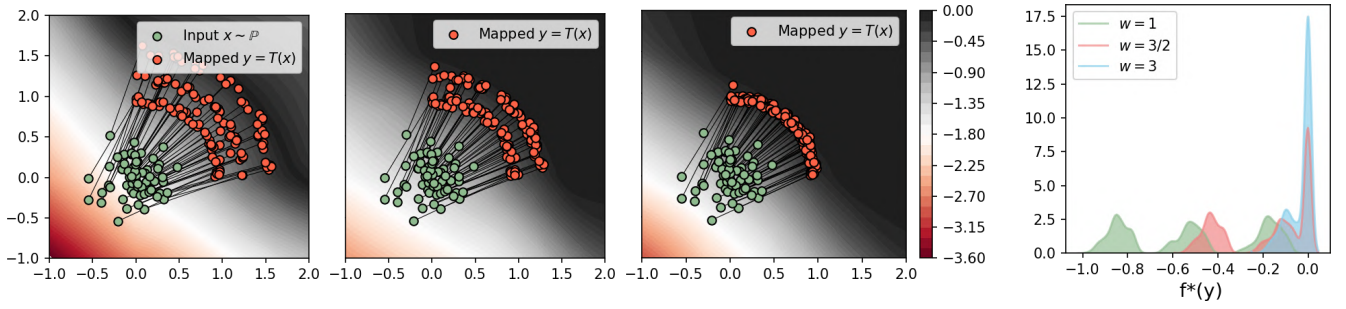


а) **Ограниченное разнообразие.** IT б) **Пересекающиеся носители.** При отображение при $w \rightarrow \infty$ является $w \rightarrow \infty$ IT отображение является вырожденным: оно отображает всю тождественным: оно не перемещает массу $\mathbb{P}$ в одну вершину треугольника вероятностную массу $\mathbb{P}$. Пример $\mathbb{Q}$. Пример показывает обученное IT показывает обученное IT отображение с большим $w = 20$, с большим $w = 8$, аппроксимирующее аппроксимирующее этот случай. предельный случай.

Рис. 4.22 — Модельные 2D примеры, показывающие два потенциальных ограничения IT отображений.

Неиспользуемые выборки. В ходе экспериментов мы заметили, что обучение модели замедляется с увеличением w . Возможная причина состоит в том, что некоторые выборки из $\mathbb{Q}$ становятся неинформативными для обучения (это следует из нашего Предложения 4.9.1). Интуитивно, та часть $\text{Supp}(\mathbb{Q})$, в которую выборки из $\mathbb{P}$ не будут отображаться, неинформативна для обучения. Мы иллюстрируем этот эффект на модельном примере 'Wi-Fi' и строим гистограмму значений f^* на Рис. 4.23. Одно из возможных негативных последствий этого наблюдения состоит в том, что обучение IT отображений или, в более общем случае, частичных OT отображений может естественным образом требовать больших обучающих наборов данных.

Ограниченность количественных метрик. В экспериментах (§4.5) мы используем ограниченное число количественных метрик. Это связано с тем, что существующие непарные метрики, например FID [141], KID [147] и т.д., **не подходят для нашей постановки**. Они нацелены на проверку равенств, таких как $T\#\mathbb{P} = \mathbb{Q}$, тогда как наши обученные отображения *по построению* им не удовлетворяют (они захватывают только часть $\mathbb{Q}$). Разработка метрик качества для *частичных* генеративных моделей является важным направлением будущих исследований. В то же время для нашего метода мы привели модельный 2D



а) Поверхность f^* б) Поверхность f^* в) Поверхность f^* г) Гистограммы
(обучена с $w = 1$). f^* ($w = \frac{3}{2}$). ($w = 3$). $f^*(y)$ для $y \sim \mathbb{Q}$.
Рис. 4.23 — Иллюстрация **неиспользуемых выборок**. На Рис. 4.23а, 4.23б, 4.23в мы визуализируем поверхность обученного потенциала f^* на примере 'Wi-Fi' и $w \in \{1, \frac{3}{2}, 3\}$. На Рис. 4.23б, 4.23в потенциал зануляется на дугах $\mathbb{Q}$, в которые масса $\mathbb{P}$ не отображается, т.е. $f^*(y) = 0$. На Рис. 4.23г мы строим распределение значений $f^*(y)$ для $y \sim \mathbb{Q}$. Для $w \in \{\frac{3}{2}, 3\}$ мы видим большие пики около $f^*(y) = 0$, дополнительно демонстрирующие, что потенциал равен нулю на некоторой части $\mathbb{Q}$.

анализ (§4.5.1) и интерпретируемые метрики (§4.5.2), такие как транспортная стоимость (Таблица 31а).

Несуществующие ИТ отображения. Истинные ИТ планы между $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$ могут быть недетерминированными, тогда как наш подход обучает только детерминированное отображение T . Тем не менее благодаря нашему Предложению 4.3.2 для каждого $\varepsilon > 0$ всегда существует детерминированное отображение $T_\varepsilon \# \mathbb{P} \leq w \mathbb{Q}$, которое даёт ε -субоптимальную стоимость $\int_{\mathcal{X}} c(x, T_\varepsilon(x)) d\mathbb{P}(x) \leq \text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) + \varepsilon$. Таким образом, ИТ стоимость (4.6) можно сколь угодно хорошо аппроксимировать детерминированными транспортными отображениями. Возможный способ модифицировать наш алгоритм для обучения стохастических планов состоит в добавлении случайного шума z на вход генератора $T(x, z)$, хотя этот подход может страдать от игнорирования z , см. [3, §5.1].

Ложные решения и нестабильности. Лагранжевы целевые функции, такие как (4.9), потенциально могут иметь оптимальные седловые точки (f^*, T^*) , в которых T^* не является ОТ отображением. Такие T^* называются *ложными решениями* [4] и могут быть одной из причин нестабильностей обучения. Ложные решения можно устранить, рассматривая ОТ со строго выпуклыми *слабыми* функциями стоимости [3, Приложение Н].

4.9 Потенциальное влияние

Ограничения в виде неравенств для генеративных моделей. Большинство целевых функций оптимизации в генеративных моделях (генеративно-состязательных сетях, диффузионных моделях, нормализующих потоках и т.д.) требуют, чтобы сгенерированная мера удовлетворяла ограничению в виде *равенства*, например $T\#\mathbb{P} = \mathbb{Q}$, где $T\#\mathbb{P}$ является сгенерированной мерой, а $\mathbb{Q}$ — мерой данных. Эта работа демонстрирует, что вместо этого можно требовать выполнения ограничения в виде *неравенства*, например $T\#\mathbb{P} \leq w\mathbb{Q}$, и применять такую постановку к задачам большого масштаба. Хотя в данной работе мы в первую очередь фокусируемся на задаче перевода изображений, мы считаем, что идеи, представленные в данной главе, имеют несколько заметных перспектив для дальнейшего улучшения и приложений. Мы перечисляем их ниже.

(1) Частичный ОТ. Обучение сопоставлений между мерами *неравной* массы является распространённой темой, которая уже имеет перспективные приложения в биологии одиночных клеток [21; 23; 128]. Упомянутые работы используют несбалансированный ОТ [28]. Это задача без ограничений, где распределение массы мягко контролируется регуляризацией из-за чего может быть трудно контролировать, как именно распределяется масса. Использование частичного ОТ, который накладывает жёсткие ограничения в виде неравенств, потенциально может решить эту проблему. Рассмотренная нами ИТ (4.6) задача является частным случаем частичного ОТ (4.4). Таким образом, данное исследование полезно для будущего развития методов частичного ОТ.

(2) Устойчивость и обнаружение выбросов. Наш ИТ метод сопоставляет входную меру $\mathbb{P}$ только с частью целевой меры $\mathbb{Q}$. Это свойство потенциально может использоваться, чтобы сделать обучение устойчивым, например игнорировать выбросы в целевом наборе данных. Важно, что выбор выбросов и уровень загрязнения настраиваются через $c(x, y)$ и w , но их выбор может быть неочевидным. В то же время потенциал f^* зануляется на выбросах, т.е. выборках в $\text{Supp}(\mathbb{Q})$, в которые масса не переносится.

Предложение 4.9.1 (Потенциал зануляется на выбросах). *При предположениях Теоремы 4.3.4 равенство $f^*(y) = 0$ выполняется для всех $y \in \text{Supp}(\mathbb{Q}) \setminus \text{Supp}(T^*\#\mathbb{P})$.*

Мы эмпирически иллюстрируем это утверждение в §4.8. Как следствие этого утверждения, возможным побочным результатом нашего метода является определение выбросов $f^*(y)$ для целевых данных. Такие приложения ОТ являются перспективными, и уже существуют работы [49; 116; 148], развивающие подходы, чтобы сделать ОТ более устойчивым.

4.10 Доказательства теоретических результатов

Лемма 4.10.1. (*Различимость*) Пусть $\mu, \nu \in \mathcal{M}(\mathcal{Y})$. Тогда $\mu \leq \nu$ выполняется тогда и только тогда, когда для каждой $f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$, удовлетворяющей $f \leq 0$, выполняется $\int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mu(y) \geq \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\nu(y)$.

Доказательство Леммы 4.10.1. Если $\mu \leq \nu$, то неравенство $\int_{\mathcal{Y}} f(y) d(\mu - \nu)(y) \geq 0$ для любой (измеримой) $f \leq 0$ следует из определения интеграла Лебега. Ниже мы доказываем утверждение в другую сторону.

Предположим противное, т.е. $\int_{\mathcal{Y}} f(y) d(\mu - \nu)(y) \geq 0$ для каждой непрерывной $f \leq 0$, но при этом $\nu \not\leq \mu$. Последнее означает, что существует измеримое $A \subset \mathcal{Y}$, удовлетворяющее $\mu(A) > \nu(A)$. Пусть $\varepsilon = \frac{1}{2}(\mu(A) - \nu(A)) > 0$. Рассмотрим отрицательную индикаторную функцию $f_A(y)$, которая равна -1 , если $y \in A$, и 0 , если $y \notin A$. Рассмотрим меру вариации $|\nu - \mu| \in \mathcal{M}_+(\mathcal{Y})$. Благодаря [149, Предложение 7.9], непрерывные функции $\mathcal{C}(\mathcal{Y})$ плотны в пространстве $\mathcal{L}^1(|\mu - \nu|)$. Поэтому существует функция $f_{A,\varepsilon} \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$, удовлетворяющая $\int_{\mathcal{Y}} |f_A(y) - f_{A,\varepsilon}(y)| d|\mu - \nu|(y) < \varepsilon$. Мы определяем $f_{A,\varepsilon}^-(y) \stackrel{\text{def}}{=} \min\{0, f_{A,\varepsilon}(y)\} \leq 0$. Это неположительная непрерывная функция, и для $y \in \mathcal{Y}$ выполняется $|f_A(y) - f_{A,\varepsilon}(y)| \geq |f_A(y) - f_{A,\varepsilon}^-(y)|$, поскольку f_A принимает только неположительные значения $\{0, -1\}$. Выводим

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{Y}} f_{A,\varepsilon}^-(y) d(\mu - \nu)(y) &= \overbrace{\int_{\mathcal{Y}} f_A(y) d(\mu - \nu)(y)}^{=\nu(A) - \mu(A) = -2\varepsilon} + \int_{\mathcal{Y}} (f_{A,\varepsilon}^-(y) - f_A(y)) d(\mu - \nu)(y) \leq \\ &-2\varepsilon + \int_{\mathcal{Y}} |f_{A,\varepsilon}^-(y) - f_A(y)| d|\mu - \nu|(y) \leq -2\varepsilon + \int_{\mathcal{Y}} |f_{A,\varepsilon}(y) - f_A(y)| d|\mu - \nu|(y) \leq \\ &-2\varepsilon + \varepsilon = -\varepsilon < 0, \end{aligned}$$

что противоречит тому факту, что $\int_{\mathcal{Y}} f(y) d(\mu - \nu)(y) \geq 0$ для каждой непрерывной $f \leq 0$. Таким образом, $\mu \leq \nu$. $\square$

Доказательство утверждения 4.3.1. Для начала докажем, что $\Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ является слабо-* компактным множеством. Выберем любую последовательность $\pi_n \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$. Она ограничена, поскольку все π_n являются вероятностными мерами ($\|\pi_n\|_1 = 1$). Следовательно, по теореме Банаха-Алаоглу [88, Рамка 1.2] существует подпоследовательность π_{n_k} , слабо-* сходящаяся к некоторой $\pi \in \mathcal{M}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$. Остаётся проверить, что $\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$. Пусть (μ_{n_k}, ν_{n_k}) обозначают маргиналы π_{n_k} , а (μ, ν) — маргиналы π . Выберем любую $f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$ с $f \leq 0$. Поскольку $\pi_{n_k} \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$, выполняется $0 \leq \nu_{n_k} \leq w\mathbb{Q}$, $w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \leq \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\nu_{n_k}(y) \leq 0$ (Лемма 4.10.1). Имеем

$$\int_{\mathcal{Y}} f(y) d\nu(y) = \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} f(y) d\pi(x, y) = \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} f(y) d\pi_{n_k}(x, y) = \lim_{k \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\nu_{n_k}(y).$$

Последний предел $\geq w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y)$ и ≤ 0 . Поскольку это выполняется для каждой непрерывной $f \leq 0$, мы заключаем, что $0 \leq \nu \leq w\mathbb{Q}$. Аналогичным анализом можно доказать, что $\mu = \mathbb{P}$ и $\pi \geq 0$. Таким образом, $\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ и $\Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ является слабо-* компактным.

Функционал $\pi \mapsto \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y)$ непрерывен в пространстве $\mathcal{M}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, снабжённом слабой-* топологией, поскольку $c : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \rightarrow \mathbb{R}$ непрерывна. Поскольку $\Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ является компактным множеством, существует $\pi^* \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$, достигающая минимума на $\Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$. Это следует из теоремы Вейерштрасса о достижении экстремума и завершает доказательство. $\square$

Библиографическое замечание. Результаты, показывающие существование минимизаторов π^* в частичном ОТ (4.4), уже существуют, см. [121, Лемма 2.2] или [17, §2]. Они также обеспечивают существование минимизаторов в нашей задаче ИТ (4.6). Однако авторы изучают частный случай, когда $\mathbb{P}, \mathbb{Q}$ имеют плотности на $\mathcal{X}, \mathcal{Y} \subset \mathbb{R}^D$. Для полноты мы включаем отдельное доказательство существования, поскольку не требуем предположения абсолютной непрерывности. Доказательство проводится с помощью обычной техники, основанной на слабой-* компактности в двойственных пространствах, и аналогично [88, Теорема 1.4], где доказывается существование минимизаторов для задачи ОТ (4.2). Наше доказательство немного более техническое из-за ограничения в виде неравенства.

Доказательство утверждения 4.3.2. Пусть $\pi^* \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ — IT план. Рассмотрим задачу ОТ между $\mathbb{P}$ и π_y^* :

$$\min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P}, \pi_y^*)} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y). \quad (4.12)$$

Оказывается, что π^* является здесь минимизатором. Предположим противное, т.е. что существует более оптимальный план $\pi' \in \Pi(\mathbb{P}, \pi_y^*)$, удовлетворяющий

$$\int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi'(x, y) < \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi^*(x, y) \quad (= \text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})). \quad (4.13)$$

Этот план по определению $\Pi(\mathbb{P}, \pi_y^*)$ удовлетворяет $\pi'_x = \mathbb{P}$ и $\pi'_y = \pi_y^* \leq w\mathbb{Q}$, т.е. $\pi' \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$. Однако (4.13) противоречит тому факту, что π^* является IT планом в (4.6), поскольку π' даёт меньшую стоимость. Таким образом, $\min$ в (4.12) равен $\text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ в (4.6).

Благодаря [88, Теорема 1.33], задача (4.12) имеет то же минимальное значение, что и $\inf$ в задаче Монжа

$$\inf_{T \# \mathbb{P} = \pi_y^*} \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mathbb{P}(x), \quad (4.14)$$

т.е. для каждого $\varepsilon > 0$ существует $T_\varepsilon : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, удовлетворяющее $T_\varepsilon \# \mathbb{P} = \pi_y^*$ и $\int_{\mathcal{X}} c(x, T_\varepsilon(x)) d\mathbb{P}(x) < \text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) + \varepsilon$. Остаётся подставить это T_ε в задачу IT Монжа (4.5), чтобы получить стоимость переноса, ε -близкую к IT стоимости Канторовича (4.6). Поскольку это работает для всех $\varepsilon > 0$, мы заключаем, что $\min$ в (4.6) совпадает с $\inf$ в (4.5). $\square$

Доказательство теоремы 4.3.3. Пусть $\Pi(\mathbb{P}) \subset \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$ обозначает подмножество вероятностных мер $\pi \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y})$, удовлетворяющих $\pi_x = \mathbb{P}$. Рассмотрим функционал $I : \Pi(\mathbb{P}) \rightarrow \{0, +\infty\}$, определённый как $I(\pi) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{f \leq 0} \int_{\mathcal{Y}} f(y) d(w\mathbb{Q} - \pi_y)(y)$, где $\sup$ берётся по неположительным $f \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$. Из Леммы 4.10.1 имеем $I(\pi) = 0$, когда $\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$, и $I(\pi) = +\infty$ иначе. Действительно, если существует неположительная функция, удовлетворяющая $\int_{\mathcal{Y}} f(y) d(w\mathbb{Q} - \pi_y)(y) > 0$, то функция Cf (для $C > 0$) также удовлетворяет этому условию и даёт в C раз большее значение, которое стремится к ∞ при $C \rightarrow \infty$. Мы используем $I(\pi)$, чтобы включить правое ограничение $\pi_y \leq w\mathbb{Q}$ из $\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ в целевую функцию и получить задачу, эквивалентную (4.6):

$$\min_{\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) = \min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \left\{ \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) + I(\pi) \right\} =$$

$$\min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \left\{ \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) + \sup_{f \leq 0} \int_{\mathcal{Y}} f(y) d(w\mathbb{Q} - \pi_y)(y) \right\} =$$

$$\min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \sup_{f \leq 0} \left\{ \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) + \int_{\mathcal{Y}} f(y) d(w\mathbb{Q} - \pi_y)(y) \right\} = (4.15)$$

$$\sup_{f \leq 0} \min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \left\{ \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) + \int_{\mathcal{Y}} f(y) d(w\mathbb{Q} - \pi_y)(y) \right\} = (4.16)$$

$$\sup_{f \leq 0} \left\{ \min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \left\{ \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) - \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\pi_y(y) \right\} + w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \right\} =$$

$$\sup_{f \leq 0} \left\{ \min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \left\{ \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) - \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} f(y) d\pi(x, y) \right\} + w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \right\} = (4.17)$$

$$\sup_{f \leq 0} \left\{ \min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \left\{ \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(y|x) \underbrace{d\mathbb{P}(x)}_{=d\pi_x(x)} - \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\pi(y|x) \underbrace{d\mathbb{P}(x)}_{=d\pi_x(x)} \right\} + w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \right\} = (4.18)$$

$$\sup_{f \leq 0} \left\{ \min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \left\{ \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} (c(x, y) - f(y)) d\pi(y|x) d\mathbb{P}(x) \right\} + w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \right\} (4.19)$$

При переходе от (4.15) к (4.16) мы используем минимаксную теорему, чтобы поменять местами $\sup$ и $\min$ [112, Следствие 2]. Это возможно, поскольку выражение в (4.15) является билинейным функционалом по (π, f) . Таким образом, оно выпукло по π и вогнуто по f . В то же время $\Pi(\mathbb{P})$ является выпуклым и (слабо-*) компактным множеством. Последнее можно получить аналогично компактности $\Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$ в доказательстве Предложения 4.3.1. При переходе от (4.17) к (4.18) мы используем теорему о дезинтеграции меры, чтобы представить $d\pi(x, y)$ как маргинал $d\pi_x(x) = d\mathbb{P}(x)$ и семейство условных мер $d\pi(y|x)$ на $\mathcal{Y}$. Заметим, что

$$\min_{\pi \in \Pi(\mathbb{P})} \int_{\mathcal{X}} \int_{\mathcal{Y}} (c(x, y) - f(y)) d\pi(y|x) d\mathbb{P}(x) \geq \int_{\mathcal{X}} \underbrace{\min_{y \in \mathcal{Y}} (c(x, y) - f(y))}_{=f^c(x)} d\mathbb{P}(x). \quad (4.20)$$

С другой стороны, рассмотрим измеримую селекцию $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ для многозначного отображения $x \mapsto \arg \min_{y \in \mathcal{Y}} (c(x, y) - f(y))$. Она существует благодаря [126, Теорема 18.19]. В результате для детерминированного плана $\pi^T = [\text{id}, T] \# \mathbb{P}$ минимум в (4.20) действительно достигается. Поэтому (4.20)

является равенством. Объединяя (4.19) и (4.20), получаем

$$\text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) = \min_{\pi \in \Pi^w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c(x, y) d\pi(x, y) = \sup_{f \leq 0} \left\{ \int_{\mathcal{X}} f^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f(y) d\mathbb{Q}(y) \right\}. \quad (4.21)$$

Остаётся доказать, что $\sup$ в правой части на самом деле достигается на некоторой неположительной $f^* \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$. Пусть $f_1, f_2, \dots \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$ — последовательность неположительных функций, для которых $\lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \int_{\mathcal{X}} f_n^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f_n(y) d\mathbb{Q}(y) \right\} = \text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$. Для $g \in \mathcal{C}(\mathcal{X})$ определим $(c, -)$ -преобразование $g^{(c, -)}(y) \stackrel{\text{def}}{=} \min \left[\min_{x \in \mathcal{X}} (c(x, y) - g(x)), 0 \right] \leq 0$. Покажем, что оно даёт (равномерно) непрерывную неположительную функцию, удовлетворяющую $|g^{(c, -)}(y) - g^{(c, -)}(y')| \leq \omega(\|y - y'\|_{\mathcal{Y}})$, где ω — модуль непрерывности $c(x, y)$.

Сначала рассмотрим функцию $g^c(y) = \min_{x \in \mathcal{X}} \{c(x, y) - g(x)\}$ и докажем, что она равномерно непрерывна. Заметим, что поскольку непрерывная функция c определена на компактном множестве $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, она равномерно непрерывна на $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$. Следовательно, существует модуль непрерывности $\omega : [0, +\infty) \rightarrow [0, \infty)$ такой, что для всех $(x, y), (x', y') \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ выполнено

$$|c(x, y) - c(x', y')| \leq \omega(\|x - x'\|_{\mathcal{X}} + \|y - y'\|_{\mathcal{Y}}),$$

причём функция ω не убывает, непрерывна в нуле и удовлетворяет $\omega(0) = 0$. Пусть точка $x' \in \mathcal{X}$ доставляет минимум в определении $g^c(y')$. Тогда

$$g^c(y) - g^c(y') \leq (c(x', y) - g(x')) - (c(x', y') - g(x')) = c(x', y) - c(x', y') \leq \omega(d_{\mathcal{Y}}(y, y')).$$

Меняя y и y' местами, получаем $|g^c(y) - g^c(y')| \leq \omega(d_{\mathcal{Y}}(y, y'))$. Следовательно, функция g^c равномерно непрерывна.

По определению $g^{(c, -)}(y) = \min\{g^c(y), 0\}$. Поскольку функция $t \mapsto \min\{t, 0\}$ является 1-липшицевой, имеем

$$\left| g^{(c, -)}(y) - g^{(c, -)}(y') \right| = \left| \min\{g^c(y), 0\} - \min\{g^c(y'), 0\} \right| \leq |g^c(y) - g^c(y')| \leq \omega(d_{\mathcal{Y}}(y, y')).$$

Таким образом, функция $g^{(c, -)}$ также равномерно непрерывна.

Прежде чем продолжить, выделим два важных факта, которые мы будем использовать ниже. Рассмотрим любые $g \in \mathcal{C}(\mathcal{X})$ и $0 \geq h \in \mathcal{C}(\mathcal{Y})$, удовлетворяющие $g(x) + h(y) \leq c(x, y)$ для всех $(x, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$. Во-первых, из определения $(c, -)$ -преобразования видно, что для всех $(x, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ выполняется $0 \geq g^{(c, -)}(y) \geq h$ и

$$g(x) + h(y) \leq g(x) + g^{(c, -)}(y) \leq c(x, y), \quad (4.22)$$

т.е. $(g, g^{(c,-)})$ также удовлетворяет предположениям для (g, h) . Во-вторых, из определения c -преобразования следует, что $h^c \geq g$ и

$$g(x) + h(y) \leq h^c(x) + h(y) \leq c(x, y), \quad (4.23)$$

т.е. пара (h^c, h) удовлетворяет тем же предположениям, что и (g, h) .

Теперь вернёмся к нашей последовательности $f_1, f_2, \dots$. Для каждого n и $(x, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ имеем $f_n^c(x) + f_n(y) \leq c(x, y)$. Далее,

$$f_n^c(x) + f_n(y) \leq f_n^c(x) + (f_n^c)^{(c,-)}(y) \leq ((f_n^c)^{(c,-)})^c(x) + (f_n^c)^{(c,-)}(y) [\leq c(x, y)], \quad (4.24)$$

где сначала мы использовали (4.22) с $(g, h) = (f_n^c, f_n)$, а затем использовали (4.23) с $(g, h) = (f_n^c, (f_n^c)^{(c,-)})$. В частности, имеем $f_n^c \leq ((f_n^c)^{(c,-)})^c$ и $f_n \leq (f_n^c)^{(c,-)}$. Суммируя эти неравенства с весами 1 и w , для всех $(x, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ получаем

$$f_n^c(x) + w f_n(y) \leq ((f_n^c)^{(c,-)})^c(x) + w (f_n^c)^{(c,-)}(y) = h_n^c(x) + w h_n(y), \quad (4.25)$$

где для удобства обозначаем $h_n \stackrel{\text{def}}{=} (f_n^c)^{(c,-)}$. Интегрируя (4.25) по $(x, y) \sim \mathbb{P} \times \mathbb{Q}$, получаем

$$\int_{\mathcal{X}} f_n^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f_n(y) d\mathbb{Q}(y) \leq \int_{\mathcal{X}} h_n^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} h_n(y) d\mathbb{Q}(y). \quad (4.26)$$

Это означает, что потенциал h_n даёт не меньшее значение двойственной целевой функции, чем f_n . В результате последовательность $h_1, h_2, \dots$ также удовлетворяет $\lim_{n \rightarrow \infty} \{ \int_{\mathcal{X}} h_n^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} h_n(y) d\mathbb{Q}(y) \} = \text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q})$. Теперь забудем про $f_1, f_2, \dots$ и будем работать с $h_1, h_2, \dots$.

Все функции h_n равностепенно непрерывны, поскольку имеют один и тот же модуль непрерывности ω , так как по определению являются $(c, -)$ -преобразованиями. Пусть $v_n(y) \stackrel{\text{def}}{=} h_n(y) - \max_{y' \in \mathcal{Y}} h_n(y')$. Эта функция также неположительна и равномерно непрерывна. Заметим, что v_n даёт не меньшее значение двойственной целевой функции, чем h_n . Это следует из условия $w \geq 1$ и определения $v_n^c = h_n^c + \max_{y' \in \mathcal{Y}} h_n(y')$, что влечет $h_n^c(x) + w h_n(y) \leq v_n^c(x) + w v_n(y)$. В то же время все v_n равномерно ограничены. Действительно, пусть $y_n \in \mathcal{Y}$ — любая точка, в которой $v_n(y_n) = 0$. Тогда для всех $y \in \mathcal{Y}$ выполняется $|v_n(y)| = |v_n(y) - v_n(y_n)| \leq \omega(\|y - y_n\|_{\mathcal{Y}}) \leq \omega(\text{diam}(\mathcal{Y}))$. Поэтому по теореме Арцела–Асколи существует подпоследовательность v_{n_k} , равномерно сходящаяся к некоторой $f^* \in \mathcal{C}(Y)$. Поскольку все $v_{n_k} \leq 0$, также выполняется $f^* \leq 0$. Остаётся проверить, что f^* достигает супремума в (4.21).

Для начала докажем, что $v_{n_k}^c$ равномерно сходится к $(f^*)^c$. Обозначим $\|v_{n_k} - f^*\|_\infty = \varepsilon_k$. Для всех $(x, y) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ имеем

$$c(x, y) - f^*(y) - \varepsilon_k \leq c(x, y) - v_{n_k}(y) \leq c(x, y) - f^*(y) + \varepsilon_k \quad (4.27)$$

поскольку $|v_{n_k}(y) - f^*(y)| \leq \|v_{n_k} - f^*\|_\infty = \varepsilon_k$. Беря $\min_{y \in \mathcal{Y}}$ в (4.27), получаем $(f^*)^c(x) - \varepsilon_k \leq v_{n_k}^c(x) \leq (f^*)^c(x) + \varepsilon_k$. Поскольку это выполняется для всех $x \in \mathcal{X}$, мы доказали, что $\|v_{n_k}^c - (f^*)^c\|_\infty \leq \varepsilon_k$. Это означает, что $v_{n_k}^c$ также равномерно сходится к $(f^*)^c$, поскольку $\lim_{k \rightarrow \infty} \|v_{n_k} - f^*\|_\infty = \lim_{k \rightarrow \infty} \varepsilon_k = 0$. Благодаря равномерной сходимости имеем

$$\begin{aligned} \text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) &= \lim_{k \rightarrow \infty} \left\{ \int_{\mathcal{X}} (v_{n_k})^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} v_{n_k}(y) d\mathbb{Q}(y) \right\} = \\ &= \int_{\mathcal{X}} (f^*)^c(x) d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f^*(y) d\mathbb{Q}(y). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Мы заключаем, что f^* является искомым максимизатором (4.21). $\square$

Библиографическое замечание. Существует формула двойственности для частичного ОТ (4.4), см. [121, §2], которая может быть сведена к формуле двойственности для задачи IT (4.6). Однако результирующую формулу трудно соотнести с нашей (4.7). Мы не знаем, как вывести одну формулу из другой. Более важно, что непонятно, как превратить их формулу в вычислительный алгоритм. Наша формула даёт возможность сделать это с помощью переформулировки двойственной задачи как задачи поиска седловой точки, что в настоящее время становится стандартным для нейросетевого ОТ, см. [3; 63; 64]. Мы дадим дополнительные комментарии после следующего доказательства. Вторая часть вывода нашей формулы (существование максимизатора f^*) вдохновлена [88, Предложение 1.11], где показывается существование максимизаторов для стандартного ОТ (4.2).

Доказательство теоремы 4.3.4. По определению f^* имеем

$$\min_{T: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} \mathcal{L}(f^*, T) = \min_{T: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} \int_{\mathcal{X}} \{c(x, T(x)) - f^*(T(x))\} d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f^*(y) d\mathbb{Q}(y) \leq (4.29)$$

$$\int_{\mathcal{X}} \{c(x, T^*(x)) - f^*(T^*(x))\} d\mathbb{P}(x) + w \int_{\mathcal{Y}} f^*(y) d\mathbb{Q}(y) = (4.30)$$

$$\int_{\mathcal{X}} c(x, T^*(x)) d\mathbb{P}(x) - \int_{\mathcal{Y}} f^*(y) d[T^* \# \mathbb{P}](y) + w \int_{\mathcal{Y}} f^*(y) d\mathbb{Q}(y) =$$

$$\text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}) + \underbrace{\int_y f^*(y) d[w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P}](y)}_{\leq 0 \text{ (Лемма 4.10.1)}} \leq \text{Cost}_w(\mathbb{P}, \mathbb{Q}). \quad (4.31)$$

Это означает, что все неравенства в (4.29)-(4.31) являются равенствами. Поскольку (4.29) равно (4.30), имеем $T^* \in \arg \min_{T: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}} \mathcal{L}(f^*, T)$. $\square$

Библиографическое замечание (теоретическая часть). Идея теоремы похожа на идею [64, Лемма 4.2], [3, Lemma 4], [63, Theorem 2], где доказывается, что соответствующие целевые функции поиска седловой точки $\max_f \min_T \mathcal{L}(f, T)$ могут использоваться для восстановления оптимального T^* из *некоторых* оптимальных седловых точек (f^*, T^*) . Наш функционал (4.9) отличается, и у нас есть ограничение $f \leq 0$. Здесь мы снова подчёркиваем, что не для всех седловых точек (f^*, T^*) обязательно выполняется, что T^* является IT отображением, см. обсуждение в ограничениях (§4.8).

Библиографическое замечание (алгоритмическая часть). Чтобы вывести нашу задачу оптимизации поиска седловой точки (4.9), мы используем разложение c -преобразования, предложенное в [150] в контексте Wasserstein GANs и позже исследованное в [3; 13; 63; 64; 151] в контексте обучения OT отображений. То есть полученный нами Алгоритм 2 пересекается со стандартным нейросетевым методом OT, см., например, Алгоритм 1 в статье [A1]. Отличие заключается в ограничении $f \leq 0$ и дополнительном множителе $w \geq 1$.

Доказательство предложения 4.9.1. Из доказательства Теоремы 4.3.4 видно, что $\int_y f^*(y) d[w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P}](y) = 0$. Напомним, что $f^* \leq 0$. Это означает, что $f(y) = 0$ для $y \in \text{Supp}(w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P})$. Действительно, предположим противное, т.е. что существует некоторое $y \in \text{Supp}(w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P})$, для которого $f(y) < 0$. В этом случае то же самое выполняется для всех y' в малой окрестности U точки y , поскольку f непрерывна. В то же время $\int_y f^*(y) d[w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P}](y) \leq \int_U f^*(y) d[w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P}](y) < 0$, поскольку $[w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P}]$ является неотрицательной мерой, удовлетворяющей $[w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P}](U) > 0$ по определению носителя. Это противоречие. Чтобы завершить доказательство, остаётся заметить, что $\text{Supp}(\mathbb{Q}) \setminus \text{Supp}(T^*\sharp\mathbb{P}) \subset \text{Supp}(w\mathbb{Q} - T^*\sharp\mathbb{P})$, т.е. $f(y) = 0$ также для $y \in \text{Supp}(\mathbb{Q}) \setminus \text{Supp}(T^*\sharp\mathbb{P})$. $\square$

Библиографическое замечание. Если рассматривать функционал $\mathcal{L}(f, T)$ в (4.10) как лагранжиан, утверждение 4.9.1 можно рассматривать как следствие дополняющей нежёсткости в условиях Каруша-Куна-Таккера [152].

Заключение

Первые численные методы ОТ были ориентированы на работу с данными, описываемыми дискретными вероятностными распределениями. Такие методы позволяют находить сопоставления между элементами конечных выборок, однако сами по себе не задают правило преобразования, применимое к новым объектам. Этот факт существенно сужает класс задач математического моделирования, к которым могут быть применены такие методы и ограничивает их использование в задачах генеративного моделирования и преобразования данных. Для решения таких задач в последние годы стали активно использоваться непрерывные методы ОТ, которые позволяют решать задачи ОТ для непрерывных вероятностных распределений, доступных по выборкам.

Однако существующие непрерывные методы ОТ теряют свою эффективность при работе с данными, содержащими различного рода неточности, такие как выбросы. Это мотивировало разработку методов на основе обобщенных формулировок ОТ, а именно, частичного и несбалансированного ОТ, являющихся устойчивыми к неточностям в данных. При этом до сих пор отсутствовали *непрерывные* методы частичного ОТ, а также методы решения задачи несбалансированного ОТ барицентра. В то же время существовавшие ранее непрерывные методы несбалансированного ОТ либо не имели теоретических обоснований, либо использовали сложную минимаксную оптимизацию, которая на практике может быть нестабильным и вычислительно затратным процессом.

В данной диссертации представлены новые масштабируемые численные методы непрерывного *обобщенного* ОТ, направленные на решение указанных проблем. Во-первых, предложен неминимаксный алгоритм для вычисления несбалансированных ОТ отображений между непрерывными вероятностными распределениями (Глава 2). Разработанный метод позволяет находить решения задачи несбалансированного ОТ в пространствах высокой размерности без сложной минимаксной оптимизации и тяжелой нейросетевой параметризации. В результате, метод может применяться к задачам математического моделирования, в которых существующие численные методы УОТ работают неудовлетворительно или неприменимы, к примеру, ввиду высокой вычислительной сложности.

Кроме того, в диссертации предложены новые алгоритмы для вычисления (полу)несбалансированных ОТ барицентров семейств непрерывных распределений (Глава 3) и (полу)частичных ОТ отображений непрерывных вероятностных распределений (Глава 4). Важно отметить, что эти методы представляют собой *первые* подходы к соответствующим задачам, способные эффективно работать с непрерывными распределениями общего вида. Таким образом, разработанные алгоритмы закрывают важный пробел в области вычислительных методов обобщенного ОТ.

Разработанные численные методы и алгоритмы реализованы в виде комплекса проблемно-ориентированных программ для решения задач обобщенного ОТ. Комплекс обеспечивает обучение параметрических моделей, построение несбалансированных и (полу)частичных ОТ отображений и (полу)несбалансированных ОТ барицентров, а также оценку полученных решений. Программный код исследования публично доступен в репозитории автора на GitHub: <https://github.com/milenagazdieva>.

Перспективными направлениями дальнейших исследований являются разработка неминимаксного алгоритма для вычисления несбалансированного ОТ барицентра, а также эффективного неминимаксного алгоритма несбалансированного ОТ для функций стоимости общего вида.

Публикации автора по теме диссертации

В изданиях из списка ВАК РФ и приравненных к ним

- A1 **Gazdieva, M.**, Mokrov, P., Rout, L., Korotin, A., Kravchenko, A., Filippov, A., & Burnaev, E. An optimal transport perspective on unpaired image super-resolution // Journal of Optimization Theory and Applications. — 2025. — Vol. 207. — Art. 40. **Scopus (Q1)**.
- A2 **Газдиева, М.**, Коротин, А. Обзор минимаксных параметрических методов вычисления оптимальных транспортных отображений. // Труды Института Системного Анализа Российской Академии Наук. — 2026. — Т. 76, № 3. — С. 16-23. **ВАК (K2)**.

В сборниках трудов конференций

- A3 **Gazdieva, M.**, Asadulaev, A., Burnaev, E., & Korotin, A. Light unbalanced optimal transport // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2024. — Vol. 37. — P. 93907-93938. **Scopus (A*)**.
- A4 **Gazdieva, M.**, Choi, J., Kolesov, A., Choi, J., Mokrov, P., & Korotin, A. Robust Barycenter Estimation using Semi-Unbalanced Neural Optimal Transport // International Conference on Learning Representations. — 2025. [Electronic resource] URL: <https://openreview.net/pdf?id=CI5Cj0vktS> (date of reference 20.08.2025). **Scopus (A*)**.
- A5 **Gazdieva, M.**, Korotin, A., Selikhanovych, D., & Burnaev, E. Extremal domain translation with neural optimal transport // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2023. — Vol. 36. — P. 40381-40413. **Scopus (A*)**.

Список литературы

1. *Arjovsky, M.* Wasserstein generative adversarial networks / M. Arjovsky, S. Chintala, L. Bottou // International conference on machine learning. — PMLR. 2017. — P. 214—223.
2. Large Scale Optimal Transport and Mapping Estimation / V. Seguy [et al.] // International Conference on Learning Representations. — 2018.
3. *Korotin, A.* Neural Optimal Transport / A. Korotin, D. Selikhanovych, E. Burnaev // International Conference on Learning Representations. — 2023. — URL: <https://openreview.net/forum?id=d8CBRIWNkqH>.
4. *Korotin, A.* Kernel Neural Optimal Transport / A. Korotin, D. Selikhanovych, E. Burnaev // International Conference on Learning Representations. — 2023. — URL: https://openreview.net/forum?id=Zuc_MHtUma4.
5. Scalable Computation of Monge Maps with General Costs / J. Fan [et al.] // ICLR Workshop on Deep Generative Models for Highly Structured Data. — 2021.
6. *Kantorovich, L. V.* On the translocation of masses / L. V. Kantorovich // Dokl. Akad. Nauk. USSR (NS). Vol. 37. — 1942. — P. 199—201.
7. *Cuturi, M.* Sinkhorn distances: Lightspeed computation of optimal transport / M. Cuturi // Advances in neural information processing systems. Vol. 26. — 2013. — P. 2292—2300. — URL: https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2013/file/af21d0c97db2e27e13572cbf59eb343d-Paper.pdf.
8. Computational optimal transport: With applications to data science / G. Peyré, M. Cuturi, [et al.] // Foundations and Trends® in Machine Learning. — 2019. — Vol. 11, no. 5/6. — P. 355—607.
9. Improved training of Wasserstein GANs / I. Gulrajani [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2017. — P. 5767—5777.
10. *Genevay, A.* Learning generative models with sinkhorn divergences / A. Genevay, G. Peyré, M. Cuturi // International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. — PMLR. 2018. — P. 1608—1617.

11. Optimal transport mapping via input convex neural networks / A. Makkuva [et al.] // International Conference on Machine Learning. — PMLR. 2020. — P. 6672—6681.
12. Wasserstein-2 Generative Networks / A. Korotin [et al.] // International Conference on Learning Representations. — 2021. — URL: https://openreview.net/forum?id=bEoxzW_EXsa.
13. Do neural optimal transport solvers work? a continuous wasserstein-2 benchmark / A. Korotin [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2021. — Vol. 34. — P. 14593—14605.
14. Energy-Guided Continuous Entropic Barycenter Estimation for General Costs / A. Kolesov [et al.] // The Thirty-eighth Annual Conference on Neural Information Processing Systems. — 2024.
15. Estimating Barycenters of Distributions with Neural Optimal Transport / A. Kolesov [et al.] // Forty-first International Conference on Machine Learning. — 2024.
16. *Agueh, M.* Barycenters in the Wasserstein space / M. Agueh, G. Carlier // SIAM Journal on Mathematical Analysis. — 2011. — Vol. 43, no. 2. — P. 904—924.
17. *Figalli, A.* The optimal partial transport problem / A. Figalli // Archive for rational mechanics and analysis. — 2010. — Vol. 195, no. 2. — P. 533—560.
18. Scaling algorithms for unbalanced optimal transport problems / L. Chizat [et al.] // Mathematics of computation. — 2018. — Vol. 87, no. 314. — P. 2563—2609.
19. *Chapel, L.* Partial optimal transport with applications on positive-unlabeled learning / L. Chapel, M. Z. Alaya, G. Gasso // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2020. — Vol. 33. — P. 2903—2913.
20. *Séjourné, T.* Unbalanced optimal transport, from theory to numerics / T. Séjourné, G. Peyré, F.-X. Vialard // Handbook of Numerical Analysis. — 2023. — Vol. 24. — P. 407—471.
21. *Yang, K. D.* Scalable Unbalanced Optimal Transport using Generative Adversarial Networks / K. D. Yang, C. Uhler // International Conference on Learning Representations. — 2018.

22. *Choi, J.* Generative modeling through the semi-dual formulation of unbalanced optimal transport / J. Choi, J. Choi, M. Kang // Advances in Neural Information Processing Systems. Vol. 36. — 2023.
23. Neural Unbalanced Optimal Transport via Cycle-Consistent Semi-Couplings / F. Lücke [et al.] // NeurIPS 2022 AI for Science: Progress and Promises. — 2022.
24. GENOT: Entropic (Gromov) Wasserstein flow matching with applications to single-cell genomics / D. Klein [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2024. — Vol. 37. — P. 103897–103944.
25. *Bonneel, N.* Spot: sliced partial optimal transport / N. Bonneel, D. Coeurjolly // ACM Transactions on Graphics (TOG). — 2019. — Vol. 38, no. 4. — P. 1–13.
26. Improving mini-batch optimal transport via partial transportation / K. Nguyen [et al.] // International conference on machine learning. — PMLR. 2022. — P. 16656–16690.
27. On Barycenter Computation: Semi-Unbalanced Optimal Transport-based Method on Gaussians / N.-H. Nguyen [et al.] // arXiv preprint arXiv:2410.08117. — 2024.
28. *Chizat, L.* Unbalanced optimal transport: Models, numerical methods, applications : PhD thesis / Chizat Lénaïc. — Université Paris sciences et lettres, 2017.
29. *Villani, C.* Optimal transport: old and new. Vol. 338 / C. Villani. — Springer, 2009. — (Grundlehren der mathematischen Wissenschaften).
30. Unbalanced minibatch optimal transport; applications to domain adaptation / K. Fatras [et al.] // International Conference on Machine Learning. — PMLR. 2021. — P. 3186–3197.
31. Continuous regularized wasserstein barycenters / L. Li [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2020. — Vol. 33. — P. 17755–17765.
32. Unbalancedness in Neural Monge Maps Improves Unpaired Domain Translation / L. Eyring [et al.] // The Twelfth International Conference on Learning Representations. — 2024.

33. *Liero, M.* Optimal entropy-transport problems and a new Hellinger–Kantorovich distance between positive measures / M. Liero, A. Mielke, G. Savaré // *Inventiones mathematicae*. — 2018. — Vol. 211, no. 3. — P. 969–1117.
34. Are GANs created equal? a large-scale study / M. Lucic [et al.] // *Advances in neural information processing systems*. — 2018. — P. 700–709.
35. On robust optimal transport: Computational complexity and barycenter computation / K. Le [et al.] // *Advances in Neural Information Processing Systems*. — 2021. — Vol. 34. — P. 21947–21959.
36. On Robust Wasserstein Barycenter: The Model and Algorithm / X. Wang [et al.] // *Proceedings of the 2024 SIAM International Conference on Data Mining (SDM)*. — SIAM. 2024. — P. 235–243.
37. Wasserstein Iterative Networks for Barycenter Estimation / A. Korotin [et al.] // *Advances in Neural Information Processing Systems* / ed. by A. H. Oh [et al.]. — 2022. — URL: <https://openreview.net/forum?id=GiEnzxTnaMN>.
38. *Fan, J.* Scalable Computations of Wasserstein Barycenter via Input Convex Neural Networks / J. Fan, A. Taghvaei, Y. Chen // *Proceedings of the 38th International Conference on Machine Learning*. Vol. 139 / ed. by M. Meila, T. Zhang. — PMLR, 18–24 Jul/2021. — P. 1571–1581. — (Proceedings of Machine Learning Research). — URL: <https://proceedings.mlr.press/v139/fan21d.html>.
39. On scalable and efficient computation of large scale optimal transport / Y. Xie [et al.] // *International Conference on Machine Learning*. — PMLR. 2019. — P. 6882–6892.
40. Energy-guided Entropic Neural Optimal Transport / P. Mokrov [et al.] // *The Twelfth International Conference on Learning Representations*. — 2024.
41. Entropic neural optimal transport via diffusion processes / N. Gushchin [et al.] // *Advances in Neural Information Processing Systems*. — 2023.
42. Deep generative learning via schrödinger bridge / G. Wang [et al.] // *International Conference on Machine Learning*. — PMLR. 2021. — P. 10794–10804.
43. Diffusion Schrödinger bridge with applications to score-based generative modeling / V. De Bortoli [et al.] // *Advances in Neural Information Processing Systems*. — 2021. — Vol. 34. — P. 17695–17709.

44. *Chen, T.* Likelihood Training of Schrödinger Bridge using Forward-Backward SDEs Theory / T. Chen, G.-H. Liu, E. Theodorou // International Conference on Learning Representations. — 2021.
45. Learning single-cell perturbation responses using neural optimal transport / C. Bunne [et al.] // Nature Methods. — 2023. — Vol. 20, no. 11. — P. 1759—1768.
46. *Koshizuka, T.* Neural Lagrangian Schrödinger Bridge: Diffusion Modeling for Population Dynamics / T. Koshizuka, I. Sato // The Eleventh International Conference on Learning Representations. — 2023.
47. Solving schrödinger bridges via maximum likelihood / F. Vargas [et al.] // Entropy. — 2021. — Vol. 23, no. 9. — P. 1134.
48. Continuous Wasserstein-2 Barycenter Estimation without Minimax Optimization / A. Korotin [et al.] // International Conference on Learning Representations. — 2021.
49. *Balaji, Y.* Robust optimal transport with applications in generative modeling and domain adaptation / Y. Balaji, R. Chellappa, S. Feizi // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2020. — Vol. 33. — P. 12934—12944.
50. *Genevay, A.* Entropy-Regularized Optimal Transport for Machine Learning : Theses / Genevay Aude. — PSL University, 03/2019. — URL: <https://theses.hal.science/tel-02319318>.
51. Entropic optimal transport between unbalanced Gaussian measures has a closed form / H. Janati [et al.] // Advances in neural information processing systems. — 2020. — Vol. 33. — P. 10468—10479.
52. *Korotin, A.* Kantorovich Strikes Back! Wasserstein GANs are not Optimal Transport? / A. Korotin, A. Kolesov, E. Burnaev // Thirty-sixth Conference on Neural Information Processing Systems Datasets and Benchmarks Track. — 2022.
53. Decentralize and randomize: Faster algorithm for Wasserstein barycenters / P. Dvurechenskii [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. Vol. 31. — 2018. — P. 10760—10770.
54. *Xie, Y.* An accelerated stochastic algorithm for solving the optimal transport problem / Y. Xie, Y. Luo, X. Huo // arXiv preprint arXiv:2203.00813. — 2022.

55. On unbalanced optimal transport: Gradient methods, sparsity and approximation error / Q. M. Nguyen [et al.] // Journal of Machine Learning Research. — 2023. — Vol. 24, no. 384. — P. 1–41.
56. Learning with minibatch Wasserstein: asymptotic and gradient properties / K. Fatras [et al.] // AISTATS 2020-23rd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. Vol. 108. — 2020. — P. 1–20.
57. *Pooladian, A.-A.* Entropic estimation of optimal transport maps / A.-A. Pooladian, J. Niles-Weed // arXiv preprint arXiv:2109.12004. — 2021.
58. *Hütter, J.-C.* Minimax estimation of smooth optimal transport maps / J.-C. Hütter, P. Rigollet // The Annals of Statistics. — 2021. — Vol. 49, no. 2.
59. *Deb, N.* Rates of estimation of optimal transport maps using plug-in estimators via barycentric projections / N. Deb, P. Ghosal, B. Sen // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2021. — Vol. 34. — P. 29736–29753.
60. Plugin estimation of smooth optimal transport maps / T. Manole [et al.] // The Annals of Statistics. — 2024. — Vol. 52, no. 3. — P. 966–998.
61. *Rigollet, P.* On the sample complexity of entropic optimal transport / P. Rigollet, A. J. Stromme // The Annals of Statistics. — 2025. — Vol. 53, no. 1. — P. 61–90.
62. Neural Optimal Transport with General Cost Functionals / A. Asadulaev [et al.] // The Twelfth International Conference on Learning Representations. — 2024.
63. Neural Monge Map estimation and its applications / J. Fan [et al.] // Transactions on Machine Learning Research. — 2023. — URL: <https://openreview.net/forum?id=2mZSlQscj3> ; Featured Certification.
64. *Rout, L.* Generative Modeling with Optimal Transport Maps / L. Rout, A. Korotin, E. Burnaev // International Conference on Learning Representations. — 2022.
65. *Daniels, M.* Score-based generative neural networks for large-scale optimal transport / M. Daniels, T. Maunu, P. Hand // Advances in neural information processing systems. — 2021. — Vol. 34. — P. 12955–12965.

66. *Korotin, A.* Light Schrödinger Bridge / A. Korotin, N. Gushchin, E. Burnaev // The Twelfth International Conference on Learning Representations. — 2024.
67. Light and optimal schrödinger bridge matching / N. Gushchin [et al.] // Forty-first International Conference on Machine Learning. — 2024.
68. Unbalanced optimal transport through non-negative penalized linear regression / L. Chapel [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2021. — Vol. 34. — P. 23270—23282.
69. On unbalanced optimal transport: An analysis of sinkhorn algorithm / K. Pham [et al.] // International Conference on Machine Learning. — PMLR. 2020. — P. 7673—7682.
70. Flow Matching for Generative Modeling / Y. Lipman [et al.] // 11th International Conference on Learning Representations, ICLR 2023. — 2023.
71. A high-quality robust diffusion framework for corrupted dataset / Q. Dao [et al.] // European Conference on Computer Vision. — Springer. 2024. — P. 107—123.
72. Building the Bridge of Schrödinger: A Continuous Entropic Optimal Transport Benchmark / N. Gushchin [et al.] // Thirty-seventh Conference on Neural Information Processing Systems Datasets and Benchmarks Track. — 2023.
73. *Shalev-Shwartz, S.* Understanding machine learning: From theory to algorithms / S. Shalev-Shwartz, S. Ben-David. — Cambridge university press, 2014.
74. *Taghvaei, A.* 2-Wasserstein Approximation via Restricted Convex Potentials with Application to Improved Training for GANs / A. Taghvaei, A. Jalali // arXiv preprint arXiv:1902.07197. — 2019.
75. *Mohri, M.* Foundations of machine learning / M. Mohri, A. Rostamizadeh, A. Talwalkar. — MIT press, 2018.
76. *Rockafellar, R.* Duality and stability in extremum problems involving convex functions / R. Rockafellar // Pacific Journal of Mathematics. — 1967. — Vol. 21, no. 1. — P. 167—187.
77. Kantorovich duality for general transport costs and applications / N. Gozlan [et al.] // Journal of Functional Analysis. — 2017. — Vol. 273, no. 11. — P. 3327—3405.

78. *Agrawal, R.* Optimal bounds between f-divergences and integral probability metrics / R. Agrawal, T. Horel // Journal of Machine Learning Research. — 2021. — Vol. 22, no. 128. — P. 1—59.
79. Approximation by finite mixtures of continuous density functions that vanish at infinity / T. T. Nguyen [et al.] // Cogent Mathematics & Statistics. — 2020. — Vol. 7, no. 1. — P. 1750861.
80. *Hardy, G. H.* Inequalities / G. H. Hardy, J. E. Littlewood, G. Pólya. — Cambridge university press, 1952.
81. Toward multimodal image-to-image translation / J.-Y. Zhu [et al.] // Advances in neural information processing systems. — 2017. — Vol. 30.
82. High-resolution image synthesis with latent diffusion models / R. Rombach [et al.] // Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. — 2022. — P. 10684—10695.
83. *Pidhorskyi, S.* Adversarial latent autoencoders / S. Pidhorskyi, D. A. Adjeroh, G. Doretto // Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. — 2020. — P. 14104—14113.
84. *Karras, T.* A style-based generator architecture for generative adversarial networks / T. Karras, S. Laine, T. Aila // Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. — 2019. — P. 4401—4410.
85. *Kingma, D. P.* Adam: A method for stochastic optimization / D. P. Kingma, J. Ba // arXiv preprint arXiv:1412.6980. — 2014.
86. Pot: Python optimal transport / R. Flamary [et al.] // The Journal of Machine Learning Research. — 2021. — Vol. 22, no. 1. — P. 3571—3578.
87. *Choi, J.* Analyzing and Improving Optimal-Transport-based Adversarial Networks / J. Choi, J. Choi, M. Kang // The Twelfth International Conference on Learning Representations. — 2024.
88. *Santambrogio, F.* Optimal transport for applied mathematicians. Vol. 87 / F. Santambrogio. — Birkhäuser Cham, 2015. — 353 p. — (Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications).
89. *Chizat, L.* Doubly Regularized Entropic Wasserstein Barycenter / L. Chizat // Foundations of Computational Mathematics. — 2025. — P. 1—38.

90. Sinkhorn divergences for unbalanced optimal transport / T. Séjourné [et al.] // arXiv preprint arXiv:1910.12958. — 2019.
91. *Backhoff-Veraguas, J.* Existence, duality, and cyclical monotonicity for weak transport costs / J. Backhoff-Veraguas, M. Beiglböck, G. Pammer // Calculus of Variations and Partial Differential Equations. — 2019. — Vol. 58, no. 6. — P. 1—28.
92. *Friesecke, G.* Barycenters for the Hellinger–Kantorovich Distance Over $\mathbb{R}^d$ / G. Friesecke, D. Matthes, B. Schmitzer // SIAM Journal on Mathematical Analysis. — 2021. — Vol. 53, no. 1. — P. 62—110.
93. *Chung, N.-P.* Barycenters in the Hellinger–Kantorovich space / N.-P. Chung, M.-N. Phung // Applied Mathematics & Optimization. — 2021. — Vol. 84, no. 2. — P. 1791—1820.
94. *Bonafini, M.* Hellinger–Kantorovich barycenter between Dirac measures / M. Bonafini, O. Minevich, B. Schmitzer // ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations. — 2023. — Vol. 29. — P. 19.
95. *Forsythe, G. E.* Von Neumann’s comparison method for random sampling from the normal and other distributions / G. E. Forsythe // Mathematics of Computation. — 1972. — Vol. 26, no. 120. — P. 817—826.
96. *Cuturi, M.* Fast computation of Wasserstein barycenters / M. Cuturi, A. Doucet // International conference on machine learning. — PMLR. 2014. — P. 685—693.
97. *Amos, B.* On amortizing convex conjugates for optimal transport / B. Amos // The Eleventh International Conference on Learning Representations. — 2023.
98. Simulation-Free Schrödinger Bridges via Score and Flow Matching / A. Y. Tong [et al.] // International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. — PMLR. 2024. — P. 1279—1287.
99. Diffusion Schrödinger bridge matching / Y. Shi [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2024. — Vol. 36.
100. Adversarial Schrödinger Bridge Matching / N. Gushchin [et al.] // The Thirty-eighth Annual Conference on Neural Information Processing Systems. — 2024.

101. *Liu, X.* Flow Straight and Fast: Learning to Generate and Transfer Data with Rectified Flow / X. Liu, C. Gong, qiang liu // The Eleventh International Conference on Learning Representations. — 2023.
102. Improving and generalizing flow-based generative models with minibatch optimal transport / A. Tong [et al.] // Transactions on Machine Learning Research. — 2024. — URL: <https://openreview.net/forum?id=CD9Snc73AW> ; Expert Certification.
103. Optimal Flow Matching: Learning Straight Trajectories in Just One Step / N. Kornilov [et al.] // The Thirty-eighth Annual Conference on Neural Information Processing Systems. — 2024.
104. GENOT: A Neural Optimal Transport Framework for Single Cell Genomics / D. Klein [et al.] // The Thirty-eighth Annual Conference on Neural Information Processing Systems. — 2024.
105. *Amos, B.* Input convex neural networks / B. Amos, L. Xu, J. Z. Kolter // International Conference on Machine Learning. Vol. 70. — PMLR. 2017. — P. 146—155.
106. A fixed-point approach to barycenters in Wasserstein space / P. C. Álvarez-Esteban [et al.] // Journal of Mathematical Analysis and Applications. — 2016. — Vol. 441, no. 2. — P. 744—762.
107. Tree-based diffusion schrödinger bridge with applications to wasserstein barycenters / M. Noble [et al.] // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2023. — Vol. 36. — P. 55193—55236.
108. Variational Wasserstein Barycenters with C-cyclical Monotonicity Regularization / J. Chi [et al.] // Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence. Vol. 37. — 2023. — P. 7157—7165.
109. Unbalanced multi-marginal optimal transport / F. Beier [et al.] // Journal of Mathematical Imaging and Vision. — 2023. — Vol. 65, no. 3. — P. 394—413.
110. *Manupriya, P.* MMD-Regularized Unbalanced Optimal Transport / P. Manupriya, S. Jagarlapudi, P. Jawanpuria // Transactions on Machine Learning Research. — 2024.
111. *Yang, Q.* Approximate algorithms for k-sparse Wasserstein Barycenter with outliers / Q. Yang, H. Ding // Proceedings of the Thirty-Third International Joint Conference on Artificial Intelligence. — 2024. — (IJCAI '24).

112. *Terkelsen, F.* Some minimax theorems / F. Terkelsen // *Mathematica Scandinavica*. — 1972. — Vol. 31, no. 2. — P. 405—413.
113. *Bertsekas, D.* Stochastic optimal control: the discrete-time case. Vol. 5 / D. Bertsekas, S. E. Shreve. — Athena Scientific, 1996.
114. Training Generative Adversarial Networks with Limited Data / T. Karras [et al.] // *Proc. NeurIPS*. — 2020.
115. Designing an encoder for stylegan image manipulation / O. Tov [et al.] // *ACM Transactions on Graphics (TOG)*. — 2021. — Vol. 40, no. 4. — P. 1—14.
116. *Nietert, S.* Outlier-Robust Optimal Transport: Duality, Structure, and Statistical Analysis / S. Nietert, Z. Goldfeld, R. Cummings // *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. — PMLR. 2022. — P. 11691—11719.
117. *Buze, M.* Constrained Hellinger–Kantorovich Barycenters: Least-Cost Soft and Conic Multimarginal Formulations / M. Buze // *SIAM Journal on Mathematical Analysis*. — 2025. — Vol. 57, no. 1. — P. 495—519.
118. Unpaired image-to-image translation using cycle-consistent adversarial networks / J.-Y. Zhu [et al.] // *Proceedings of the IEEE international conference on computer vision*. — 2017. — P. 2223—2232.
119. Unsupervised Image Super-Resolution Using Cycle-in-Cycle Generative Adversarial Networks / Y. Yuan [et al.] //. — 2018. — P. 814—823.
120. Mic2mic: using cycle-consistent generative adversarial networks to overcome microphone variability in speech systems / A. Mathur [et al.] // *Proceedings of the 18th international conference on information processing in sensor networks*. — 2019. — P. 169—180.
121. *Caffarelli, L. A.* Free boundaries in optimal transport and Monge-Ampère obstacle problems / L. A. Caffarelli, R. J. McCann // *Annals of mathematics*. — 2010. — P. 673—730.
122. Multimodal unsupervised image-to-image translation / X. Huang [et al.] // *Proceedings of the European conference on computer vision (ECCV)*. — 2018. — P. 172—189.
123. Generative adversarial nets / I. Goodfellow [et al.] // *Advances in neural information processing systems*. — 2014. — P. 2672—2680.

124. *Fefferman, C.* Testing the manifold hypothesis / C. Fefferman, S. Mitter, H. Narayanan // Journal of the American Mathematical Society. — 2016. — Vol. 29, no. 4. — P. 983—1049.
125. *Rockafellar, R. T.* Integral functionals, normal integrands and measurable selections / R. T. Rockafellar // Nonlinear operators and the calculus of variations. — Springer, 1976. — P. 157—207.
126. *Aliprantis, C. D.* Infinite Dimensional Analysis : tech. rep. / C. D. Aliprantis, K. C. Border ; Springer. — 2006.
127. Stochastic optimization for large-scale optimal transport / A. Genevay [et al.] // Advances in neural information processing systems. Vol. 29. — 2016. — P. 3440—3448.
128. Modeling Single-Cell Dynamics Using Unbalanced Parameterized Monge Maps / L. V. Eyring [et al.] // bioRxiv. — 2022.
129. *Alotaibi, A.* Deep generative adversarial networks for image-to-image translation: A review / A. Alotaibi // Symmetry. — 2020. — Vol. 12, no. 10. — P. 1705.
130. Real-world single image super-resolution: A brief review / H. Chen [et al.] // Information Fusion. — 2022. — Vol. 79. — P. 124—145.
131. Image inpainting based on deep learning: A review / X. Zhang [et al.] // Information Fusion. — 2022.
132. Neural style transfer: A review / Y. Jing [et al.] // IEEE transactions on visualization and computer graphics. — 2019. — Vol. 26, no. 11. — P. 3365—3385.
133. *Bézenac, E. de.* Cyclegan through the lens of (dynamical) optimal transport / E. de Bézenac, I. Ayed, P. Gallinari // Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases. Research Track: European Conference, ECML PKDD 2021, Bilbao, Spain, September 13–17, 2021, Proceedings, Part II 21. — Springer. 2021. — P. 132—147.
134. Parsing-Conditioned Anime Translation: A New Dataset and Method / Z. Li [et al.] // ACM Transactions on Graphics. — 2023. — Vol. 42, no. 3. — P. 1—14.
135. Stargan v2: Diverse image synthesis for multiple domains / Y. Choi [et al.] // Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. — 2020. — P. 8188—8197.

136. Deep Learning Face Attributes in the Wild / Z. Liu [et al.] // Proceedings of International Conference on Computer Vision (ICCV). — 12/2015.
137. Lsun: Construction of a large-scale image dataset using deep learning with humans in the loop / F. Yu [et al.] // arXiv preprint arXiv:1506.03365. — 2015.
138. *Yu, A.* Fine-grained visual comparisons with local learning / A. Yu, K. Grauman // Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. — 2014. — P. 192—199.
139. Describing textures in the wild / M. Cimpoi [et al.] // Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. — 2014. — P. 3606—3613.
140. Learning Style Compatibility for Furniture / D. Aggarwal [et al.] // German Conference on Pattern Recognition. — Springer. 2018. — P. 552—566.
141. GANs trained by a two time-scale update rule converge to a local nash equilibrium / M. Heusel [et al.] // Advances in neural information processing systems. — 2017. — P. 6626—6637.
142. Image-to-image translation: Methods and applications / Y. Pang [et al.] // IEEE Transactions on Multimedia. — 2021.
143. *Chen, X.* An Overview of Image-to-Image Translation Using Generative Adversarial Networks / X. Chen, C. Jia // International Conference on Pattern Recognition. — Springer. 2021. — P. 366—380.
144. *Ronneberger, O.* U-net: Convolutional networks for biomedical image segmentation / O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox // International Conference on Medical image computing and computer-assisted intervention. — Springer. 2015. — P. 234—241.
145. Deep residual learning for image recognition / K. He [et al.] // Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. — 2016. — P. 770—778.
146. *Liu, H.* Wasserstein GAN with quadratic transport cost / H. Liu, X. Gu, D. Samaras // Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision. — 2019. — P. 4832—4841.

147. Demystifying MMD GANs / M. Bińkowski [et al.] // International Conference on Learning Representations. — 2018.
148. Outlier-robust optimal transport / D. Mukherjee [et al.] // International Conference on Machine Learning. — PMLR. 2021. — P. 7850—7860.
149. *Folland, G. B.* Real analysis: modern techniques and their applications. Vol. 40 / G. B. Folland. — John Wiley & Sons, 1999.
150. Threeplayer Wasserstein GAN via amortised duality / Q. H. Nhan Dam [et al.] // Proc. of the 28th Int. Joint Conf. on Artificial Intelligence (IJCAI). — 2019.
151. *Henry-Labordere, P.* (Martingale) Optimal Transport And Anomaly Detection With Neural Networks: A Primal-dual Algorithm / P. Henry-Labordere // arXiv preprint arXiv:1904.04546. — 2019.
152. *Karush, W.* Minima of functions of several variables with inequalities as side conditions / W. Karush // Traces and Emergence of Nonlinear Programming. — Springer, 2014. — P. 217—245.

Список рисунков

1.1	Классические формулировки оптимального транспорта (ОТ).	17
1.2	Схематическая иллюстрация задач 1, 2 и 3.	21
2.1	Условные планы $\gamma_{\theta, \omega}(y x)$, обученные нашим методом в эксперименте <i>Gaussians Mixture</i> с дивергенцией D_{KL} и параметром несбалансированности $\tau \in [10^0, 10^1, 10^2]$. Здесь p_ω обозначает нормированный первый маргинал u_ω , т.е. $p_\omega = u_\omega / \ u_\omega\ _1$	53
2.2	Условные планы $\gamma_{\theta, \omega}(y x)$, обученные нашим методом с масштабированными дивергенциями D_{χ^2} в эксперименте <i>Gaussians Mixture</i> ($\tau \in [1, 2, 5, 10]$).	54
2.3	Условные планы $\gamma_{\theta, \omega}(y x)$, обученные нашим методом ($\tau = 1$) и LightSB в эксперименте <i>Gaussian Mixtures with outliers</i>	55
2.4	Визуализация пар точностей (<i>сохр.-цел.</i>) для нашего метода U-LightOT и других методов ОТ/ЕОТ в эксперименте по переводу изображений. Значения параметров несбалансированности для нашего метода U-LightOT (τ) и [32, UOT-FM] ($\lambda = reg_m$) указаны непосредственно на графиках.	57
2.5	Непарный перевод с методами LightSB, OT-FM, UOT-FM и нашим U-LightOT, применёнными в латентном пространстве ALAE [83] для изображений FFHQ [84] (1024×1024).	59
2.6	Визуализация абляционного исследования параметров τ, ϵ в эксперименте по переводу изображений.	63
3.1	Транспортное отображение $T_1(x_1)$, $x_1 \sim \mathbb{P}_1$ и распределение UOT барицентра $\mathbb{Q} = T_{1\#}\mathbb{P}_1$ полученные с помощью дискретного UOT метода, UOTM, ОТ на подвыборках UOT и нашего метода в <i>Spiral</i> $\rightarrow$ <i>Gaussian Mixture</i>	96
3.2	Условные планы $\gamma_k(y x)$ и барицентр $\mathbb{Q}$, полученные с помощью NOTB и нашего метода в эксперименте по поиску барицентра смеси гауссовских распределений. Мы проводим эксперименты для различных значений параметра несбалансированности $\tau \in \{1, 20, 200\}$	97

3.3	Вычисленный барицентр $\mathbb{Q}$, полученный из $x \sim \mathbb{P}_1$ с помощью NOTB и нашего метода для смеси гауссовских распределений с 5% выбросов. Мы проводим эксперименты для различных значений параметра несбалансированности $\tau \in \{1, 20, 200\}$. Для сравнения мы дополнительно обучили NOTB на данных без выбросов, как показано на рисунке (с).	97
3.4	Полунесбалансированный барицентр распределений форм ($\mathbb{P}_1$) и цветов ($\mathbb{P}_2$), вычисленный нашим методом U-NOTB в латентном пространстве модели StyleGAN, предварительно обученной на цветных изображениях цифр '2', '3' из MNIST. Наш метод позволяет успешно устранять выбросы во входных распределениях.	100
3.5	Примеры выборок $x_1 \sim \mathbb{P}_1$ (черно-белые цифры), $x_2 \sim \mathbb{P}_2$ (цветные изображения) и соответствующих им выборок барицентра $y \sim \mathbb{Q}$ (цветные цифры) в эксперименте <i>форма-цвет</i>	101
3.6	Примеры случайно выбранных (а) принятых выборок $x \sim \mathbb{P}_1$ и (б) соответствующих им выборок из барицентра при $t = 0.9$. Заметим, что доля принятия U-NOTB составляет 67.9%. Приблизительно 36% принятых выборок являются изображениями женщин.	108
3.7	Примеры отклонённых методом U-NOTB выборок. Приблизительно 80% отклонённых выборок являются изображениями женщин.	108
4.1	Классические формулировки оптимального транспорта (ОТ).	116
4.2	Формулировка частичного оптимального транспорта.	116
4.3	Формулировки неполного транспорта (ИТ).	118
4.4	Отображения неполного транспорта (ИТ), обученные нашим Алгоритмом 2 в эксперименте ' <i>Wi-Fi</i> '.	124
4.5	Обученное ИТ отображение ($w = 2$) в эксперименте ' <i>Accept</i> '.	124
4.6	Непарный перевод домена с помощью нашего метода неполного транспорта. Большие веса w дают большее сходство x и $T(x)$ по ℓ^2	126
4.7	Непарный перевод домена с помощью нашего ИТ метода.	126
4.8	РСА проекции входных $x \sim \mathbb{P}$, отображённых $T(x) \sim T\#\mathbb{P}$ и целевых $y \sim \mathbb{Q}$ для тестовых выборок (эксперимент <i>handbag</i> $\rightarrow$ <i>shoes</i>).	126
4.9	Транспортные отображения, обученные различными методами в эксперименте ' <i>Wi-Fi</i> '.	128

4.10	Транспортные отображения, обученные различными методами в эксперименте <i>'Accept'</i>	128
4.11	Непарный перевод изображений с DOT+BP в эксперименте <i>celeba</i> → <i>anime</i> , визуализированный на тестовых и обучающих наборах данных.	130
4.12	Тестовый FID, ℓ^2 стоимость нашего IT и DOT+BP.	131
4.13	Сравнение тестового FID и транспортных стоимостей (ℓ^2 и ℓ^1) нашего IT метода и CycleGAN.	135
4.14	Непарный перевод изображений с помощью CycleGAN, дополненного ℓ^1 функцией потерь идентичности с различными весами λ	136
4.15	Непарный перевод изображений с помощью StarGAN-v2, дополненного ℓ^1 функцией потерь идентичности с различными весами λ	137
4.16	Непарный перевод изображений <i>handbags</i> в <i>shoes</i> (128×128) с помощью StarGAN-v2, дополненного ℓ^1 функцией потерь идентичности ($\lambda = 10$). Поскольку StarGAN-v2 является стохастическим подходом (один-ко-многим), мы визуализируем несколько сгенерированных объектов для различных векторов шума z . Неудачные результаты (плохо преобразованные сумки, которые остаются почти неизменными) выделены красным	138
4.17	<i>Celeba</i> (женщины) → <i>anime</i> (размер изображений 64×64 , перцептивная стоимость).	139
4.18	<i>Celeba</i> (женщины) → <i>anime</i> (64×64).	140
4.19	<i>Handbag</i> → <i>shoes</i> (128×128).	141
4.20	<i>Textures</i> → <i>chairs</i> (64×64).	141
4.21	<i>Ffhq</i> → <i>comics</i> (128×128).	142
4.22	Модельные 2D примеры, показывающие два потенциальных ограничения IT отображений.	144
4.23	Иллюстрация неиспользуемых выборок . На Рис. 4.23а, 4.23б, 4.23в мы визуализируем поверхность обученного потенциала f^* на примере <i>'Wi-Fi'</i> и $w \in \{1, \frac{3}{2}, 3\}$. На Рис. 4.23б, 4.23в потенциал зануляется на дугах $\mathbb{Q}$, в которые масса $\mathbb{P}$ не отображается, т.е. $f^*(y) = 0$. На Рис. 4.23г мы строим распределение значений $f^*(y)$ для $y \sim \mathbb{Q}$. Для $w \in \{\frac{3}{2}, 3\}$ мы видим большие пики около $f^*(y) = 0$, дополнительно демонстрирующие, что потенциал равен нулю на некоторой части $\mathbb{Q}$	145

Список таблиц

1	Сравнение принципов существующих методов UOT/UEOT и разработанного нами метода.	29
2	Нормированная стоимость ОТ между входным и обученным распределениями и расстояние Васерштейна между обученным и целевым распределениями в эксперименте <i>Gaussians mixture</i>	54
3	Число <i>обучающих</i> изобр. FFHQ по подмножествам	56
4	Сравнение астрономического времени работы методов несбалансированного ОТ/ЕОТ в переводе <i>Юные</i> → <i>Взрослые</i> . Наилучшие результаты выделены жирным , вторые по качеству <u>подчёркнуты</u>	57
5	Сравнение точности (сохр.).	58
6	Сравнение точности (цел.).	60
7	Сравнение FD между истинными и сгенерированными латентными кодами.	60
8	Тестовая точность (сохр.) (↑) при переводе <i>Юные</i> → <i>Взр.</i>	61
9	Тестовая точность (цел.) (↑) при переводе <i>Юные</i> → <i>Взр.</i>	61
10	Тест. FD (↓) полученных латент. кодов при переводе <i>Юные</i> → <i>Взр.</i>	61
11	Тестовая точность (сохр.) (↑) при переводе <i>Взрослые</i> → <i>Юные</i>	61
12	Тест. точность (цел.) (↑) при переводе <i>Взрослые</i> → <i>Юные</i>	62
13	Тест. FD (↓) полученных латент. кодов при переводе <i>Взр.</i> → <i>Юные</i>	62
14	Тест. точность (сохр.) (↑) при переводе <i>Мужс.</i> → <i>Жен.</i>	62
15	Тест. точность (цел.) (↑) при переводе <i>Мужс.</i> → <i>Жен.</i>	62
16	Тест. FD (↓) полученных латент. кодов при переводе <i>Мужс.</i> → <i>Жен.</i>	62
17	Тест. точность (сохр.) (↑) при переводе <i>Жен.</i> → <i>Мужс.</i>	63
18	Тест. точность (цел.) (↑) при переводе <i>Жен.</i> → <i>Мужс.</i>	63
19	Тест. FD (↓) полученных латент. кодов при переводе <i>Жен.</i> → <i>Мужс.</i>	63
20	Тест. точность (сохр.) (↑) при переводе <i>Юные</i> → <i>Взр.</i> для нашего метода с разным числом гауссовских компонент в потенциалах.	65
21	Тест. точность (цел.) (↑) при переводе <i>Юные</i> → <i>Взр.</i> для нашего метода с разным числом гауссовских компонент в потенциалах.	65

22	Тест. FD ($\downarrow$) полученных латент. кодов при переводе <i>Юные</i> $\rightarrow$ <i>Взр.</i> для нашего метода с разным числом гауссовских компонент в потенциалах.	65
23	Сравнение на модельных данных.	96
24	$\mathcal{L}_2$ -UVP для нашего метода, NOTB, EgBary ($\varepsilon = 0.01$), WIN и FCWB, $D = 2, 4, 8, 16, 64$	102
25	BW $_2^2$ -UVP между вычисленными и истинными <i>несбалансированными</i> барицентрами для нашего метода и NOTB. Результаты приведены для различных параметров $\tau = 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10, 10^2, 10^3, 10^4$	103
26	Точность сохранения пола для $x \sim \mathbb{P}_1$ и $T_1(t, x)$ при $t = 0.9$. U-NOTB позволяет использовать метод отбраковки для работы с дисбалансом классов.	107
27	Время обучения для различных экспериментов.	110
28	Время получения выборки в различных экспериментах. Для экспериментов на модельных данных (§3.6.1, §3.6.2) мы проводили оценку для выборки из 1000 точек. Для эксперимента со StyleGAN (§3.6.3) — из 220 точек.	110
29	Настройки гиперпараметров Алгоритма 1 в разных экспериментах.	111
30	Гиперпараметры и время обучения для эксперимента с FFHQ.	112
31	Тестовые ℓ^2 транспортная стоимость и FID для обученных ИТ отображений.	127
32	Тестовая ℓ^2 стоимость, FID метода DOT+BP, обученного с ℓ^2 или перцептивной функцией потерь.	131
33	Тестовые ℓ^1 и ℓ^2 транспортные стоимости CycleGAN.	134
34	Тестовый FID CycleGAN.	134
35	Тестовые ℓ^1 и ℓ^2 транспортные стоимости StarGAN-v2.	134
36	Тестовый FID StarGAN-v2.	134
37	Тестовая ℓ^1 транспортная стоимость наших ИТ отображений (обученных с ℓ^2 транспортной стоимостью).	135
38	Тестовый FID и ℓ^2 , перцептивные транспортные стоимости наших ИТ отображений, обученных с перцептивной транспортной стоимостью.	139
39	Тестовые FID и ℓ^2 транспортная стоимость для ИТ отображений, обученных нашим методом.	140