

ОПТИМАЛЬНОЕ
УПРАВЛЕНИЕ

УДК 519.85

СИНГУЛЯРНОЕ МНОЖЕСТВО ОПТИМАЛЬНЫХ
ТРАНСПОРТНЫХ ОТОБРАЖЕНИЙ¹⁾

© 2022 г. Ч. Луо^{1,*}, В. Чен^{2,**}, Н. Леи^{3,***}, Я. Гуо^{4,****}, Т. Чжао^{5,*****},
Ц. Лиу^{6,*****}, С. Гу^{4,*****}

¹ Ключевая лаборатория повсеместного сетевого и сервисного программного обеспечения провинции Ляонин, Далянь, 116620, Китай

² Школа программных технологий, Даляньский технологический университет, Далянь, 116620 Китай

³ DUT-RU Информационные науки и инженерия, Даляньский технологический университет, Далянь, 116620, Китай

⁴ Факультет компьютерных наук, Университет Стоуни Брук, Стоуни Брук, Нью-Йорк 11794, США

⁵ INRIA София-Антиполис & Телеком, Париж, Франция

⁶ Школа математики и прикладной статистики, Университет Вуллонгонга, Вуллонгонг, Новый Южный Уэльс, 2522, Австралия

*e-mail: zxluo@dlut.edu.cn

**e-mail: wei.chen@mail.dlut.edu.cn

***e-mail: nalei@dlut.edu.cn

****e-mail: yangguo@cs.stonybrook.edu

*****e-mail: tong.zhao@inria.fr

*****e-mail: jiakunl@uow.edu.au

*****e-mail: gu@cs.stonybrook.edu

Поступила в редакцию 09.10.2021 г.
Переработанный вариант 21.01.2022 г.
Принята к публикации 11.03.2022 г.

Транспортные задачи играют важную роль во многих инженерных областях, в частности, в глубоком обучении. По теореме Бренье вычисление оптимальных транспортных отображений сводится к решению уравнений Монжа–Ампера, что, в свою очередь, эквивалентно построению политопов Александрова. Кроме того, теория регулярности уравнения Монжа–Ампера объясняет проблему схлопывания мод в задачах глубокого обучения. Следовательно, вычисление и изучение множеств сингулярностей транспортных отображений являются важной и актуальной задачей. В настоящей работе мы переходим от классического понятия медиальной оси к более общей степенной медиальной оси, которая описывает множества сингулярностей оптимальных транспортных отображений. Предложен вычислительный алгоритм, основанный на вариационном подходе с использованием степенных диаграмм (радикальных разбиений). Более того, доказано, что при гомотопическом изменении мер соответствующие множества сингулярностей оптимальных транспортных отображений тоже гомотопически эквивалентны. Кроме того, мы обобщаем концепцию расстояния Фреше и используем условие скошенности, чтобы дать достаточное условие для существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями. Условие формулируется с использованием кривизны границы. Библ. 20. Фиг. 15.

Ключевые слова: верхняя оболочка, выпуклая оболочка, степенная диаграмма, взвешенная триангуляция Делоне, вторичный политоп, нормальное расстояние Фреше, скошенность, кривизна.

DOI: 10.31857/S0044466922080099

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время теория оптимального транспорта играет важную роль в глубоком обучении, особенно для генеративных моделей, таких как генеративные адверсивные сети (GAN)

¹⁾ Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Луо, Чена и Леи Национальным фондом естественных наук Китая (гранты № 61720106005, 61772105, 61936002), Фондами фундаментальных исследований для центральных университетов (DUT20TD107, DUT20JC32). Работа Го и Гу поддержана Национальным научным фондом (СММИ-1762287), Программой исследований Университета Форда (URP № 2017-9198R), Национальным институтом здравоохранения (R21EB029733, R01LM012434). Исследование Лю поддержано Австралийским исследовательским советом (DP170100929, DP200101084).

(см. [1]), вариационные автоэнкодеры (VAE) (см. [2]) и т.д. В глубоком обучении одной из основных задач является преобразование заданного распределения в распределение данных, другой — измерение расстояния Вассерштейна между двумя распределениями. Обе эти задачи требуют вычисления оптимальных транспортных отображений.

Теорема Бренье сводит вычисление оптимального транспортного отображения к решению уравнения Монжа—Ампера, что эквивалентно решению задачи Александра в выпуклой геометрии. Построение политопа Александра преобразуется в вычисление степенной диаграммы и взвешенной диаграммы Делоне. Таким образом, геометрический подход к решению оптимальной транспортной задачи становится важным для задач глубокого обучения (см. [3], [4]).

Кроме того, одной из основных проблем глубокого обучения является коллапс мод, что делает процесс обучения нестабильным и трудно сходящимся. Теория регулярности оптимального транспортного отображения обнаруживает внутреннюю причину схлопывания мод. В основном, если носитель целевой меры не является просто связным или вогнутым, оптимальная транспортная карта может быть прерывистой в точках сингулярности. Поэтому вычисление и изучение сингулярного множества оптимальных транспортных отображений становится чрезвычайно важным.

В настоящей работе мы обобщаем понятие медиальной оси до степенной медиальной оси, которая описывает сингулярное множество оптимальных транспортных отображений (см. определение 4). Затем мы предлагаем вычислительный алгоритм, основанный на вариационном подходе с использованием степенных диаграмм. Доказываем, что при гомотопическом изменении мер соответствующие сингулярные множества оптимальных транспортных отображений также гомотопически эквивалентны (теорема 8).

Более того, мы даем достаточное условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями. Доказательство основано на условии скошенности и обобщенной концепции расстояния Фреше (теорема 9).

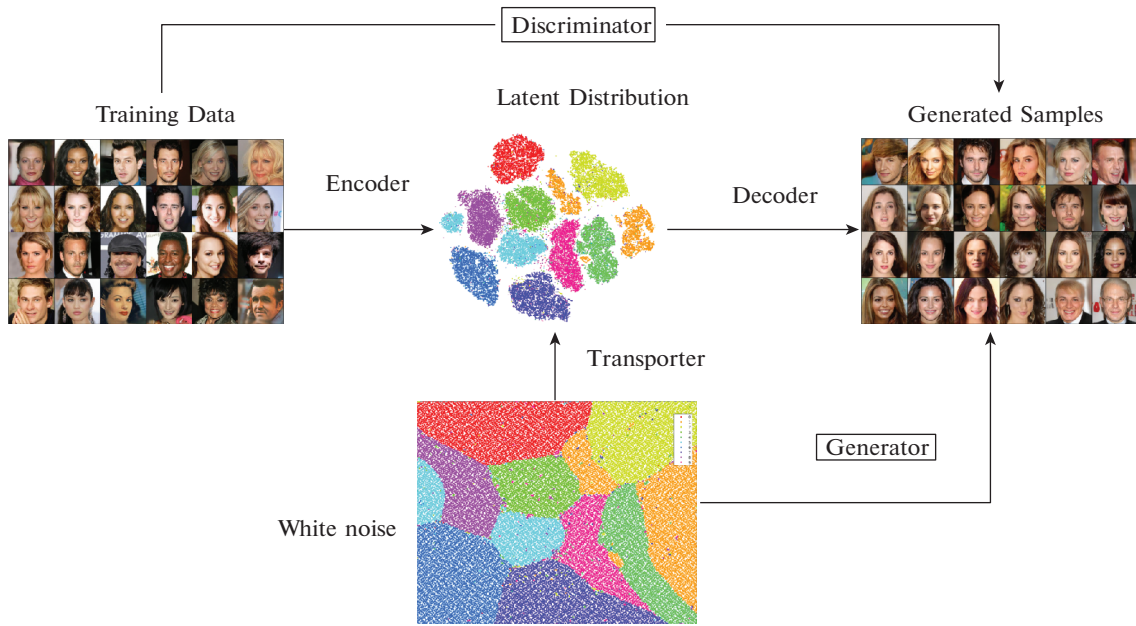
Статья организована следующим образом. В разд. 2 объясняется, как оптимальный транспорт применяется для генеративной модели в глубоком обучении, и почему сингулярное множество имеет решающее значение для предотвращения схлопывания мод. В разд. 3 рассмотрены выпуклое геометрическое представление оптимального транспорта, включая теоремы Александра и Минковского, геометрический вариационный подход Яу и теорему Гельфанда о вторичном политопе. В разд. 4 доказывается основная теорема, которая показывает отношение гомотопической эквивалентности между сингулярностями оптимального транспортного отображения и медиальной осью носителя целевой меры. В разд. 5 доказывается достаточное условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями, основанное на нормальном расстоянии Фреше и условии скошенности. В разд. 6 подведены итоги работы.

2. ГЕНЕРАТИВНЫЕ МОДЕЛИ И ОПТИМАЛЬНЫЙ ТРАНСПОРТ

В области глубокого обучения каждый класс данных моделируется как распределение вероятности на *многообразии данных*, которое вложено в высокоразмерное окружающее пространство. Методы глубокого обучения (DL) направлены на изучение как структуры многообразия, так и распределения класса данных. Процесс изучения распределения сильно зависит от оптимальных транспортных отображений.

Модель GAN. Генеративное моделирование — это задача машинного обучения без надзора, которая способна автоматически обнаружить и изучить закономерность во входных данных, так что модель может быть применена для генерации новых образцов, которые правдоподобно могли быть взяты из исходного набора данных. Генеративно-состязательные сети (Generative Adversarial Network, GAN) (см. [1]) и вариативные автоэнкодеры (Variational Autoencoders, VAE) (см. [2]) становятся доминирующими подходами для безусловной генерации изображений.

На фиг. 1 показана общая схема моделей GAN. Каждый обучающий образец, например, изображение человеческого лица, рассматривается как точка в высокоразмерном пространстве изображений. Естественный класс изображений, например, фотографии человеческого лица, рассматривается как облако точек, которое близко к низкоразмерному многообразию Σ , так называемому многообразию данных. Набор данных моделируется как распределение вероятности μ на многообразии данных Σ . Многообразие данных отображается на область параметров с помощью отображения кодирования, параметр каждого изображения называется латентным кодом, область параметров называется латентным пространством или пространством характеристик Ω ,



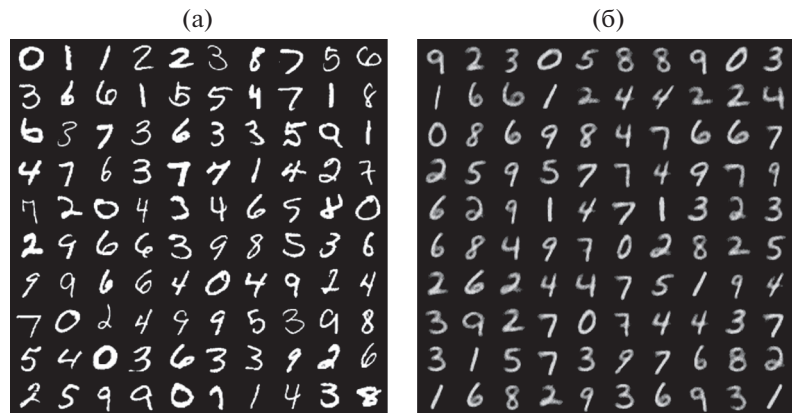
Фиг. 1. Модель генеративно-состязательных сетей (GAN).

отображение называется картой кодирования $\varphi : \Sigma \rightarrow \Omega$. Распределение данных μ переводится φ в латентное распределение данных $\varphi_{\#}\mu$. Отображение декодирования — это обратное отображение кодирования, $\varphi^{-1} : \Omega \rightarrow \Sigma$, которое отображает латентный код на изображение на многообразии данных.

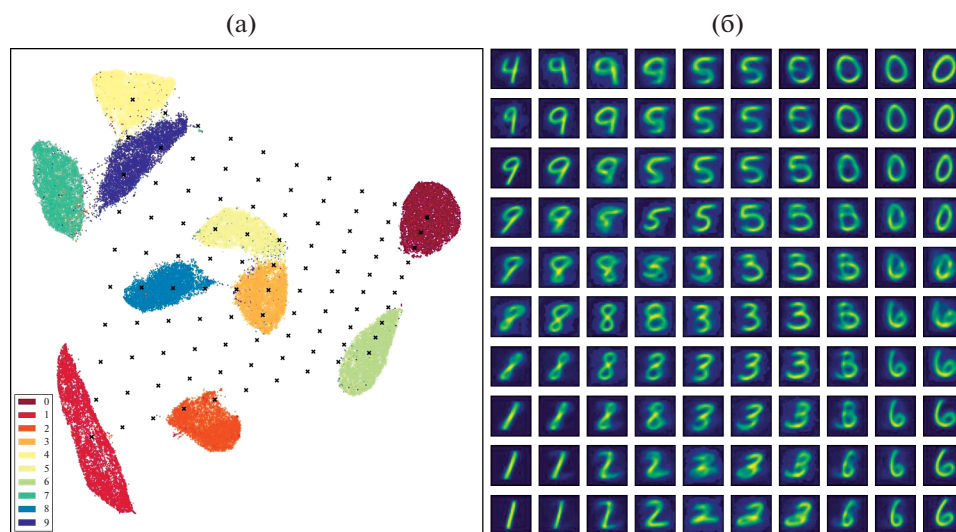
В латентном пространстве существует известное распределение вероятности, так называемый белый шум v , который обычно имеет равномерное распределение или гауссово распределение. Переносчик отображает белый шум в латентное распределение данных, карта переноса обозначается как $T : v \rightarrow \varphi_{\#}\mu$. Композиция переносчика и декодера называется *генератором*, $\varphi^{-1} \circ T$, который отображает образец белого шума в сгенерированное изображение. Эквивалентно, генератор переносит распределение белого шума в сгенерированное распределение данных на многообразии данных. *Дискриминатор* вычисляет расстояние между реальным распределением данных μ и сгенерированным распределением данных $(\varphi^{-1} \circ T)_{\#}v$. Генератор оптимизирует транспортное отображение, чтобы минимизировать расстояние между реальным распределением и сгенерированным распределением; дискриминатор максимизирует некоторый тип функционала для различения двух распределений. Конкуренция между генератором и дискриминатором в конечном итоге достигает равновесия по Нэшу, в этом состоянии человек не может отличить реальные изображения от сгенерированных. В последнее время оптимальный транспорт широко применяется для генеративных моделей. Во многих моделях генератор вычисляет оптимальное транспортное отображение между распределением белого шума и распределением латентного кода; дискриминатор вычисляет расстояние Вассерштейна между распределением реальных данных и сгенерированным распределением данных.

На фиг. 2 показан один из примеров генеративной модели: (а) — набор данных MNIST с изображениями рукописных цифр, (б) — сгенерированные изображения. Набор данных MNIST закодирован моделью UMap, распределение латентных данных показано на фиг. 3а. Каждая цифра соответствует одному кластеру. Мы помещаем 10×10 образцов на латентное пространство, и декодированные изображения показаны на фиг. 3б. Видно, что если сгенерированный латентный код попадает в кластер, то сгенерированное изображение чистое и четкое; в противном случае, если сгенерированный код попадает в промежутки между кластерами, то сгенерированное изображение нечеткое и похоже на смесь двух цифр.

Схлопывание/смещение мод. Несмотря на преимущества GAN, у них есть серьезные недостатки: 1) обучение GAN является сложным и чувствительным к гиперпараметрам; 2) GAN страдают от схлопывания мод, при котором генератор учится генерировать только несколько мод распре-



Фиг. 2. Входной набор данных MNIST(a) и сгенерированные изображения (б).

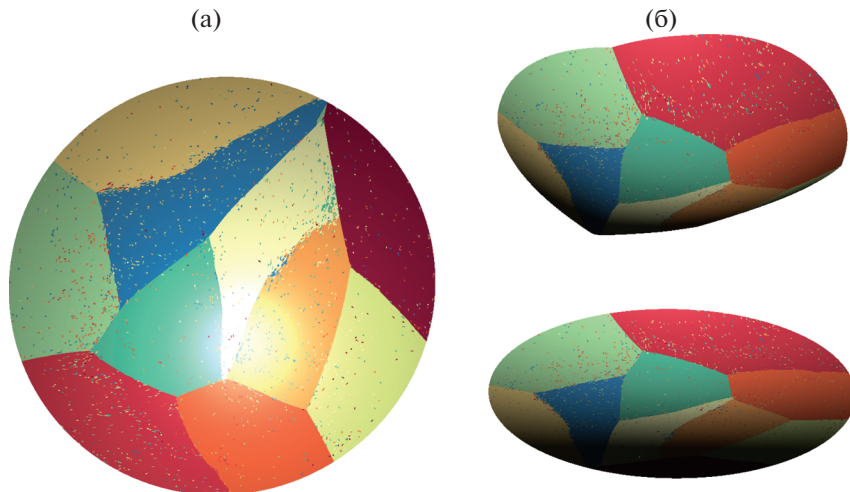


Фиг. 3. (а) – Латентные коды набора данных MNIST, закодированные моделью UMap; (б) – латентные коды декодируются и отображаются обратно на изображения.

деления данных, а остальные пропускает, хотя образцы из пропущенных мод встречаются во всех обучающих данных (см., например, [5]). В то время как для VAE кодер используется для отображения распределения данных на гауссовское латентное распределение, которое затем снова отображается на распределение данных декодером. Хотя стандартные VAE, как правило, улавливают все моды, они часто генерируют неоднозначные изображения на мультимодальных распределениях реальных данных.

В [6], [7] внутренняя причина схлопывания/смешения мод была объяснена с геометрической точки зрения. По теореме Брене о полярной факторизации (см. [8], [9]) и теореме Фигалли о регулярности (см. [10], [11], теорема 5 в приложении В), если носитель целевого распределения не является выпуклым, то на носителе исходного распределения существуют *сингулярные множества* такие, что транспортное отображение является прерывным на этих множествах. Как правило, генераторы/декодеры выражаются глубокими нейронными сетями, которые могут представлять только непрерывные отображения, поэтому они не могут аппроксимировать транспортные отображения с высокой точностью. Это внутреннее противоречие вызывает схлопывание и смешение мод в обычных генеративных моделях.

На фиг. 4 изображено оптимальное транспортное отображение из равномерного распределения на диске в латентное распределение набора данных MNIST, представленных на фиг. 3а. Поскольку латентное распределение имеет 10 мод (связанных компонентов), сингулярное множе-



Фиг. 4. Оптимальное транспортное отображение из равномерного распределения на диске в распределение латентных данных набора данных MNIST.

ство разбивает диск на десять частей, каждый из которых отображается на один кластер. Само отображение является прерывным на сингулярном множестве, поэтому не может быть представлено нейронной сетью. На фиг. 4б показан потенциал Бренье, который является непрерывным и дифференцируемым почти везде. Проекция недифференцируемых точек является сингулярным множеством. Поэтому нейронная сеть может представить потенциал Бренье. Изображение оптимального транспортного отображения будет распространяться на все моды, поэтому схлопывания мод не произойдет. Кроме того, изображение транспортного отображения не будет попадать в промежутки между модами, что исключит смешение мод. Поэтому важно изучить сингулярность оптимальных транспортных отображений.

3. ВЫПУКЛЫЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ ВЗГЛЯД НА ОПТИМАЛЬНЫЙ ТРАНСПОРТ

Существует тесная связь между теоремой Александрова в выпуклой геометрии и теоремой Бренье в оптимальном транспорте. В данном разделе будет объяснена эта внутренняя связь.

3.1. Оптимальное транспортное отображение

Пусть $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^d$ – области в евклидовом пространстве, с вероятностными мерами μ и ν соответственно, удовлетворяющие условию равенства общей массы: $\mu(\Omega) = \nu(\Omega^*)$. Транспортное отображение $T : \Omega \rightarrow \Omega^*$ является *сохраняющим меру*, если для любого множества Бореля $B \subset \Omega^*$, $\int_{T^{-1}(B)} d\mu(x) = \int_B d\nu(y)$. Условие сохранения меры обозначим как $T_{\#}\mu = \nu$.

Монж поставил задачу оптимального транспортного отображения: учитывая функцию стоимости транспорта $c : \Omega \times \Omega^* \rightarrow \mathbb{R}^+$, найти транспортное отображение $T : \Omega \rightarrow \Omega^*$, которое минимизирует общую стоимость транспорта,

$$\min \left\{ \int_{\Omega} c(x, T(x)) d\mu(x) : T : \Omega \rightarrow \Omega^*, T_{\#}\mu = \nu \right\}. \tag{MP}$$

Минимизатор называется *оптимальным транспортным отображением*. Стоимость транспорта оптимального транспортного отображения называется *расстоянием Вассерштейна* между мерами.

Теорема 1 (Бренье, см. [8]). Пусть для компактной области $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ с абсолютно непрерывными вероятностными мерами μ и ν , $\partial\Omega$ имеет нулевую меру Лебега, а стоимость транспортировки

$c(x, y) = \frac{1}{2}|x - y|^2$. Тогда существует выпуклая функция $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ однозначная с точностью до константы, так называемый потенциал Бренье, и оптимальное транспортное отображение задается градиентом u , $T = \nabla u$.

Потенциал Бренье удовлетворяет уравнению Монжа–Ампера

$$\det D^2 u(x) = \frac{d\mu(x)}{dv \circ \nabla u(x)} \quad (1)$$

с граничным условием $\nabla u(\Omega) = \Omega^*$. Однозначное оптимальное транспортное отображение дается в виде $T = \nabla u$.

3.2. Решение Александра

Для численных расчетов потенциал Бренье аппроксимируется кусочно-линейной выпуклой функцией, график которой представляет собой выпуклый многоугольник. Субградиент выпуклой функции u в точке x определяется как $\partial u(x) := \{p \in \mathbb{R}^d : u(z) \geq \langle p, z - x \rangle + u(x), \forall z \in \Omega\}$.

Субградиент определяет отображение, принимающее множества как значения $\partial u : \Omega \rightarrow \Omega^*$, $x \mapsto \partial u(x)$. Мы можем использовать карту субградиента для замены карты градиента в уравнении Монжа–Ампера (1) и переписать его как

$$(\partial u)_\# \mu = \nu, \quad (2)$$

или, эквивалентно, $\forall \text{Borel } B \subset \Omega^*, \mu((\partial u)^{-1}(B)) = \nu(B)$. Таким образом, здесь u называется решением Александра. На самом деле, решение Александра эквивалентно политопу Александра, а теорема Бренье эквивалентна теореме Александра в выпуклой геометрии.

3.3. Теоремы Минковского и Александра

Здесь мы кратко напомним основные понятия и теоремы Минковского и теоремы Александра в выпуклой геометрии, которые могут быть описаны уравнением Монжа–Ампера и тесно связаны со степенными диаграммами и взвешенными триангуляциями Делоне в вычислительной геометрии. Эта внутренняя связь дает теоретический инструмент для изучения пространства политопов Александра (подробнее см. [12], [13]).

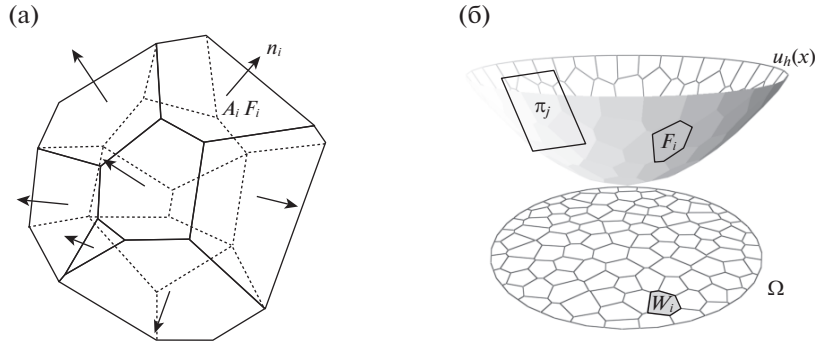
Минковский доказал существование и единственность выпуклого многоугольника с заданными нормальными и площадями граней (фиг. 5).

Теорема 2 (Минковского). *Предположим, что n_1, \dots, n_k – единичные векторы, которые охватывают \mathbb{R}^n , и найдутся положительные числа v_1, \dots, v_k такие, что $\sum_{i=1}^k v_i n_i = 0$. Тогда существует компактный выпуклый многоугольник $P \subset \mathbb{R}^n$, имеющий ровно k граней F_1, \dots, F_k коразмерности-1, такой, что n_i – вектор внешней нормали к F_i и v_i – объем F_i . Более того, такой P единственен с точностью до трансляции.*

Доказательство Минковского является вариационным и предлагает алгоритм нахождения политопа. Теорема Минковского для неограниченных выпуклых многогранников была рассмотрена и решена А.Д. Александровым и его учеником А. Погореловым. В своей книге о выпуклых многогранниках [12] Александров доказал следующую фундаментальную теорему (см. [12, теоремы 7.3.2 и 6.4.2]).

Теорема 3 (Александра, см. [12]). *Предположим, что Ω – компактный выпуклый многоугольник с непустой внутренней частью в \mathbb{R}^n , $n_1, \dots, n_k \subset \mathbb{R}^{n+1}$ представляют собой k различных единичных векторов с отрицательными $(n+1)$ -ми координатами, и положительные числа v_1, \dots, v_k таковы, что $\sum_{i=1}^k v_i = \text{vol}(\Omega)$. Тогда существует выпуклый политоп $P \subset \mathbb{R}^{n+1}$ с точно k гранями коразмерности-1 F_1, \dots, F_k такой, что n_i – нормальный вектор к F_i и пересечение Ω с проекцией F_i имеет объем v_i . Более того, такой P единственен с точностью до вертикальной трансляции.*

Доказательство Александра основано на алгебраической топологии и неконструктивно. Ауренхаммер (см. [14]) дал конструктивное доказательство с использованием степенной диа-



Фиг. 5. Теоремы Минковского (а) и Александрова (б) для выпуклых политопов с предписанными нормальми и областями граней.

граммы. Гу и соавт. (см. [13]) дали другое вариационное доказательство обобщенной теоремы Александрова, изложенное в терминах выпуклых функций. Энергии в [14] и [15] являются двойственными друг другу по Лежандру.

Определение 1 (политоп Александрова). При заданных $Y = \{y_1, \dots, y_k\}$, $y_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, 2, \dots, k$, и $h = (h_1, \dots, h_k) \in \mathbb{R}^k$ верхняя оболочка гиперплоскостей $\pi_i(x) = \langle x, y_i \rangle - h_i$ есть

$$u_h(x) = \max_{i=1}^k \{\pi_i(x)\} = \max_{i=1}^k \{\langle y_i, x \rangle - h_i\}, \tag{3}$$

где $\langle \cdot, \cdot \rangle$ представляет собой скалярное произведение. Граф u_h называется *политопом Александрова*, обозначается как $P(Y, h)$.

Проекция политопа Александрова приводит к *степенной диаграмме* \mathbb{R}^n , каждая ячейка $W_i(h)$ является замкнутым выпуклым политопом:

$$\mathbb{R}^d = \bigcup_{i=1}^k W_i(h) = \bigcup_{i=1}^k \{x \in \mathbb{R}^d \mid \pi_i(x) \geq \pi_j(x), i \neq j\}, \tag{4}$$

где $W_i(h)$ называются *степенными ячейками*. Степенная диаграмма может быть сформулирована с помощью степенного расстояния

$$W_i(h) = \{x \in \mathbb{R}^d \mid \text{row}_h(x, y_i) \leq \text{row}_h(x, y_j), i \neq j\},$$

где степенное расстояние между x и y_i определяется как

$$\text{row}_h(y_i, x) := \frac{1}{2} |x - y_i|^2 - r_i^2, \tag{5}$$

где r_i^2 — степень, связанная с y_i , определяемая как

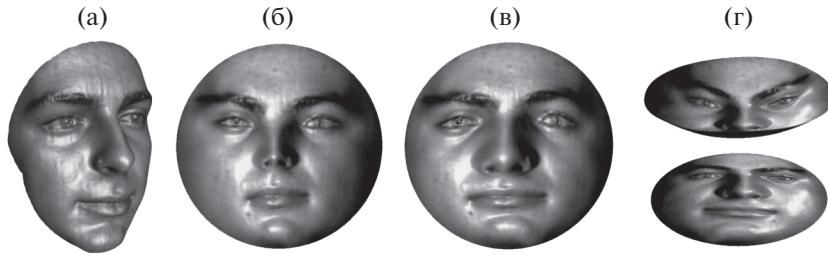
$$r_i^2 := \frac{1}{2} |y_i|^2 - h_i. \tag{6}$$

Для меры вероятности μ , определенной на Ω , объем $W_i(h)$ определяется как

$$w_i(h) := \mu(W_i(h) \cap \Omega) = \int_{W_i(h) \cap \Omega} d\mu.$$

Гу и др. дали конструктивное доказательство теоремы Александрова.

Теорема 4 (Гу–Луо–Сун–Яу, см. [13]). Пусть Ω — компактная выпуклая область в \mathbb{R}^n , $Y = \{y_1, \dots, y_k\}$ — множество отдельных точек в \mathbb{R}^n и μ — мера вероятности на Ω . Тогда для любых $v_1, \dots, v_k > 0$ с $\sum_{i=1}^k v_i = \mu(\Omega)$ существует $h = (h_1, \dots, h_k) \in \mathbb{R}^k$, единственное с точностью до аддитив-



Фиг. 6. Первый эксперимент: трехмерное лицо (а) отображается на единичный диск с помощью отображения Римана (б). Вычисляется оптимальное транспортное отображение из равномерного распределения в меру, индуцированную отображением Римана; (в), (г) – потенциал Бренье.

ной константы (c, \dots, c) , так что $w_i(h) = v_i$, для всех i . Векторы h являются точными точками максимума вогнутой функции

$$E(h) = \int_0^h \sum_{i=1}^k w_i(\eta) d\eta_i - \sum_{i=1}^k h_i v_i \quad (7)$$

на открытом выпуклом множестве (пространстве допустимых высот)

$$\mathcal{H}_\Omega(Y) = \{h \in \mathbb{R}^k \mid w_i(h) > 0, \forall y_i \in Y\}. \quad (8)$$

Кроме того, ∇u_h минимизирует квадратичную стоимость $\int_\Omega |x - T(x)|^2 d\mu(x)$ среди всех транспортных отображений $T_\# \mu = \nu$, где мера Дирака определена как $\nu = \sum_{i=1}^k v_i \delta(y - y_i)$.

На фиг. 6 продемонстрировано оптимальное транспортное отображение, полученное методом политопа Александра. Поверхность лица мужчины оцифрована в треугольную сетку M (фиг. 6а). Поверхность конформно отображается на плоский единичный диск с помощью отображения Римана (фиг. 6б), плоские изображения вершин обозначаются как y_1, \dots, y_k . Для каждой вершины v_i общая площадь прилегающих к ней треугольных граней обозначается как v_i . При масштабировании общая площадь $\sum_{i=1}^k v_i = \pi$. Затем вычисляем оптимальное транспортное отображение (фиг. 6в) из единичного диска с равномерным распределением $\nu = \sum_{i=1}^k v_i \delta(y - y_i)$. Потенциал Бренье показан на фиг. 6г.

3.4. Вторичный политоп и вторичная степенная диаграмма

Кратко напомним основные понятия и теоремы теории вторичных политопов Гельфанда и его двойственной вторичной степенной диаграммы (подробнее см. [15]–[17]), которые показывают, что допустимое пространство решений $\mathcal{H}_\Omega(Y)$ имеет разложение по ячейкам.

Вторичный политоп. Пусть $Y = \{y_1, \dots, y_k\}$ – конфигурация точек, а конечное множество отдельных точек в \mathbb{R}^d , $\text{Conv}(Y)$ – выпуклая оболочка Y . Триангуляция T из $(Y, \text{Conv}(Y))$ разбивает внутренний объем, ограниченный $\text{Conv}(Y)$, на симплексы с вершинами в Y . Некоторые $y_i \in Y$ могут не быть вершинами симплекса.

Учитывая триангуляцию T , частично линейная функция $g : \text{Conv}(Y) \rightarrow \mathbb{R}$ является аффинно-линейной на каждом симплексе T . Более того, g является вогнутой, если для любых $x, y \in \text{Conv}(Y)$ $g(tx + (1-t)y) \geq tg(x) + (1-t)g(y)$.

Определение 2 (когерентная триангуляция). Триангуляция T из $(Y, \text{Conv}(Y))$ называется *когерентной*, если существует вогнутая кусочно-линейная функция, область линейности которой в точности является (максимальными) симплексами T .

Пусть T – триангуляция $(Y, \text{Conv}(Y))$. Характеристическая функция T , $\varphi_T : Y \rightarrow \mathbb{R}$, определяется следующим образом:

$$\varphi_T(\omega) = \sum_{\omega \sim \sigma} \text{vol}(\sigma), \tag{9}$$

где суммирование ведется по всем (максимальным) симплексам T , для которых ω является вершиной. Если ω не является вершиной ни одного симплекса из T , то $\varphi_T(\omega) = 0$.

Определение 3 (вторичный политоп). *Вторичный политоп* $\Sigma(Y)$ – это выпуклая оболочка в пространстве \mathbb{R}^Y векторов φ_T для всех триангуляций $(Y, \text{Conv}(Y)) T$.

Свойства вторичного политопа приведены в теореме 5.

Теорема 5. 1) *Вторичный политоп* $\Sigma(Y)$ *имеет размерность* $k - n - 1$, *где* $k = \#(Y)$.

2) *Если* T *– когерентная триангуляция* $(Y, \text{Conv}(Y))$, *то* $\varphi_T \neq \varphi_{T'}$ *для любой другой триангуляции* $(Y, \text{Conv}(Y)) T'$. *Вершины* $\Sigma(Y)$ *– это именно характеристические функции для всех связных триангуляций* $(Y, \text{Conv}(Y)) T$.

Вторичная степенная диаграмма. Первичные взвешенные триангуляции Делоне дуальны к степенным диаграммам; вторичные политопы дуальны к вторичным степенным диаграммам. Вторичная степенная диаграмма – это разбиение на ячейки пространства допустимых высот в (8), где каждая ячейка соответствует взвешенной триангуляции Делоне (когерентной триангуляции) Y . Подробности можно найти в теории вторичных степенных диаграмм (см. [17]).

Фиксируя триангуляцию $(Y, \text{Conv}(Y)) T$, симплекс $\sigma \in T$ имеет объем $\text{vol}(\sigma)$. Учитывая вектор высоты \mathbf{h} , линейная функция $\pi_T(\mathbf{h})$ определяется следующим образом:

$$\pi_T(\mathbf{h}) = \frac{1}{n+1} \sum_{y_i \in Y} \sum_{y_i \sim \sigma, \sigma \in T} \text{vol}(\sigma) h_i. \tag{10}$$

Теорема 6 (вторичная степенная диаграмма). *Для заданной конфигурации точек* $Y = \{y_1, \dots, y_k\} \subset \mathbb{R}^n$ *выпуклая область* $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, *содержащая начало координат, имеет следующие свойства:* 1) *Для каждой невырожденной взвешенной триангуляции Делоне* $T \in \mathcal{T}(Y)$, *если ячейка* D_T *непуста, то она выпуклая. Более того, если* $h \in D_T$, *то* $\lambda h \in D_T$ *для всех* $0 < \lambda < 1$. 2) *Разбиение на ячейки пространства степенных диаграмм* *Александрова*

$$\mathcal{H}_\Omega(Y) = \bigcup_{T \in \mathcal{T}(Y)} D_T \tag{11}$$

есть степенная диаграмма, полученная проекцией верхней оболочки

$$U(Y) = \max_{T \in \mathcal{T}(Y)} \{-\pi_T(\mathbf{h})\}, \tag{12}$$

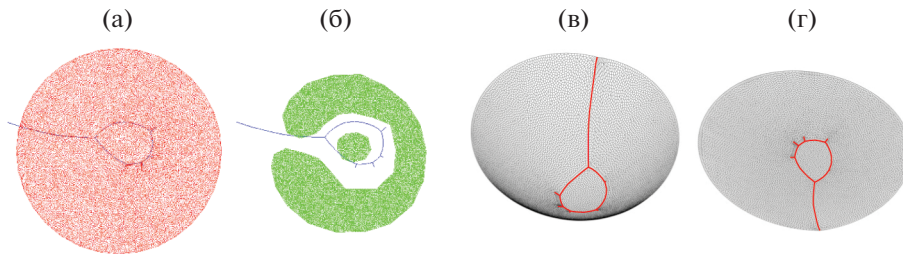
где гиперплоскость $\pi_T(\mathbf{h}) \subset \mathbb{R}^{k+1}$ *– объем триангуляции* T *в* (10). 3) *Если* T *– невырожденная когерентная триангуляция* $T \in \mathcal{T}(Y)$, *то* D_T *непуста.*

4. СИНГУЛЯРНОЕ МНОЖЕСТВО ОПТИМАЛЬНЫХ ТРАНСПОРТНЫХ ОТОБРАЖЕНИЙ

Оптимальные транспортные отображения не могут быть глобально непрерывными. Сингулярное множество разрывов играет важную роль в генеративных моделях в глубоком обучении.

4.1. Сингулярное множество

Теорема 7 (регулярность Фигалли, см. [18]). *Пусть* $\Omega, \Lambda \subset \mathbb{R}^d$ *– два ограниченных открытых множества,* $f, g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^+$ *– две плотности вероятности, которые равны нулю вне* Ω, Λ *и ограничены от нуля и бесконечности на* Ω, Λ *соответственно. Пусть* $T = \nabla u : (\Omega, f dx) \rightarrow (\Lambda, g dy)$ *– оптимальное транспортное отображение, определяемое теоремой Бренье. Тогда существуют два относительно замкнутых множества* $\Sigma_\Omega \subset \Omega$ *и* $\Sigma_\Lambda \subset \Lambda$ *с* $|\Sigma_\Omega| = |\Sigma_\Lambda| = 0$ *такие, что* $T : \Omega \setminus \Sigma_\Omega \rightarrow \Lambda \setminus \Sigma_\Lambda$ *является гомеоморфизмом класса* $C_{loc}^{0,\alpha}$ *для некоторого* $\alpha > 0$.



Фиг. 7. Сингулярное множество оптимальных транспортных отображений равномерного распределения на диске на диск в форме острова: (а) – степенная диаграмма, (б) – взвешенная триангуляция Делоне, (в) – потенциал Бренье, вид снизу, (г) – потенциал Бренье, вид сверху. Синие линии показывают сингулярности на области, красные – недифференцируемые точки на потенциале Бренье.

Как показано на фиг. 7, область Ω – единичный диск, область Λ имеет две связные компоненты. Обе функции плотности f, g являются константами, а меры вероятности – равномерными распределениями. Оптимальное транспортное отображение T является градиентным отображением потенциала Бренье $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Множество сингулярностей Σ_Ω – это цикл внутри Ω , образ $\Omega \setminus \Sigma_\Omega$ покрывает Λ . На виде снизу легко увидеть, что потенциал Бренье C^1 почти везде, кроме Σ_Ω , где потенциал только C^0 . Сингулярное множество Σ_Ω представляет собой граф, который можно разложить на дуги и точки ветвления. Возьмем точку сингулярного множества $x \in \Sigma_\Omega$, если x находится внутри дуги, то субдифференциал $du(x)$ – это отрезок прямой; если x – точка ветвления, то $du(x)$ – это выпуклое множество размерности 2.

Сингулярное множество может быть определено с помощью обобщенной концепции медиальной оси.

Определение 4 (степенная медиальная ось). Пусть $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ – область в евклидовом пространстве, $h : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ – выпуклая функция, которая определяет степенное расстояние как в (5),

$$\text{row}_h(x, y) := \frac{1}{2}|x - y|^2 - \left(\frac{1}{2}|y|^2 - h(y)\right).$$

Для каждой точки $x \in \mathbb{R}^d$, ближайшая точка Λ к x определяется как

$$\text{Cl}_\Lambda(x, h) := \arg \inf_{y \in \Lambda} \text{row}_h(x, y),$$

степенная медиальная ось определяется как

$$\mathcal{M}_\Lambda(h) := \{x \in \mathbb{R}^d \mid |\text{Cl}_\Lambda(x, h)| > 1\}.$$

Предложение 1 (сингулярное множество). Пусть $\Omega, \Lambda \subset \mathbb{R}^d$ – компактные области с абсолютно непрерывными мерами μ и ν , $\partial\Omega$ имеет нулевую меру Лебега. Стоимость транспортировки является квадратичным евклидовым расстоянием. Пусть $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ – потенциал Бренье, $\nabla u : \Omega \rightarrow \Lambda$ – оптимальное транспортное отображение. $u^* : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ – дуал Лежандра для u , тогда сингулярное множество оптимального транспортного отображения задается следующим образом:

$$\Sigma_\Omega = \mathcal{M}_\Lambda(u^*) \cap \Omega. \tag{13}$$

Доказательство. Пусть функция стоимости $c(x, y) = \langle x, y \rangle$. Пусть $x_0 \in \Omega, y_0 \in \Lambda$ и $y_0 \in \text{di}$, тогда

$$\begin{aligned} u(x_0) + u^*(y_0) &= \langle x_0, y_0 \rangle, \\ u(x_0) + u^*(y) &\geq \langle x_0, y \rangle \quad \forall y \in \Lambda. \end{aligned}$$

Поэтому для любого $y \in \Lambda$

$$\begin{aligned} u^*(y_0) - \langle x_0, y_0 \rangle &\leq u^*(y) - \langle x_0, y \rangle, \\ \frac{1}{2}|x_0 - y_0|^2 - \left(\frac{1}{2}|y_0|^2 - u^*(y_0)\right) &\leq \frac{1}{2}|x_0 - y|^2 - \left(\frac{1}{2}|y|^2 - u^*(y)\right). \end{aligned}$$

Это означает, что для всех $y \in \Lambda$, $\text{row}_{u^*}(x_0, y_0) \leq \text{row}_{u^*}(x_0, y)$, поэтому $y_0 \in \text{Cl}_\Lambda(x_0, u^*)$. А именно, y_0 является ближайшей точкой в Λ (по степенному расстоянию) к x_0 , оптимальное транспортное отображение T отображает каждую точку x_0 в Ω на ближайшую точку y_0 в Λ . И наоборот, если $y_0 \in \Lambda$ является ближайшей точкой к $x_0 \in \Omega$, то $y_0 \in \partial u(x_0)$.

Предположим, что $x \in \Omega$, и x находится на степенной медиальной оси Λ , $x \in \mathcal{M}_\Lambda(u^*)$, тогда она имеет две ближайшие точки $y_1, y_2 \in \Lambda$, следовательно, $y_1, y_2 \in \partial u(x)$; u не дифференцируема на x , x является сингулярностью u . Тогда имеем

$$\mathcal{M}_\Lambda(u^*) \cap \Omega \subset \Sigma_\Omega.$$

И наоборот, если предположить, что $x \in \Sigma_\Omega$, то $\partial u(x)$ имеет, по крайней мере, две точки $y_1, y_2 \in \Lambda$, которые ближе всего к x и имеют равные степенные расстояния. Следовательно, x лежит на степенной медиальной оси Λ , тогда имеем

$$\Sigma_\Omega \subset \mathcal{M}_\Lambda(u^*) \cap \Omega.$$

Следовательно, уравнение (13) выполняется. Предложение 1 доказано.

4.2. Алгоритм построения сингулярного множества

Предположим, что $\Omega, \Lambda \subset \mathbb{R}^d$ – компактные области, Ω – выпуклая область. Мы плотно сэмплируем границу и внутренность Λ , выборки обозначаются как $Y = \{y_1, \dots, y_n\}$. Граничные выборки триангулируются, образуя многогранную гиперповерхность, обозначаемую ∂Y . Тогда ∂Y аппроксимирует граничную поверхность Λ , $\partial \Lambda$. При заданных степенях $\{w_1, \dots, w_n\}$, или, эквивалентно, высоте $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_n)$ степенная диаграмма обозначается $\mathcal{D}_Y(\mathbf{h})$, как определено в уравнении (4). Степенная медиальная ось задается объединением граней f_{ij} коразмерности 1, которые являются пересечениями двух степенных ячеек Вороного $W_i(\mathbf{h})$ и $W_j(\mathbf{h})$, соответствующие y_i и y_j находятся в граничном многограннике ∂Y , но не являются смежными $y_i \neq y_j$ в ∂Y ,

$$\mathcal{M}_Y(\mathbf{h}) = \bigcup_{y_i, y_j \in \partial Y, y_i \neq y_j} \{W_i(\mathbf{h}) \cap W_j(\mathbf{h})\}. \tag{14}$$

Сингулярное множество дискретного оптимального транспортного отображения есть

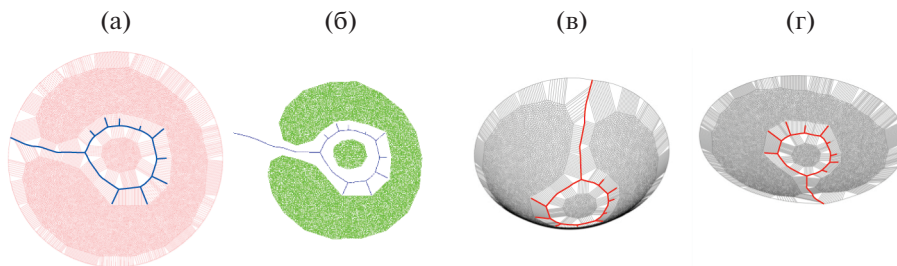
$$\Sigma_\Omega(\mathbf{h}) = \mathcal{M}_Y(\mathbf{h}) \cap \Omega. \tag{15}$$

На фиг. 8 показана степенная медиальная ось, полученная с помощью этого алгоритма, где Ω – единичный диск, Λ – плоский многоугольник в форме острова с двумя соединенными компонентами. Мы плотно сэмплируем внутреннюю часть и границу Λ , чтобы получить дискретное множество точек $Y = \{y_i\}_{i=1}^n$. Граничные выборки последовательно соединяются, образуя ∂Y . Определим все степени равными нулю, $\{r_i = 0\}_{i=1}^n$, что эквивалентно $\{h_i = |y_i|^2/2\}_{i=1}^n$. Тогда на фиг. 8а показана диаграмма Вороного для Y , синий график – условная медиальная ось. На фиг. 8в, г красными линиями показаны недифференцируемые точки на графике потенциала Бренье. Если изменить высоту, то степенная медиальная ось (сингулярности оптимального транспортного отображения) может быть получена с помощью того же самого алгоритма.

4.3. Эквивалентность гомотопии сингулярного множества

Для оптимального транспортного отображения $T = \nabla u : (\Omega, \mu) \rightarrow (\Lambda, \nu)$, если мы изменим целевую меру ν , оптимальное транспортное отображение T изменится соответствующим образом. Можно показать, что сингулярные множества оптимальных транспортных отображений гомотопны друг другу. Сначала покажем это в дискретной постановке, а затем обобщим на устойчивость оптимальных транспортных отображений.

Определение 5 (сумма Минковского). Предположим, что A и B – подмножества на \mathbb{R}^n . Их сумма Минковского определяется как $A \oplus B := \{p + q \mid p \in A, q \in B\}$.



Фиг. 8. Степенная медианная ось, полученная с помощью алгоритма (15). Синий плоскостной график показывает медиальную ось многоугольника в форме острова. Красная линия показывает недифференцируемые точки на потенциале Бренье.

Теорема 8 (гомотопия сингулярных множеств). *Имея выпуклую область $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ и дискретное множество точек $Y = \{y_i\}_{i=1}^n$, фиксируем исходную меру μ , функция плотности которой абсолютно непрерывна. Целевая мера $\nu = \sum_{i=1}^n \nu_i \delta(y - y_i)$, $\nu_i > 0, i = 1, 2, \dots, n$, такая, что $\mu(\Omega) = \sum_{i=1}^n \nu_i$. Если даны две целевые меры ν_0 и ν_1 , соответствующие им высоты \mathbf{h}_0 и \mathbf{h}_1 , то их сингулярные множества гомотопически эквивалентны друг другу: $\Sigma_\Omega(\mathbf{h}_0) \sim \Sigma_\Omega(\mathbf{h}_1)$.*

Теорема 4 показывает, что пространство допустимых высот \mathcal{H}_Y в уравнении (8) выпукло, поэтому отрезок, соединяющий \mathbf{h}_0 и \mathbf{h}_1 , содержится в \mathcal{H}_Y , $\gamma(t) := (1 - t)\mathbf{h}_0 + t\mathbf{h}_1$. Согласно теореме о вторичной степенной диаграмме 6, \mathcal{H}_Y имеет разбиение на ячейки $\mathcal{H}_Y = \bigcup_{T \in \mathcal{T}(Y)} \mathcal{D}_T$, каждая ячейка соответствует взвешенной триангуляции Делоне (также комбинаторной структуре силовой диаграммы Ω). Предположим, что прямая $\gamma(t)$ пересекает множество ячеек, соответствующих триангуляциям T_0, \dots, T_k . Тогда единичный интервал делится на отрезки $0 = t_0 < \dots < t_k = 1$, удовлетворяющие следующим условиям:

- 1) $\gamma(t) \in \mathcal{D}_{T_i} \forall t \in [t_i, t_{i+1}]$,
- 2) $\gamma(t_i) \in \mathcal{D}_{T_i} \cap \mathcal{D}_{T_{i+1}}$.

Шаг 1. Для любых $t \in (t_i, t_{i+1})$ все взвешенные триангуляции Делоне $T(\gamma(t))$ имеют одинаковую комбинаторную структуру. Все соответствующие степенные диаграммы также имеют одинаковую комбинаторную структуру. Потенциал Бренье $u_{\gamma(t)}(x) = \max_{i=1}^k \{ \langle y_i, x \rangle - \gamma(t)_i \}$ может быть записан как линейная комбинация:

$$u_{\gamma(t)} = (1 - \lambda)u_{\gamma(t_i)} + \lambda u_{\gamma(t_{i+1})},$$

где $\lambda = (t_{i+1} - t)/(t_{i+1} - t_i)$. Граф потенциала Бренье можно записать в виде линейной комбинации с помощью суммы Минковского:

$$G(\gamma(t)) = \lambda G(\gamma(t_i)) \oplus (1 - \lambda)G(\gamma(t_{i+1})),$$

где $G(\gamma(t))$ – граф функции $u_{\gamma(t)}$. Поэтому, как проекция графов потенциалов Бренье, каждая степенная ячейка может быть представлена в виде суммы Минковского $W_i(\gamma(t)) = \lambda W_i(\gamma(t_i)) \oplus (1 - \lambda)W_i(\gamma(t_{i+1}))$.

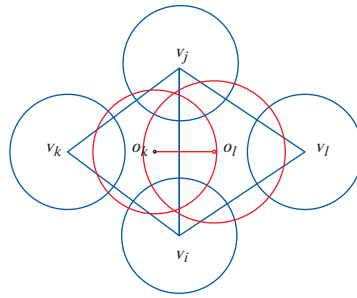
Это означает, что сингулярное множество также удовлетворяет соотношению линейной комбинации:

$$\Sigma_\Omega(\gamma(t)) = \lambda \Sigma_\Omega(\gamma(t_i)) \oplus (1 - \lambda) \Sigma_\Omega(\gamma(t_{i+1})).$$

Шаг 2. В критической точке t_i мы хотим показать, что

$$\lim_{t \rightarrow t_i^-} \Sigma_\Omega(\gamma(t)) = \lim_{t \rightarrow t_i^+} \Sigma_\Omega(\gamma(t)). \tag{16}$$

Сначала мы доказываем это для двумерного случая (фиг. 9), доказательство для случаев общей размерности очень похоже. Зададим взвешенную триангуляцию Делоне T , выберем два смежных треугольника $[v_i, v_j, v_k]$ и $[v_j, v_i, v_l]$. Степенная окружность, связанная с вершиной $v_i - c(v_i, r_i)$,



Фиг. 9. Конфигурация степенной диаграммы.

мощность $-r_i^2$. Тогда для каждого треугольника существует единственная окружность $c(o, r)$ (красная), ортогональная ко всем трем вершинным окружностям, так называемая силовая окружность грани. Степенной центр o и степенной радиус r удовлетворяют следующим условиям:

$$|v_i - o|^2 = r_i^2 + r^2, \quad |v_j - o|^2 = r_j^2 + r^2, \quad |v_k - o|^2 = r_k^2 + r^2.$$

Как показано на фиг. 9, степенными центрами двух граней являются o_k и o_l соответственно. Отрезок прямой, соединяющий два степенных центра $[o_k, o_l]$ на степенной диаграмме, дуален ребру $[v_i, v_j]$ во взвешенной триангуляции Делоне.

Вдоль кривой $\gamma(t)$ степени вершин непрерывно меняются. Предположим, что когда $t < t_i$ и приближается к t_i , два степенных центра o_k и o_l становятся все ближе и ближе. В критической точке t_i центр o_k совпадает с o_l , и триангуляция меняется путем замены ребер $[v_i, v_j]$ на $[v_k, v_l]$. При дальнейшем увеличении t , где $t > t_i$, степенной центр $[v_k, v_i, v_l]$ и центр $[v_l, v_j, v_k]$ расходятся. Это показывает, что в критический момент времени t_i край степенной диаграммы $[v_i, v_j]$ сжимается до точки и растет до нового края $[v_k, v_l]$. Таким образом, степенная диаграмма изменяется непрерывно. Следовательно, сингулярное множество также меняется непрерывно, а значит, уравнение (16) выполняется. Для пространств больших измерений обмен краями заменяется бистеллярным преобразованием (см. [19]), и доказательство остается точно таким же.

Комбинируя шаги 1 и 2, получаем для $0 \leq i < k$

$$\Sigma_\Omega(\gamma(t_i^+)) \sim \Sigma_\Omega(\gamma(t_{i+1}^-)) = \Sigma_\Omega(\gamma(t_{i+1}^+)),$$

следовательно,

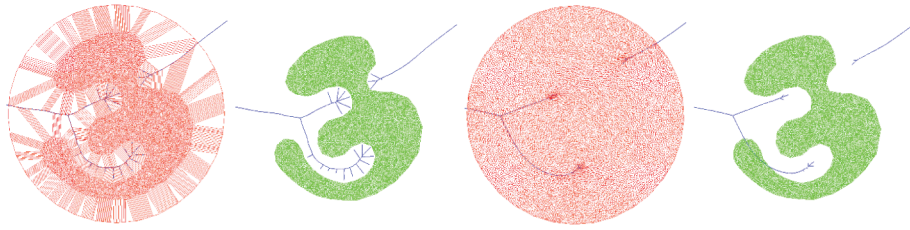
$$\Sigma_\Omega(\gamma(t_0)) \sim \Sigma_\Omega(\gamma(t_1^-)) = \Sigma_\Omega(\gamma(t_1^+)) \sim \dots \sim \Sigma_\Omega(\gamma(t_k)).$$

Теорема 8 доказана.

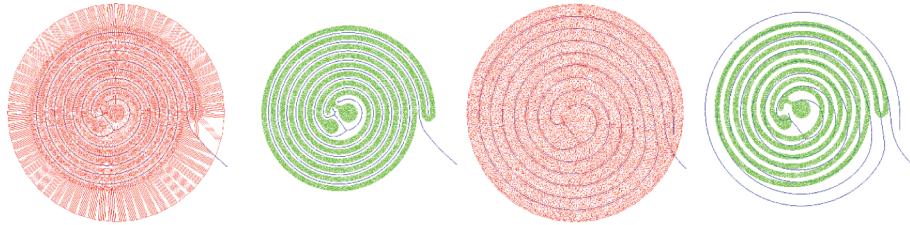
На фиг. 7 и 8 была показана связь гомотопии между сингулярными множествами оптимальных транспортных отображений для различных целевых мер. Мы видим, что мелкие ветви могут исчезнуть, но петли и крупные ветви хорошо сохраняются. На фиг. 10 показана деформация гомотопии между сингулярными множествами оптимальных транспортных отображений с единичного диска на область в форме морского конька с различными целевыми мерами. В начале мы вычисляем условную медиальную ось, а целевая мера на каждом u_i равна площади соответствующей ячейки. Конечной целевой мерой является равномерное распределение.

Более сложный пример показан на фиг. 11. Вычисляются оптимальные транспортные отображения с плоской спиральной формы на единичный диск, и извлекаются соответствующие сингулярные множества. Видно, что сингулярные множества (степенные медиальные оси) гомотопически эквивалентны друг другу.

В приложениях глубокого обучения набор обучающих данных кодируется в латентное пространство (см. фиг. 3), распределение латентных данных является суммой или мерой Дирака $v = n^{-1} \sum_{i=1}^n \delta(y - \varphi(x_i))$, где n – количество выборок, x_i – обучающая выборка. Оптимальное транспортное отображение может быть вычислено с помощью предложенного алгоритма



Фиг. 10. Сингулярные множества оптимальных транспортных отображений между единичным диском и формой морского конька с различными мерами.



Фиг. 11. Степенные медиальные оси гомотопны для сложной плоской области.

(см. фиг. 4). Сингулярность на опорном участке распределения белого шума и недифференцируемые точки на потенциале Бренье могут быть легко обнаружены. Полученные результаты можно увидеть на фиг. 2, схлопывание и смещение мод были устранены путем тщательной обработки сингулярностей оптимального транспортного отображения.

5. УСЛОВИЕ КРИВИЗНЫ ДЛЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ СИНГУЛЯРНОСТЕЙ

В этом разделе мы доказываем достаточное условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями. Ключевая идея заключается в обобщении концепции расстояния Фреше и использовании условия скошенности.

5.1. Нормальное расстояние Фреше

Предположим, человек выгуливает свою собаку, он проходит кривую γ_1 , а собака проходит γ_2 (фиг. 12а). Ни один из них не может двигаться назад. Расстояние Фреше между этими двумя кривыми равно длине самого короткого поводка. Расстояние Фреше дает лучшее измерение близости двух кривых, чем расстояние Хаусдорфа. Возможно, что две кривые имеют малое расстояние Хаусдорфа, но большое расстояние Фреше.

Пусть M – метрическое пространство; замкнутая кривая γ в M – непрерывное отображение из единичного круга в M , $\gamma : \mathbb{S}^1 \rightarrow M$; репараметризация α из \mathbb{S}^1 – сохраняющий ориентацию гомеоморфизм $\alpha : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^1$.

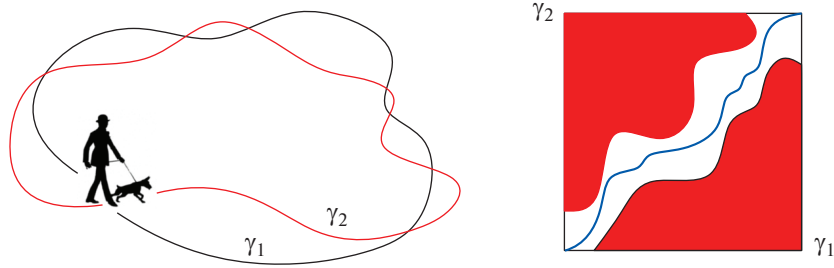
Определение 6 (расстояние Фреше). Пусть γ_1 и γ_2 – две заданные замкнутые кривые в M . Тогда *расстояние Фреше* $d_F(\gamma_1, \gamma_2)$ между γ_1, γ_2 определяется как инфимум по всем репараметризациям α и β из \mathbb{S}^1 максимума по всем $t \in \mathbb{S}^1$ расстояния в M между $\gamma_1(\alpha(t))$ и $\gamma_2(\beta(t))$, а именно,

$$d_F(\gamma_1, \gamma_2) = \inf_{\alpha, \beta} \max_{t \in \mathbb{S}^1} \{d_M(\gamma_1 \circ \alpha(t), \gamma_2 \circ \beta(t))\},$$

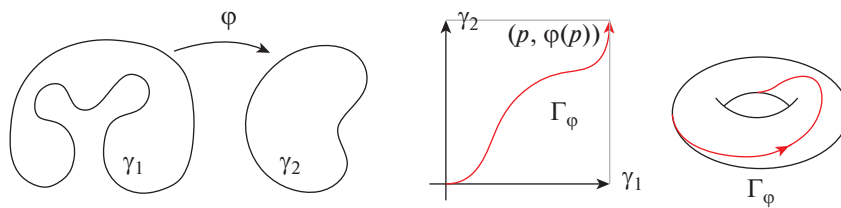
где d_M – геодезическое расстояние на M .

На фиг. 13 прямое произведение $\gamma_1 \times \gamma_2$ представлено в виде тора $T^2 := \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1$. На торе есть два канонических отображения широты и долготы:

$$\mathcal{F}_1 := \{(s, t) \in T^2 : t = \text{const}\}, \quad \mathcal{F}_2 := \{(s, t) \in T^2 : s = \text{const}\}.$$



Фиг. 12. Расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 и соответствующее свободное пространство Фреше между ними $F_\epsilon(\gamma_1, \gamma_2)$.



Фиг. 13. Пространство отображения между γ_1 и γ_2 , $H(\gamma_1, \gamma_2)$.

Диагональ обозначается как $\Delta = \{(p, p) \in S^1 \times S^1\}$. Гомеоморфизм между γ_1 и γ_2 есть $\varphi : S^1 \rightarrow S^1$, представленный в виде замкнутой кривой $\Gamma_\varphi \subset T^2$:

$$\Gamma_\varphi := \{(p, \varphi(p)) \in S^1 \times S^1\},$$

которая гомотопна Δ . Более того, Γ_φ имеет одно и только одно пересечение с каждым из листьев в \mathcal{F}_1 или в \mathcal{F}_2 . Все кривые такого вида представляют все гомеоморфизмы между γ_1 и γ_2 .

Определение 7 (пространство отображения). *Пространство отображения* между γ_1 и γ_2 , обозначаемое как $H(\gamma_1, \gamma_2)$, есть множество всех замкнутых кривых $\Gamma \subset T^2$, которое

- 1) гомотопна диагонали Δ ,
- 2) пересекает каждый из листьев в \mathcal{F}_1 в одной точке,
- 3) пересекает каждый из листьев в \mathcal{F}_2 в одной точке.

Мы можем представить фундаментальную область тора в виде квадрата, тогда $\Gamma \in H(\gamma_1, \gamma_2)$, если и только если кривая монотонна как в горизонтальной, так и в вертикальной координатах.

Определение 8 (свободное пространство Фреше). Учитывая замкнутые кривые γ_1, γ_2 в метрическом пространстве M и константу $\epsilon > 0$, свободное пространство между γ_1 и γ_2 определяется как

$$F_\epsilon(\gamma_1, \gamma_2) := \{(s, t) \in S^1 \times S^1 : d_M(\gamma_1(s), \gamma_2(t)) < \epsilon\}.$$

Как показано на фиг. 12б, каждая точка (s, t) на торе имеет красный цвет, если расстояние между соответствующими точками $\gamma_1(s)$ и $\gamma_2(t)$ больше ϵ , а белый иначе. Гомеоморфизм $\varphi : \gamma_1 \rightarrow \gamma_2$ показан синей кривой в свободном пространстве, что подразумевает $d_M(\gamma_1(s), \gamma_2 \circ \varphi(s)) < \epsilon$, для всех $s \in S^1$. Следующее предложение 2 очевидно.

Предложение 2. *Расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 меньше ϵ , если и только если существует кривая Γ в пространстве отображений $H(\gamma_1, \gamma_2)$, и Γ также находится в свободном пространстве Фреше $F_\epsilon(\gamma_1, \gamma_2)$.*

5.2. Нормальное расстояние Фреше

Предположим, что $\gamma : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ – замкнутая плоская кривая, $\gamma \in C^1$, поэтому нормаль везде определена. Кривая параметризуется длиной дуги $\gamma(s)$, единичная внешняя нормаль на $\gamma(s)$ представлена как $n(s) = (\cos \theta(s), \sin \theta(s))$, $\theta \in [0, 2\pi)$. Гауссово отображение $G : \gamma \rightarrow \mathbb{S}^1$ отображает каждую точку $\gamma(s)$ на нормаль $n(s)$.

Определение 9 (нормальное расстояние Фреше). Пусть $\gamma_1, \gamma_2 : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ – замкнутые C^1 -кривые на плоскости. Нормальное расстояние Фреше между ними определяется как расстояние Фреше между их образами отображения Гаусса на единичной окружности \mathbb{S}^1 , а именно,

$$d_{F_n}(\gamma_1, \gamma_2) := \inf_{\alpha, \beta} \max_{t \in \mathbb{S}^1} \{d_{\mathbb{S}^1}(G \circ \gamma_1 \circ \alpha(t), G \circ \gamma_2 \circ \beta(t))\},$$

где $d_{\mathbb{S}^1}$ – расстояние \mathbb{S}^1 , $\alpha, \beta : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^1$ – репараметризация \mathbb{S}^1 .

Аналогично, мы можем определить нормальное свободное пространство между γ_1 и γ_2 .

Определение 10 (нормальное свободное пространство). Пусть $\gamma_1, \gamma_2 : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ – замкнутые C^1 -кривые на плоскости. При фиксированном $\varepsilon > 0$ нормальное свободное пространство между γ_1 и γ_2 определяется как

$$F_{n,\varepsilon}(\gamma_1, \gamma_2) := \{(s, t) \in \mathbb{S}^1 \times \mathbb{S}^1 : d_{\mathbb{S}^1}(G \circ \gamma_1(s), G \circ \gamma_2(t)) < \varepsilon\}, \tag{17}$$

где $G : \gamma \rightarrow \mathbb{S}^1$ – отображение Гаусса.

Предложение 3. Пусть $\gamma_1, \gamma_2 \subset \mathbb{R}^2$ – две замкнутые C^1 -кривые, где γ_1 параметризуется длиной дуги, а γ_2 – строго выпуклая, параметризуемая обратным отображением Гаусса. Нормальное расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 меньше ε , если и только если существует кривая Γ в пространстве отображений $H(\gamma_1, \gamma_2)$, и Γ также находится в нормальном свободном пространстве Фреше $F_{n,\varepsilon}(\gamma_1, \gamma_2)$.

Доказательство. В соответствии с определениями пространства отображения и нормального расстояния Фреше доказательство является простым.

Форма плоской C^2 -кривой определяется исключительно ее кривизной, поэтому нормальное расстояние Фреше определяется кривизной обеих кривых γ_1 и γ_2 . Для данной цели мы рассмотрим только простой случай, когда γ_2 является строго выпуклой кривой, такой как единичный круг \mathbb{S}^1 , который параметризуется обратным значением его отображения Гаусса.

Лемма 1 (условие кривизны). При тех же гипотезах предложения 3, если существует сегмент кривой $\gamma \subset \gamma_1$, начинающийся из p и заканчивающийся в q , удовлетворяющий $s(q) > s(p)$ и

$$\theta(q) \leq \theta(p) - \pi, \tag{18}$$

где s – параметризация длины дуги γ_1 , а θ – образ отображения Гаусса, т.е. угол единичной внешней нормали, тогда нормальное расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 больше $\pi/2$, $d_{F_n}(\gamma_1, \gamma_2) > \pi/2$.

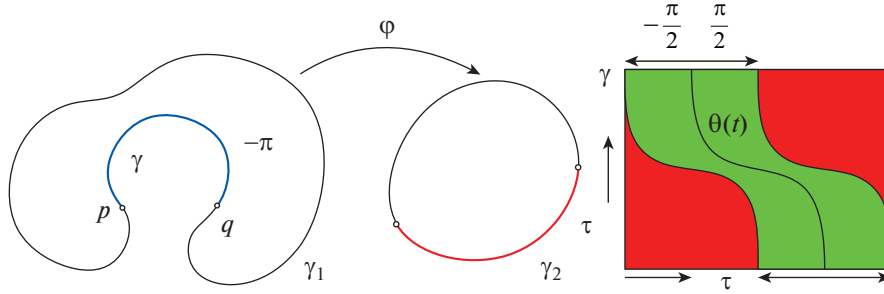
Более того, если γ является C^2 , то условие (18) можно заменить следующим условием кривизны:

$$\int_p^q \kappa(s) ds \leq -\pi, \tag{19}$$

где κ – знаковая кривизна γ относительно направленного внутрь единичного нормального вектора.

Доказательство. Предположим, что τ – произвольный отрезок γ_2 , $\tau \subset \gamma_2$. Построим нормальное свободное пространство между γ и τ , как показано на фиг. 14. Заметим, что когда γ является C^2 , (19) подразумевает (18) как из (19),

$$\theta(q) = \theta(p) + \int_p^q \kappa(s) ds \leq \theta(p) - \pi, \tag{20}$$



Фиг. 14. Условие общей кривизны π : если существует сегмент кривой γ с общей кривизной меньше $-\pi$, то нормальное расстояние Фреше между кривой и окружностью больше $\pi/2$.

поэтому достаточно рассмотреть (18).

Нормальное свободное пространство – это зеленая область в прямоугольнике, p и q соответствуют нижнему и верхнему краю. Из (20) имеем, что левый нижний угол и правый верхний угол зеленой области разделены вертикальной линией, следовательно, любая кривая, содержащаяся в зеленой области, не может быть монотонно возрастающей (заметим, что вертикальная линия исключается определением 7). Это показывает, что любой гомеоморфизм $\varphi : \gamma \rightarrow \tau$ и его граф Γ_φ должны пересекать красную область. Поэтому нормальное расстояние Фреше между γ_1 и γ_2 должно быть больше, чем $\pi/2$. Лемма 1 доказана.

5.3. Скошенность

Оптимальное транспортное отображение удовлетворяет условию скошенности: угол между нормалью в каждой граничной точке и нормалью в точке ее изображения должен быть не тупым.

Лемма 2 (скошенность). Пусть $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^n$ – ограниченные области, Ω – выпуклая, $\partial\Omega^* - C^1$.

Функции плотности f и g удовлетворяют условию равновесия $\int_\Omega f = \int_{\Omega^*} g$ и ограничены, $0 < c_0 < f$, $g < c_1 < \infty$, потенциал Бренье $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, его дуал Лежандра $u^* : \Omega^* \rightarrow \mathbb{R}$. Предположим, что $x \in \partial\Omega$ и $y \in \partial\Omega^*$, $Du(x) = y$, тогда

$$\langle n(x), n(y) \rangle \geq 0. \tag{21}$$

Доказательство. Предположим обратное, как показано на фиг. 15, существует $x \in \partial\Omega^*$ и $y \in \partial\Omega$, $\langle n(x), n(y) \rangle < 0$, тогда $\langle -n(x), n(y) \rangle \geq 0$. Пусть $z = x - \varepsilon n(y)$, имеем $z \in \Omega^*$ для достаточно малого $\varepsilon > 0$. По предположению $\nabla u^*(z) \in \Omega$. Тогда в силу выпуклости u^*

$$\begin{aligned} \langle \nabla u^*(z) - \nabla u^*(x), z - x \rangle &\geq 0, \\ \langle \nabla u^*(z) - y, z - x \rangle &\geq 0, \\ \langle \nabla u^*(z) - y, -n(y) \rangle &\geq 0, \\ \langle \nabla u^*(z) - y, n(y) \rangle &\leq 0. \end{aligned}$$

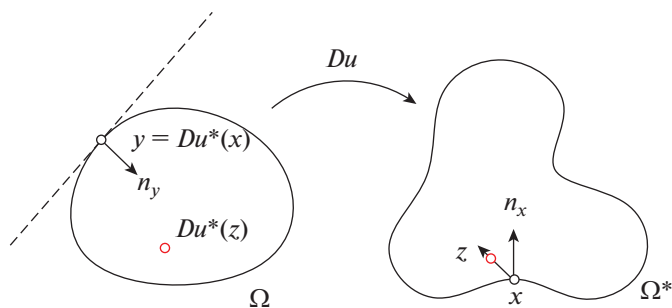
Получаем противоречие тому, что $\nabla u^*(z) \in \Omega$ является внутренней точкой. Лемма 2 доказана.

Далее мы покажем, что если области удовлетворяют умеренным условиям, а оптимальное транспортное отображение не имеет сингулярности, то его ограничение на границе гомеоморфно.

Лемма 3. Предположим, что $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^2$ – ограниченные открытые области, Ω – выпуклая, $\partial\Omega^*$ есть C^1 -кривая, функции плотности

$$0 < c_0 \leq f, \quad g \leq c_1.$$

Если потенциал Бренье u не имеет сингулярности на $\bar{\Omega}$, то Du , ограниченный на границе $Du|_{\partial\Omega} : \partial\Omega \rightarrow \partial\Omega^*$, является гомеоморфным.



Фиг. 15. Условие скошенности для оптимального транспортного отображения.

Доказательство. Пусть v – дуал Лежандра от u , $v(y) := \sup_{x \in \Omega} \langle x, y \rangle - u(x)$,
 $\tilde{v}(y) := \sup\{L(y) \mid L \geq v \text{ on } \Omega^*, DL \in \Omega, L \text{ affine}\}$,

тогда по двумерной теории регулярности, $\tilde{v} \in C^1(\overline{\Omega^*})$, $Du \circ D\tilde{v} = \text{id}$. Это показывает, что Du является гомеоморфизмом из $\overline{\Omega}$ в $\overline{\Omega^*}$.

Теперь мы можем привести доказательство следующей теоремы, которая показывает существование сингулярности оптимального транспортного отображения между плоскими областями. Эта теорема впервые была получена в [20], доказательство здесь намного проще.

Теорема 9 (существование сингулярности). Пусть $\Omega, \Omega^* \subset \mathbb{R}^2$ – ограниченные области, Ω – выпуклая, $\partial\Omega^*$ есть C^1 -кривая, и существует отрезок $\gamma \subset \partial\Omega^*$ такой, что

$$\int_{\gamma} k(s) ds < -\pi, \tag{22}$$

тогда для любых функций плотности f и g , удовлетворяющих условию равновесия $\int_{\Omega} f = \int_{\Omega^*} g$ и ограниченных, $0 < c_0 < f, g < c_1$, оптимальное транспортное отображение должно иметь непустое сингулярное множество в $\overline{\Omega}$.

Доказательство. Предположим, что существуют функции плотности f, g , удовлетворяющие условию равновесия $\int f = \int g$ и условию ограниченности $0 < c_0 < f, g < c_1$, соответствующий потенциал Бренье равен u , такой, что оптимальное транспортное отображение Du не имеет сингулярности на $\overline{\Omega}$.

По лемме 3 ограничение Du на границу $\partial\Omega$ является гомеоморфизмом. По лемме 2 для любых $p \in \partial\Omega$, $Du(p) \in \partial\Omega^*$, $\langle n(p), Du(p) \rangle \geq 0$. Поэтому $F_n(\partial\Omega, \partial\Omega^*) \leq \pi/2$.

По лемме 1 и условию кривизны (22) $F_n(\partial\Omega, \partial\Omega^*) > \pi/2$ получаем противоречие. Следовательно, предположение неверно для любых функций плотности f, g , удовлетворяющих условию равновесия и условию ограниченности, оптимальное транспортное отображение Du должно иметь сингулярности в $\overline{\Omega}$.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы сосредоточились на изучении сингулярных множеств оптимальных транспортных отображений Бренье. Во-первых, мы обобщаем понятие медиальной оси до степенной медиальной оси (определение 4), которая описывает сингулярные множества полудискретных оптимальных транспортных отображений (предложение 1). Во-вторых, мы предлагаем алгоритм, основанный на геометрическом вариационном принципе с использованием степенных диаграмм для вычисления степенной медиальной оси. В-третьих, доказываем, что при непрерывном изменении мер соответствующие сингулярные множества оптимальных транспортных отображений деформируются гомотопически (теорема 8). Кроме того, мы даем достаточное

условие существования сингулярностей оптимальных транспортных отображений между плоскими областями с точки зрения кривизны границ, основанное на условии скошенности и нормальном расстоянии Фреше (теорема 9).

Мы планируем продолжить изучение достаточных и необходимых условий существования сингулярных множеств, как топологически, так и геометрически, и обобщить функцию стоимости с квадратичного евклидова расстояния на строго выпуклые функции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Goodfellow I., Pouget-Abadie J., Mirza M., Xu B., Warde-Farley D., Ozair Sh., Courville A., Bengio Y.* Generative adversarial nets. 2014. NIPS. P. 2672–2680.
2. *Kingma D.P., Welling M.* Auto-encoding variational bayes. arXiv:1312.6114, 2013.
3. *Lei N., An D., Guo Y., Su K., Liu Sh., Luo Zh., Yau Sh.-T., Gu X.* A geometric understanding of deep learning // *Engineer.* 2020. V. 6. № 3. P. 361–374.
4. *An D., Guo Y., Lei N., Luo Zh., Yau Sh.-T., Gu X.* Ae-ot: A new generative model based on extended semi-discrete optimal transport. *Inter. Conf. Learn. Representat.*, 2020.
5. *Goodfellow I.* Nips 2016 tutorial: Generative adversarial networks. arXiv:1701.00160, 2016.
6. *Lei N., Su K., Cu L.i., Yau Sh.-T., Gu D.X.* A geometric view of optimal transportation and generative mode // *Comput. Aided Geometr. Design*, 2017.
7. *An D., Guo Y., Lei N., Luo Zh., Yau Sh.-T., Gu X.* Ae-ot: A new generative model based on extended semi-discrete optimal transport. *Eighth Inter. Conf. Learn. Representat. (ICLR)*, 2020.
8. *Brenier Y.* Polar factorization and monotone rearrangement of vector-valued functions // *Comm. Pure Appl. Math.* 1991. V. 44. № 4. P. 375–417.
9. *Brenier Y.* Polar decomposition and increasing rearrangement of vector fields // *C. R. Acad. Sci. Paris Sr. I Math.* 1987. V. 305. № 19. P. 805–808.
10. *Figalli A.* Regularity properties of optimal maps between nonconvex domains in the plane // *Comm. Part. Different. Equat.* 2010. V. 35. № 3. P. 465–479.
11. *Chen Sh., Figalli A.* Partial $w_{2,p}$ regularity for optimal transport maps // *J. Funct. Anal.* 2017. V. 272. P. 4588–4605.
12. *Alexandrov A.D.* Convex polyhedral. Translated 1950. Russian ed. by N.S. Dairbekov, S.S. Kutateladze, A.B. Sossinsky. Springer Monograph. Math. Springer-Verlag, Berlin, 2005.
13. *Gu X., Luo F., Sun J., Yau Sh.-T.* Variational principles for minkowski type problems, discrete optimal transport, and discrete monge-ampere equations // *Asian J. Math.* 2016. V. 20. № 2. P. 383–398.
14. *Aurenhammer F.* Power diagrams: properties, algorithms and applications // *SIAM J. Comput.* 1987. V. 16. № 1. P. 78–96.
15. *Gel'fand I.M., Kapranov M.M., Zelevinsky A.V.* Discriminants, resultants, and multidimensional determinants. Birkhäuser, 1994.
16. *Loera J.A., Rambau J., Santos F.* Triangulations. Structures for algorithms and application, vol. 25 of Algorithms and Comput. in Math. Springer-Verlag, Berlin, 2010.
17. *Lei N., Chen W., Luo Zh., Si H., Gu X.* Secondary power diagram, dual of secondary polytope // *Comput. Math. Math. Phys.* 2019. V. 59. № 12. P. 1965–1981.
18. *Figalli A.* Regularity properties of optimal maps between nonconvex domains in the plane // *Comm. Part. Different. Equat.* 2010. V. 35. № 3. P. 465–479.
19. *Joe B.* Construction of three-dimensional delaunay triangulations using local transformations // *Comp. Aided Geometr. Design.* 1991. V. 8. № 2. P. 123–142.
20. *Chodosh O., Jain V., Lindsey M., Panchev L., Rubinstein Y.A.* On discontinuity of planar optimal transport map. arxiv:1312:2929, 2014.