



MATEMATIČKI FAKULTET · UNIVERZITET U BEOGRADU

Veza između informacione geometrije, teorije optimalnog transporta i difuzionih procesa

Nikola Vučić

Avgust 2026

Beograd

Mentor:

dr Ana Merkle, docent
Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

Članovi komisije:

prof. dr Đorđe Krtinić, redovni profesor
Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

dr Bojana Todić, docent
Univerzitet u Beogradu, Matematički fakultet

Datum odbrane:

Sadržaj

1	Uvod	5
1.1	Motivacija	5
1.2	Elementi diferencijalne geometrije	5
1.3	Stohastičke diferencijalne jednačine	8
2	Informaciona geometrija	10
2.1	Statističke mnogostrukosti i princip maksimalne entropije	10
2.2	Fišerova informaciona metrika	13
2.3	Gausova familija i hiperbolička geometrija	15
2.4	Dualne konekcije	18
2.5	Bregmanova divergencija i uopštena Pitagorina teorema	22
3	Difuzioni procesi	30
3.1	Generator difuzionog procesa	30
3.2	Adjungovani operator	31
3.3	Foker-Plank jednačina	33
3.4	Dirihleova forma	35
3.5	Girsanovljeva teorema	38
3.6	Ornštajn-Ulenbek proces	40
4	Optimalni transport	42
4.1	Monžov problem	42
4.2	Kantorovičeva relaksacija	43
4.3	Kantorovičeva dualnost	44
4.4	Vaserštajn rastojanje	47
4.5	Entropijska regularizacija	48
4.6	Sinkhorn algoritam kao Bregmanove projekcije	51
5	Veze i dualnost	55
5.1	Oto kalkulus	55
5.2	Foker-Plank jednačina kao Vaserštajn gradijentni tok	58
5.3	Problem Šredingerovog mosta	60
5.4	Problem Šredingerovog mosta kao entropijski optimalni transport	63
5.5	Sinkhornov algoritam za rešavanje Šredingerovog problema	65
5.6	Problem Šredingerovog mosta kao stohastička diferencijalna jednačina	68
5.7	Spektralni jaz i brzina konvergencije	70
5.8	Gausov primer	73
6	Zaključak	76

1 Uvod

Ovaj rad bavi se vezama između tri oblasti savremene matematike: informacione geometrije, teorije difuzionih procesa i teorije optimalnog transporta. Iako su ove oblasti istorijski razvijane nezavisno i sa različitim motivacijama, u poslednjih nekoliko decenija postalo je jasno da dele zajedničku matematičku strukturu. Centralni objekat koji sve tri oblasti povezuje je prostor mera verovatnoće, a zajednički jezik kojim se ta veza opisuje je geometrija tog prostora.

Cilj rada je da tu vezu učini eksplicitnom. Svaka od tri oblasti biće obrađena samostalno, sa naglaskom na onim aspektima koji su relevantni za konačnu vezu. Poglavlje 2 uvodi informacionu geometriju. Poglavlje 3 razvija teoriju difuzionih procesa. Poglavlje 4 izlaže teoriju optimalnog transporta. Poglavlje 5 sintetizuje sve tri oblasti, i pokazuje da su dualnosti koje se pojavljuju u svakoj od njih zapravo različite manifestacije iste matematičke strukture na prostoru mera.

1.1 Motivacija

Zamislimo skup svih mogućih raspodela verovatnoće. Prirodno se postavlja pitanje kako meriti razliku između dve raspodele, i kako zamisliti kretanje od jedne raspodele ka drugoj. Ovo nije samo apstraktno pitanje. Odgovor na njega određuje kako algoritmi uče iz podataka, kako fizički sistemi evoluiraju pod dejstvom slučajnih uticaja, i kako se neka veličina, poput mase ili resursa, optimalno raspoređuje iz jedne konfiguracije u drugu. Pokazuje se da postoji više prirodnih odgovora na ovo pitanje, i da svaki od njih vodi ka jednoj od oblasti kojima se ovaj rad bavi.

Posebnu ulogu u radu ima pitanje koje je Ervin Šredinger postavio 1931. godine. Zamislimo oblak čestica koji se kreće potpuno slučajno, i pretpostavimo da znamo kako je taj oblak raspoređen u početnom trenutku, kao i kako je raspoređen u nekom kasnijem trenutku. Koji je najverovatniji način na koji je oblak prešao iz jedne konfiguracije u drugu? Ovo pitanje, formulirano decenijama pre nego što su moderna teorija optimalnog transporta i informaciona geometrija uopšte postojale, pokazuje se kao prirodna spona između sve tri oblasti kojima se rad bavi.

Teorija optimalnog transporta doživela je snažnu renesansu u poslednjih dvadeset godina, delimično zbog primena u mašinskom učenju, gde se pojavljuje u kontekstu modela koji uče da generišu podatke postepenim uklanjanjem slučajnog šuma, kao i u obradi podataka i optimizaciji. Cilj ovog rada je teorijski: razumeti zašto su veze između optimalnog transporta, informacione geometrije i difuzionih procesa duboke, i koji ih matematički mehanizmi zapravo povezuju.

1.2 Elementi diferencijalne geometrije

Diferencijalna geometrija pruža prirodan jezik za opisivanje prostora koji lokalno liče na euklidski prostor, ali čija globalna struktura može biti zakrivljena ili netrivialna. U ovom radu taj jezik nam je neophodan iz dva razloga. Prvo, statistička mnogostrukost uvedena u narednom poglavlju jeste, u tehničkom smislu, glatka mnogostrukost opremljena Rimanovom metrikom, pa je pojmovni aparat diferencijalne geometrije neophodan da bismo tu strukturu precizno opisali. Drugo, isti aparat, primenjen na (formalno, beskonačnodimenzioni) prostor mera verovatnoće, leži u osnovi Oto kalkulusa kojim ćemo se baviti kasnije u radu. U ovom odeljku uvodimo samo one pojmove diferencijalne geometrije koji su nam neophodni za dalje izlaganje, u saglasnosti sa Lee [23].

Definicija 1.1. *Glatka mnogostrukost dimenzije d je Hausdorfov topološki prostor M sa prebrojivom bazom, koji je lokalno homeomorfan sa $\mathbb{R}^d$: svaka tačka $p \in M$ ima otvorenu okolinu U i preslikavanje $\varphi : U \rightarrow \mathbb{R}^d$ (kartu) koje je homeomorfizam na svoju sliku, pri čemu su prelazi između karata glatki.*

Intuitivno, mnogostrukost je prostor koji izbliza izgleda kao $\mathbb{R}^d$, iako globalno može imati sasvim drugačiju strukturu, npr. sfera je dvodimenziona mnogostrukost, iako nije ravan.

Tangentni prostor $T_p M$ u tački $p \in M$ je d -dimenzioni vektorski prostor koji lokalno aproksimira M u okolini p , intuitivno, prostor svih pravaca u kojima se iz p možemo kretati po M . U lokalnim koordinatama $\theta = (\theta^1, \dots, \theta^d)$, prirodnu bazu $T_p M$ čine parcijalni izvodi $\partial_1, \dots, \partial_d$ u pravcu koordinatnih linija.

Kotangentni prostor $T_p^* M$ je dual tangentnog prostora, prostor svih linearnih funkcionala na $T_p M$. Njegovu prirodnu bazu čine diferencijali koordinata $d\theta^1, \dots, d\theta^d$, definisani uslovom $d\theta^i(\partial_j) = \delta_j^i$. Elementi $T_p^* M$ nazivaju se kovektorima; primer koji ćemo sretati u narednom poglavlju je skor funkcija, čije se komponente $s_i = \partial_i \log p$ transformišu kao komponente kovektora, a ne vektora.

Preslikavanje $T : M \rightarrow N$ između dve glatke mnogostrukosti je glatko ako je glatko u lokalnim koordinatama obe mnogostrukosti. Svakom glatkom preslikavanju T pridružen je, u svakoj tački $p \in M$, njegov diferencijal $dT_p : T_p M \rightarrow T_{T(p)} N$, linearno preslikavanje koje tangentne vektore u p prevodi u tangentne vektore u $T(p)$. Ovaj pojam će nam kasnije biti potreban za definisanje pušforward mere kroz preslikavanje T , u kontekstu optimalnog transporta.

U izrazima koji slede, kad god se isti indeks pojavljuje jednom kao gornji i jednom kao donji, po njemu se automatski sumira, bez eksplicitnog pisanja znaka sume. Na primer,

$$g_{ij} d\theta^i d\theta^j \quad \text{označava} \quad \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d g_{ij} d\theta^i d\theta^j.$$

Ovu konvenciju, koju je uveo Ajnštajn radi preglednosti tenzorskih izraza, korišćićemo dosledno u daljem tekstu.

Klasična Pitagorina teorema kaže da je kvadrat rastojanja između dve bliske tačke u euklidskom prostoru, izraženih u ortonormiranim koordinatama, jednak zbiru kvadrata razlika koordinata, $d\ell^2 = \sum_a (d\theta^a)^2$. Kada koordinate nisu međusobno ortogonalne, ili kada prostor u kome se nalazimo nije ravan, ovaj izraz se uopštava uvođenjem metričkog tenzora g_{ab} ,

$$d\ell^2 = g_{ab} d\theta^a d\theta^b,$$

gde se klasična Pitagorina teorema dobija kao specijalan slučaj za $g_{ab} = \delta_{ab}$.

Definicija 1.2. *Rimanova mnogostrukost je par (M, g) , gde je M glatka mnogostrukost, a g glatko pridruživanje pozitivno definitnog skalarnog proizvoda $g_p : T_p M \times T_p M \rightarrow \mathbb{R}$ svakoj tački $p \in M$. Preslikavanje g naziva se Rimanova metrika.*

U lokalnim koordinatama, Rimanova metrika je zadata matricom $g_{ab}(\theta) = g_\theta(\partial_a, \partial_b)$, tzv. Gramovom matricom baznih vektora ∂_a . Ključna činjenica je da je poznavanje same Gramove matrice $g_{ab}(\theta)$ dovoljno za računanje dužina i uglova između tangentnih vektora u tački θ : za vektore $u = u^a \partial_a$ i $v = v^b \partial_b$ imamo

$$\langle u, v \rangle_\theta = g_{ab}(\theta) u^a v^b, \quad \|u\|_\theta = \sqrt{g_{ab}(\theta) u^a u^b}, \quad \cos \angle(u, v) = \frac{g_{ab} u^a v^b}{\|u\|_\theta \|v\|_\theta},$$

bez potrebe da eksplicitno poznajemo same bazne vektore ∂_a kao geometrijske objekte. Sva geometrijska informacija sadržana je u matrici $g_{ab}(\theta)$.

Ako je $\gamma : [0, 1] \rightarrow M$ glatka kriva sa koordinatnim zapisom $\theta(t) = (\theta^1(t), \dots, \theta^d(t))$, njena dužina u odnosu na Rimanovu metriku g definiše se kao

$$L(\gamma) = \int_0^1 \sqrt{g_{ab}(\theta(t)) \dot{\theta}^a(t) \dot{\theta}^b(t)} dt,$$

gde je $\dot{\theta}^a = d\theta^a/dt$. Ovo je direktno uopštenje formule za dužinu luka na krivolinijske koordinate i zakrivljene prostore.

Pored dužine, poznavanje Rimanove metrike omogućava i merenje zapremine. Element zapremine na (M, g) dat je sa

$$dV = \sqrt{\det g(\theta)} d\theta^1 \cdots d\theta^d,$$

pri čemu je faktor $\sqrt{\det g}$ neophodan jer koordinate θ^a same po sebi, bez metrike, ne nose informaciju o gustini prostora: isti koordinatni element $d\theta^1 \cdots d\theta^d$ može odgovarati različitim stvarnim zapreminama u različitim tačkama, u zavisnosti od $g(\theta)$. Sa ovim elementom zapremine srešćemo se u narednom poglavlju, u obliku Džefrisove apriorne raspodele $\pi_J \propto \sqrt{\det g}$.

Rimanova metrika omogućava merenje dužina i uglova u svakoj tangentnoj ravni ponaosob, ali ne govori kako da uporedimo tangentne vektore u različitim tačkama mnogostrukosti. Za to je potreban dodatni pojam, konekcija, odnosno kovarijantni izvod.

Definicija 1.3. *Afina konekcija na M je preslikavanje ∇ koje paru glatkih vektorskih polja (X, Y) pridružuje vektorsko polje $\nabla_X Y$, $C^\infty(M)$ -linearno po X (tj. $\nabla_{fX_1 + gX_2} Y = f\nabla_{X_1} Y + g\nabla_{X_2} Y$ za sve $f, g \in C^\infty(M)$), i $\mathbb{R}$ -linearno po Y , zadovoljavajući Lajbnicovo pravilo $\nabla_X(fY) = (Xf)Y + f\nabla_X Y$ za svako $f \in C^\infty(M)$.*

Konekcija sama po sebi nije jedinstveno određena mnogostrukošću; da bi bila usklađena sa Rimanovom strukturom, na nju se postavljaju dva dodatna zahteva.

Definicija 1.4. *Konekcija ∇ na Rimanovoj mnogostrukosti (M, g) je kompatibilna sa metrikom ako za sva vektorska polja X, Y, Z važi*

$$X\langle Y, Z \rangle = \langle \nabla_X Y, Z \rangle + \langle Y, \nabla_X Z \rangle,$$

a bez torzije ako za sva vektorska polja X, Y važi

$$\nabla_X Y - \nabla_Y X = [X, Y],$$

gde je $[X, Y] = XY - YX$ Lijeva zagrada vektorskih polja.

Uslov kompatibilnosti sa metrikom znači da paralelni transport duž bilo koje krive čuva skalarni proizvod, dok odsustvo torzije znači da konekcija ne unosi dodatno "uvrtanje" prilikom transporta. Osnovna teorema Rimanove geometrije tvrdi da ova dva uslova jednoznačno određuju konekciju.

Teorema 1.5 (Osnovna teorema Rimanove geometrije). *Na svakoj Rimanovoj mnogostrukosti (M, g) postoji jedinstvena konekcija koja je kompatibilna sa metrikom i bez torzije. Naziva se Levi-Čivita konekcija.*

Kristofelovi simboli Levi-Čivita konekcije u lokalnim koordinatama dati su sa

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{kl} (\partial_i g_{jl} + \partial_j g_{il} - \partial_l g_{ij}), \quad (1)$$

gde je g^{kl} inverzna matrica od g_{ij} . Simboli Γ_{ij}^k , definisani relacijom $\nabla_{\partial_i} \partial_j = \Gamma_{ij}^k \partial_k$, nazivaju se Kristofelovim simbolima druge vrste. Pored njih, u radu ćemo koristiti i Kristofelove simbole prve vrste, definisane sa

$$\Gamma_{ij,k} := g(\nabla_{\partial_i} \partial_j, \partial_k) = g_{kl} \Gamma_{ij}^l, \quad (2)$$

odnosno, obrnuto, $\Gamma_{ij}^k = g^{kl} \Gamma_{ij,l}$. Razlika je, dakle, samo u tome da li je poslednji indeks podignut ili spušten metrikom; simboli prve vrste su često pogodniji za račun jer izbegavaju invertovanje matrice g .

Levi-Čivita konekcija je jedinstveni prirodan izbor u opštoj Rimanovoj geometriji; videćemo, međutim, da statistička mnogostrukost nosi i druge, statistički prirodne konekcije, različite od Levi-Čivita konekcije, koje ćemo uvesti u odeljku 2.4. Njihova međusobna veza opisuje se sledećim uopštenjem uslova kompatibilnosti sa metrikom.

Definicija 1.6. Dve konekcije ∇ i ∇^* na (M, g) nazivaju se dualnim (ili konjugovanim) u odnosu na g ako za sva glatka vektorska polja X, Y, Z važi

$$X\langle Y, Z \rangle = \langle \nabla_X Y, Z \rangle + \langle Y, \nabla_X^* Z \rangle.$$

Kompatibilnost sa metrikom je, dakle, specijalan slučaj ove definicije za $\nabla^* = \nabla$, tj. Levi-Čivita konekcija je jedina konekcija koja je sama sebi dualna. Za proizvoljnu konekciju ∇ postoji jedinstvena dualna konekcija ∇^* , i njihovi Kristofelovi simboli prve vrste zadovoljavaju

$$\partial_k g_{ij} = \Gamma_{ik,j} + \Gamma_{jk,i}^*.$$

Dualnost konekcija predstavlja uopštenje pravila za izvod skalarnog proizvoda: umesto da istu konekciju primenimo na oba argumenta, dozvoljavamo da se izvod raspodeli između konekcije ∇ na jednom i njene dualne ∇^* na drugom argumentu. Ova naizgled tehnička definicija ima duboke posledice, koje ćemo videti u kontekstu statističkih mnogostrukosti.

1.3 Stohastičke diferencijalne jednačine

Kroz ceo rad korišćićemo stohastičke procese i stohastičke diferencijalne jednačine kao osnovni jezik za opis difuzije, kako u Poglavlju 3 tako i u formulaciji Šredingerovog problema mosta u Poglavlju 5. U ovom odeljku sažeto navodimo definicije i rezultate koje ćemo koristiti, uglavnom bez dokaza, uz reference na literaturu [35, 15].

Pre nego što uvedemo Braunovo kretanje, korisno je precizirati u kom smislu ćemo, kroz ceo rad, poistovećivati stohastički proces sa merom. Neka je $\Omega = C([0, \infty), \mathbb{R}^n)$ prostor svih neprekidnih funkcija $\omega : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$, opremljen σ -algebrom $\mathcal{F}$ generisanom cilindričnim skupovima, i neka je na Ω definisan *koordinatni proces* $X_t(\omega) := \omega(t)$. Stohastički proces poistovećujemo sa verovatnosnom merom P na $(\Omega, \mathcal{F})$: par (X_t, P) određuje proces čije su konačno-dimenzionalne raspodele, za proizvoljne $0 \leq t_1 < \dots < t_k$ i Borelove skupove $A_1, \dots, A_k$, date sa

$$P(X_{t_1} \in A_1, \dots, X_{t_k} \in A_k) = P(\{\omega \in \Omega : \omega(t_1) \in A_1, \dots, \omega(t_k) \in A_k\}).$$

Prema Kolmogorovljevoj teoremi o proširenju, mera P jedinstveno je određena svojom familijom konačno-dimenzionalnih raspodela, i obrnuto, pa su ova dva pogleda na proces, kao familiju slučajnih promenljivih indeksiranih vremenom i kao meru na prostoru putanja, potpuno ekvivalentni. Ovaj drugi pogled biće nam neophodan u Poglavlju 5.

Definicija 1.7. *Standardno Braunovo kretanje u $\mathbb{R}^n$ je proces $(W_t)_{t \geq 0}$ takav da je $W_0 = 0$ skoro sigurno, ima skoro sigurno neprekidne putanje, nezavisne priraštaje (za $0 \leq s < t$, $W_t - W_s$ je nezavisno od $\{W_u : u \leq s\}$), i $W_t - W_s \sim \mathcal{N}(0, (t - s)I)$ za sve $0 \leq s < t$.*

Egzistencija ovakvog procesa nije trivijalna činjenica, već zahteva konstrukciju odgovarajuće mere na Ω^1 . Putanje Braunovog kretanja su skoro sigurno neprekidne, ali nigde diferencijabilne funkcije, i imaju neograničenu varijaciju na svakom konačnom intervalu. Ova poslednja činjenica je od suštinskog značaja: ona onemogućava da se integral oblika $\int_0^t H_s dW_s$ definiše na klasičan, Riman-Stiltjesov način, i zahteva poseban pristup.

Za dovoljno regularan, adaptiran i kvadratno integrabilan proces $(H_t)_{t \geq 0}$, Itov integral $\int_0^t H_s dW_s$ definiše se najpre za proste, stepenaste procese, direktnom sumom priraštaja Braunovog kretanja, a zatim se proširuje na opšte procese graničnim prelazom u L^2 , koristeći Itovu izometriju,

$$\mathbb{E} \left[\left(\int_0^t H_s dW_s \right)^2 \right] = \mathbb{E} \left[\int_0^t H_s^2 ds \right],$$

koja garantuje konvergenciju konstrukcije. Za razliku od klasičnog integrala, Itov integral $\int_0^t H_s dW_s$ je, kao proces u t , martingal, sa očekivanjem $\mathbb{E} \left[\int_0^t H_s dW_s \right] = 0$ za svako t , što ćemo koristiti na više mesta u Poglavlju 3.

Preko Itovog integrala definišemo centralni objekat ovog rada.

Definicija 1.8. *Neka su $b : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ i $\sigma : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ data preslikavanja. Itov proces, ili rešenje stohastičke diferencijalne jednačine, je proces $(X_t)_{t \geq 0}$ oblika*

$$X_t = X_0 + \int_0^t b(X_s) ds + \int_0^t \sigma(X_s) dW_s, \quad (3)$$

što se skraćeno zapisuje u diferencijalnom obliku kao

$$dX_t = b(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t.$$

Funkcija b naziva se drift, a σ matrica difuzije.

Postavlja se prirodno pitanje kada jednačina (3) uopšte ima rešenje, i kada je to rešenje jedinstveno. Sledeća teorema daje standardan, dovoljan uslov.

Teorema 1.9 (Egzistencija i jedinstvenost). *Neka b, σ zadovoljavaju uslov globalne Lipšic neprekidnosti i uslov linearnog rasta, tj. neka postoji $K > 0$ takvo da za sve $x, y \in \mathbb{R}^n$ važi*

$$|b(x) - b(y)| + \|\sigma(x) - \sigma(y)\| \leq K|x - y|, \quad |b(x)| + \|\sigma(x)\| \leq K(1 + |x|).$$

Tada za svaki početni uslov X_0 , nezavisan od (W_t) i sa konačnim drugim momentom, SDE (3) ima jedinstveno jako rešenje na $[0, \infty)$, u smislu da su bilo koja dva rešenja skoro sigurno jednaka kao procesi.

¹Prvi rigorozan dokaz egzistencije dao je Viner 1923. godine, konstruišući meru $\mathbb{W}$ na $\Omega = C([0, \infty), \mathbb{R})$ pod kojom je koordinatni proces standardno Braunovo kretanje. Par $(\Omega, \mathbb{W})$ danas se naziva Vinerov prostor, a $\mathbb{W}$ Vinerova mera.

Videti Øksendal [35, Poglavlje 5] za dokaz i preciznu formulaciju pojma jakog rešenja. Kroz ceo rad, kada pišemo stohastičku diferencijalnu jednačinu, prećutno pretpostavljamo da su ovi uslovi ispunjeni, bez posebnog navođenja uz svaku pojedinačnu jednačinu.

Poslednji rezultat koji nam je potreban jeste stohastički analogon lančanog pravila, koji nam omogućava da diferenciramo funkciju Itovog procesa.

Teorema 1.10 (Itova formula). *Neka je (X_t) Itov proces oblika (3) i $f \in C^2(\mathbb{R}^n)$. Tada je i $f(X_t)$ Itov proces, i važi*

$$f(X_t) = f(X_0) + \int_0^t \nabla f(X_s) \cdot b(X_s) ds + \int_0^t \nabla f(X_s) \cdot \sigma(X_s) dW_s + \frac{1}{2} \int_0^t \text{Tr}(\sigma \sigma^T(X_s) \nabla^2 f(X_s)) ds. \quad (4)$$

Formula (4) se može napisati i u diferencijalnom obliku,

$$df(X_t) = \nabla f(X_t) \cdot dX_t + \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma \sigma^T(X_t) \nabla^2 f(X_t)) dt. \quad (5)$$

Dodatni član drugog reda u (4), u odnosu na klasično lančano pravilo, potiče od nenulte kvadratne varijacije Braunovog kretanja, $d\langle W \rangle_t = dt$, i biće osnovni tehnički alat u Poglavlju 3.

2 Informaciona geometrija

Do sada smo statistički model posmatrali pre svega kao skup verovatnosnih raspodela parametrizovanih određenim brojem parametara. Međutim, takav pogled ne pokazuje u potpunosti strukturu koja postoji između samih raspodela. Informaciona geometrija pruža način da se ta struktura opiše geometrijski, odnosno da se statistički modeli posmatraju kao prostori u kojima možemo govoriti o rastojanju, pravcima, projekcijama i promeni parametara. Na taj način pojmovi koji se pojavljuju u statistici dobijaju prirodno geometrijsko tumačenje. Na primer, Fišerova informaciona matrica određuje lokalni način merenja promena u statističkom modelu, dok divergencije omogućavaju da se poredе različite raspodele i da se opiše koliko se one međusobno razlikuju [1].

Značaj ovakvog pristupa posebno se vidi kod familija raspodela koje imaju dodatnu strukturu, kao što su eksponencijalne familije. U njima se različiti načini parametrizacije, tangentni prostori i divergencije međusobno povezuju na prirodan način. Time se neke poznate statističke konstrukcije, poput procene parametara, projekcija i određenih optimizacionih problema, mogu razumeti kao geometrijski problemi. Cilj ovog poglavlja je zato da uvedemo osnovne geometrijske pojmove potrebne za takav pogled na statistiku i da pokažemo kako se struktura koju smo prethodno razvili za statističke modele uklapa u širi okvir informacione geometrije.

2.1 Statističke mnogostrukosti i princip maksimalne entropije

Statistička mnogostrukost je familija verovatnosnih raspodela

$$\mathcal{M} = \{p(x; \theta) : \theta = (\theta^1, \dots, \theta^d) \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\},$$

gde preslikavanje $\theta \mapsto p(\cdot; \theta)$ zadovoljava odgovarajuće uslove regularnosti: injektivnost (različiti parametri odgovaraju različitim raspodelama) i glatku zavisnost $\log p(x; \theta)$ od θ . Parametarski prostor Θ tada igra ulogu lokalnih koordinata na mnogostrukosti $\mathcal{M}$, a svaka tačka mnogostrukosti predstavlja jednu konkretnu raspodelu.

Prirodno pitanje je koje familije raspodela zasluđu posebnu pažnju. Jedan odgovor daje *princip maksimalne entropije*, koji je formulisao Džejns [19]². Umesto proizvoljnog izbora oblika raspodele, princip zahteva da se, među svim raspodelama saglasnim sa raspoloživim informacijama, izabere ona koja maksimizuje Šenonovu entropiju.

Ilustrujemo ovaj princip izvođenjem normalne raspodele, najvažnijeg primera za ovaj rad, kao raspodele maksimalne entropije uz zadatu srednju vrednost i disperziju (odnosno drugi momenat). Neka je $p(x)$ gustina raspodele na $\mathbb{R}$ i posmatrajmo problem

$$\max_p H[p] = - \int p(x) \log p(x) dx$$

uz ograničenja

$$\int p(x) dx = 1, \quad \int x p(x) dx = \mu, \quad \int (x - \mu)^2 p(x) dx = \sigma^2. \quad (6)$$

Uvodeći Lagranžove množitelje $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$ za redom navedena ograničenja, tražimo ekstremum funkcionala

$$\mathcal{L}[p] = - \int p \log p dx - \lambda_0 \left(\int p dx - 1 \right) - \lambda_1 \left(\int x p dx - \mu \right) - \lambda_2 \left(\int (x - \mu)^2 p dx - \sigma^2 \right).$$

Pošto $\mathcal{L}$ zavisi od cele funkcije $p(\cdot)$, a ne od konačno mnogo promenljivih, ekstremum se ne traži običnim izvodom već metodama varijacionog računa, izjednačavanjem funkcionalnog izvoda $\delta\mathcal{L}/\delta p(x)$ sa nulom³ za svako x . Varijacija po $p(x)$ i izjednačavanje sa nulom daje

$$-\log p(x) - 1 - \lambda_0 - \lambda_1 x - \lambda_2 (x - \mu)^2 = 0,$$

odakle je

$$p(x) = \exp(-1 - \lambda_0) \exp(-\lambda_1 x - \lambda_2 (x - \mu)^2). \quad (7)$$

Da bi $p(x)$ zaista imalo srednju vrednost μ (a ne neku pomešanu vrednost), potrebno je $\lambda_1 = 0$ – ovo se lako proverava direktnom smenom u uslov $\int x p dx = \mu$, jer bi linearni član $-\lambda_1 x$ narušio simetričnost p oko μ za $\lambda_1 \neq 0$. Preostaje

$$p(x) = C \exp(-\lambda_2 (x - \mu)^2),$$

gde je $C = \exp(-1 - \lambda_0)$ normalizaciona konstanta. Konstante λ_2 i C određujemo iz preostala dva uslova. Smenom $u = x - \mu$ uslov normalizacije daje

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} C e^{-\lambda_2 u^2} du = C \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_2}} \implies C = \sqrt{\frac{\lambda_2}{\pi}}.$$

²Princip maksimalne entropije kaže da, među svim raspodelama koje su saglasne sa raspoloživim (nepotpunim) informacijama o sistemu, treba izabrati onu koja maksimizuje entropiju – tj. onu koja je najmanje informativna izvan onoga što je eksplicitno zadato. Na ovaj način izbegava se unošenje proizvoljnih, neopravdanih pretpostavki o raspodeli, i princip daje jedinstven, reproducibilan postupak za konstrukciju raspodele iz zadatih ograničenja (npr. iz izmerenih momenata). Džejns je pokazao da se na ovaj način iz istog opšteg principa dobijaju i klasični rezultati statističke fizike (Gibsov i Bolcmanov ansambl), što princip čini fizički, a ne samo formalno, opravdanim.

³Izraz $\delta\mathcal{L}/\delta p(x)$ naziva se *funkcionalni (varijacioni) izvod* i predstavlja uopštenje običnog parcijalnog izvoda na slučaj kada funkcional zavisi od cele funkcije $p(\cdot)$. Intuitivno, ako se prostor ishoda diskretizuje na konačno mnogo tačaka $x_1, \dots, x_N$, funkcional $\mathcal{L}[p]$ postaje obična funkcija $\mathcal{L}(p_1, \dots, p_N)$ konačno mnogo promenljivih $p_i = p(x_i)$, a uslov ekstremuma glasi $\partial\mathcal{L}/\partial p_i = 0$ za svako i . Funkcionalni izvod $\delta\mathcal{L}/\delta p(x)$ predstavlja kontinualni analogon ovog parcijalnog izvoda, dobijen u graničnom slučaju $N \rightarrow \infty$, gde diskretni indeks i prelazi u kontinualnu promenljivu x . U praktičnom računu, funkcionalni izvod izraza oblika $\int p(y) F(p(y), y) dy$ po $p(x)$ računa se tako što se $p(y)$ za $y \neq x$ tretira kao nezavisno od $p(x)$, čime se izvod svodi na obično diferenciranje podintegralnog izraza po $p(x)$.

Uslov za disperziju, uz $\int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-au^2} du = \frac{1}{2a} \sqrt{\pi/a}$, daje

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} u^2 C e^{-\lambda_2 u^2} du = C \cdot \frac{1}{2\lambda_2} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_2}} = \frac{1}{2\lambda_2} \implies \lambda_2 = \frac{1}{2\sigma^2}.$$

Vraćanjem u izraz za C dobijamo $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}$, tj.

$$p(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right),$$

tj. gustinu normalne raspodele $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Normalna raspodela je, dakle, jedinstvena raspodela maksimalne entropije uz zadatu srednju vrednost i disperziju. Ovaj rezultat opravdava njeno posebno mesto u teoriji verovatnoće i biće polazna tačka za sve što sledi u ovom poglavlju.

Ovaj oblik, gde je logaritam gustine linearna funkcija pogodno izabranih statistika $T_i(x)$, nije specifičnost normalne raspodele, već opšta posledica principa maksimalne entropije uz proizvoljna momentna ograničenja: isti varijacioni račun koji smo upravo sprovedi, primenjen na ograničenja oblika $\int T_i(x) p(x) dx = \tau_i$, $i = 1, \dots, d$, daje gustinu oblika $p(x) = h(x) \exp(\lambda^i T_i(x) - \psi(\lambda))$ za pogodno definisanu funkciju h i normalizacionu konstantu $\psi(\lambda)$. Ovaj opšti oblik nazivamo eksponencijalnom familijom.

Definicija 2.1. *Familija raspodela $\{p(x; \theta)\}$ naziva se eksponencijalna familija ako se gustina može zapisati u obliku*

$$p(x; \theta) = h(x) \exp\left(\theta^i T_i(x) - \psi(\theta)\right),$$

gde su $\theta = (\theta^1, \dots, \theta^d)$ prirodni parametri, $T_i(x)$ dovoljne statistike, $h(x)$ noseća mera, a $\psi(\theta)$ log-particiona funkcija, koja obezbeđuje da gustina integriše do jedan.

Familija $\{p(x; \mu, \sigma) : \mu \in \mathbb{R}, \sigma > 0\}$ dobijena na ovaj način predstavlja dvodimenzionu statističku mnogostrukost i upravo ona će nam biti glavni primer tokom celog rada.

Napomenimo da postoje i drugi klasični primeri statističkih mnogostrukosti dobijenih istim principom maksimalne entropije, uz drugačiji izbor ograničenja. Ako se, umesto srednje vrednosti i disperzije na $\mathbb{R}$, entropija maksimizuje na konačnom skupu od m ishoda uz jedino ograničenje normalizacije $\sum_{i=1}^m p_i = 1$, dobija se *multinomijalna raspodela*, čiji je parametarski prostor

$$\mathcal{M} = \left\{ (\theta^1, \dots, \theta^m) : \theta^i > 0, \sum_{i=1}^m \theta^i = 1 \right\},$$

poznat kao *simpleks* S^{m-1} , $(m-1)$ -dimenziona statistička mnogostrukost čija temena predstavljaju degenerisane raspodele.

Drugi primer dobija se maksimizacijom entropije na skupu nenegativnih celih brojeva uz zadatu srednju vrednost λ . Uvodeći Lagranžove množitelje λ_0, λ_1 za uslove normalizacije i srednje vrednosti, tražimo ekstremum

$$L[p] = - \sum_{k=0}^{\infty} p_k \log p_k - \lambda_0 \left(\sum_k p_k - 1 \right) - \lambda_1 \left(\sum_k k p_k - \lambda \right).$$

Za razliku od kontinualnog slučaja iz prethodnog primera, ovde je reč o prebrojivo mnogo nezavisnih promenljivih p_k , pa se ekstremum dobija običnim izjednačavanjem parcijalnog izvoda sa nulom,

$$\frac{\partial L}{\partial p_k} = -\log p_k - 1 - \lambda_0 - \lambda_1 k = 0 \implies p_k = C r^k,$$

gde je $C = \exp(-1 - \lambda_0)$, a $r = \exp(-\lambda_1)$. Iz uslova normalizacije, uz $0 < r < 1$, sledi $C = 1 - r$; iz uslova na srednju vrednost, $r/(1 - r) = \lambda$, sledi $r = \lambda/(1 + \lambda)$. Konačno,

$$p_k = \frac{1}{1 + \lambda} \left(\frac{\lambda}{1 + \lambda} \right)^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

što daje *geometrijsku raspodelu* sa jednodimenzionim parametarskim prostorom $M = \{\lambda \in \mathbb{R}_{>0}\}$.

2.2 Fišerova informaciona metrika

U uvodnom odeljku uveli smo pojam metričkog tenzora g_{ab} preko izraza $d\ell^2 = g_{ab} d\theta^a d\theta^b$. Na statističkoj mnogostrukosti, gde koordinate θ^a same po sebi ne nose metričku strukturu, prirodno se postavlja pitanje kako izabrati $g_{ab}(\theta)$. Da bismo na statističkoj mnogostrukosti $\mathcal{M}$ uveli pojam rastojanja, potrebno je pronaći prirodan izbor takvog tenzora, odnosno Rimanovu metriku. Polazna veličina za njenu konstrukciju je *skor funkcija*

$$s_i(x; \theta) = \frac{\partial}{\partial \theta^i} \log p(x; \theta), \quad i = 1, \dots, d,$$

vektor parcijalnih izvoda log-verodostojnosti po parametrima. Skor funkcija ima očekivanu vrednost nula: pod uslovima regularnosti koji dozvoljavaju zamenu redosleda izvoda i integrala,

$$\mathbb{E}_\theta[s_i(X; \theta)] = \int p \cdot \frac{\partial \log(p)}{\partial \theta^i} dx = \int p \cdot \frac{\partial p}{\partial \theta^i} \cdot \frac{1}{p} dx = \frac{\partial}{\partial \theta^i} \int p(x; \theta) dx = \frac{\partial}{\partial \theta^i}(1) = 0.$$

Definicija 2.2. *Fišerova⁴ informaciona matrica statističke mnogostrukosti $\mathcal{M}$ u tački θ definiše se kao*

$$g_{ij}(\theta) = \mathbb{E}_\theta \left[\frac{\partial \log p}{\partial \theta^i} \cdot \frac{\partial \log p}{\partial \theta^j} \right] = \mathbb{E}_\theta[s_i(X; \theta) s_j(X; \theta)]. \quad (8)$$

Pošto je $\mathbb{E}_\theta[s_i] = 0$, izraz (8) predstavlja kovarijacionu matricu skor funkcije, $g_{ij}(\theta) = \text{Cov}(s_i, s_j)$, pa je automatski simetrična i pozitivno semidefinitna. Pod standardnim uslovima regularnosti familije (koji isključuju degenerisane slučajeve, poput parametra koji ne utiče na raspodelu), g_{ij} je strogo pozitivno definitna i definiše skalarni proizvod na tangentnom prostoru $T_\theta \mathcal{M}$:

$$\langle u, v \rangle_\theta = \sum_{i,j} g_{ij}(\theta) u^i v^j, \quad u, v \in T_\theta \mathcal{M}.$$

Ovim je na $\mathcal{M}$ definisana Rimanova metrika, poznata kao *Fišerova metrika*.

Pošto je $g_{ij}(\theta)$ tenzorsko polje, pod promenom parametrizacije $\theta \mapsto \theta'$ ono se transformiše po pravilu

$$g_{i'j'}(\theta') = \sum_{i,j} \frac{\partial \theta^i}{\partial \theta'^{i'}} \frac{\partial \theta^j}{\partial \theta'^{j'}} g_{ij}(\theta),$$

⁴Ronald Aylmer Fisher (1890–1962) bio je engleski matematičar, statističar i genetičar, rođen u Londonu. Smatra se jednim od najznačajnijih utemeljivača moderne statistike. Dao je fundamentalne doprinose teoriji statističkog zaključivanja, teoriji procene i teoriji eksperimentalnog dizajna, a uveo je i pojam Fišerove informacije, koji danas ima centralnu ulogu u statistici i informacionoj geometriji.

usled čega su veličine izvedene iz g_{ij} – rastojanje $d\ell^2$, dužina krive, zapremina – nezavisne od izbora parametrizacije statističke mnogostrukosti. Ovo opravdava da o $\mathcal{M}$ govorimo kao o geometrijskom objektu po sebi, nezavisno od toga da li je opisujemo koordinatama (μ, σ) ili nekim drugim, ekvivalentnim izborom.

Pod uslovima regularnosti koji dozvoljavaju dvostruko diferenciranje pod znakom integrala, Fišerova matrica se može ekvivalentno zapisati preko drugih izvoda log-verodostojnosti,

$$g_{ij}(\theta) = -\mathbb{E}_\theta \left[\frac{\partial^2 \log p}{\partial \theta^i \partial \theta^j} \right], \quad (9)$$

što je često pogodnije za račun jer izbegava množenje izvoda⁵.

Fišerova metrika ima jasnu statističku interpretaciju: ona meri koliko je lako, na osnovu uzorka, statistički razlikovati dve bliske raspodele $p(\cdot; \theta)$ i $p(\cdot; \theta + d\theta)$. Velika vrednost $g_{ij}(\theta)$ znači da mala promena parametra θ izaziva veliku promenu raspodele, pa se raspodele lako razlikuju; mala vrednost znači suprotno. Ova interpretacija je u skladu sa ulogom Fišerove informacije u Rao-Kramer-ovu⁶ donjoj granici za disperziju nepristrasnih ocena. Prirodno je pitati zašto je baš Fišerova metrika, među svim mogućim izborima Rimanove metrike na $\mathcal{M}$, geometrijski istaknuta. Pre nego što dođemo do odgovora na to pitanje pogledajmo na primeru kako se ona zapravo računa. Izračunajmo Fišerovu metriku za familiju $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ izvedenu u prethodnom odeljku. Iz

$$\log p(x; \mu, \sigma) = -\frac{1}{2} \log(2\pi) - \log \sigma - \frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}$$

dobijaju se prvi izvodi a odmah i drugi

$$\frac{\partial^2 \log p}{\partial \mu^2} = -\frac{1}{\sigma^2}, \quad \frac{\partial^2 \log p}{\partial \sigma^2} = \frac{1}{\sigma^2} - 3 \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^4}, \quad \frac{\partial^2 \log p}{\partial \sigma \partial \mu} = \frac{\partial^2 \log p}{\partial \mu \partial \sigma} = -2 \frac{(x - \mu)}{\sigma^3}.$$

Računamo elemente Fišerove matrice direktno iz definicije (9):

$$\begin{aligned} g_{\mu\mu} &= -\mathbb{E} \left[-\frac{1}{\sigma^2} \right] = \frac{1}{\sigma^2}, \\ g_{\sigma\sigma} &= -\mathbb{E} \left[\frac{1}{\sigma^2} - 3 \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^4} \right] = -\frac{1}{\sigma^2} + \frac{3}{\sigma^4} \mathbb{E}[(x - \mu)^2] = -\frac{1}{\sigma^2} + \frac{3}{\sigma^2} = \frac{2}{\sigma^2}, \\ g_{\mu\sigma} &= g_{\sigma\mu} = -\mathbb{E} \left[-2 \frac{(x - \mu)}{\sigma^3} \right] = \frac{2}{\sigma^3} \mathbb{E}[x - \mu] = 0. \end{aligned}$$

Fišerova matrica je stoga dijagonalna,

$$G(\mu, \sigma) = \begin{pmatrix} 1/\sigma^2 & 0 \\ 0 & 2/\sigma^2 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

⁵Da bismo pokazali ekvivalentnost (8) i (9), dovoljno je dva puta diferencirati identitet $\int p(x; \theta) dx = 1$ po θ^i i θ^j . Prvo diferenciranje daje $\int \partial_i p dx = 0$. Drugo diferenciranje po θ^j daje $\int \partial_j \partial_i p dx = 0$. Pišući $\partial_i p = p \partial_i \log p$ i primenjujući proizvodno pravilo na $\partial_j (p \partial_i \log p)$, dobija se $\int p (\partial_i \partial_j \log p + \partial_i \log p \partial_j \log p) dx = 0$, odakle sledi $\mathbb{E}[\partial_i \partial_j \log p] = -\mathbb{E}[\partial_i \log p \partial_j \log p]$, što je tražena jednakost.

⁶Rao - Cramér granica, nazvana po Haraldju Cramér-u i Calyampudi Radhakrishna Rao-u, daje donju granicu disperzije nepristrasnog ocenjivača u terminima Fišerove informacije. C.R. Rao je 1945. godine uveo geometrijski pristup statističkim modelima i pokazao da Fišerova informaciona matrica prirodno definiše metriku na prostoru verovatnosnih raspodela, čime je postavio jedan od temelja informacione geometrije.

a odgovarajući element dužine glasi

$$d\ell^2 = \frac{d\mu^2}{\sigma^2} + \frac{2 d\sigma^2}{\sigma^2}.$$

Primetimo da $G(\mu, \sigma) \rightarrow \infty$ kada $\sigma \rightarrow 0$: kada je disperzija mala, raspodela je oštro koncentrisana i već mala promena parametara statistički je lako uočljiva, pa je Fišerova metrika velika. Obrnuto, kada je σ veliko, raspodela je razuđena i promene parametara teže se razlikuju, pa metrika opada. Ovo ponašanje, iako izvedeno formalno, u potpunosti je u skladu sa statističkom interpretacijom metrike datom ranije.

Determinanta Fišerove matrice, $\det G(\mu, \sigma) = 2/\sigma^4$, takođe ima samostalno statističko značenje: ona određuje tzv. Džefrisov⁷ prior,

$$\pi_J(\mu, \sigma) \propto \sqrt{\det G(\mu, \sigma)} = \frac{\sqrt{2}}{\sigma^2},$$

koji se u Bajesovoj statistici koristi kao "neinformativna" apriorna raspodela, invarijantna pod reparametrizacijom upravo zbog tenzorske prirode G pokazane ranije u ovom odeljku.

Napomena 2.3. *Izbor Fišerove metrike među svim mogućim Rimanovim metrikama na statističkoj mnogostrukosti nije proizvoljan. Postoje različiti putevi kojima se do nje dolazi – kroz statističku razdvojivost raspodela kao ovde, kroz teoriju procene i Rao-Kramerovu granicu, ili kroz aksiomatski pristup zasnovan na zahtevu invarijantnosti pod dovoljnim statistikama, videti npr. Caticha [9], koji daje pristupačan uvod u informacionu geometriju polazeći od entropijskih argumenata. Najvažniji teorijski rezultat u ovom pravcu je teorema Čencova [10], koja pokazuje da je Fišerova metrika, do na pozitivnu konstantu, jedina Rimanova metrika na prostoru verovatnosnih raspodela koja je invarijantna pod dejstvom Markovljevih preslikavanja (tj. statistika) – svaka druga metrika bi, primenjena na dovoljnu statistiku, promenila geometrijsku strukturu prostora, što je statistički neprihvatljivo. Ovim rezultatom Fišerova metrika prestaje da bude samo jedan od mogućih izbora i postaje, u preciznom matematičkom smislu, kanonska metrika informacione geometrije.*

2.3 Gausova familija i hiperbolička geometrija

Cilj ovog dela je da identifikujemo statističku mnogostrukost Gausove familije sa nekom od poznatih Rimanovih mnogostrukosti, čime možemo da iskoristimo već razvijene rezultate i alate iz diferencijalne geometrije. U prethodnom delu izračunali smo Fišerovu metriku na statističkoj mnogostrukosti Gausovih raspodela i pokazali da ima oblik

$$d\ell^2 = \frac{d\mu^2}{\sigma^2} + \frac{2 d\sigma^2}{\sigma^2}$$

(videti (10)). Ovaj izraz nije proizvoljan, pokazaćemo da predstavlja, do na skaliranje, metriku dobro poznatog geometrijskog objekta: hiperboličke ravni. Ovo je više od formalne analogije: mnogostrukost $\mathcal{M} = \{(\mu, \sigma) : \mu \in \mathbb{R}, \sigma > 0\}$ je, u preciznom smislu koji ćemo uskoro definisati, *izometrična* hiperboličkoj ravni, što nam omogućava da sve relevantne geometrijske veličine (geodezije, rastojanja, zapreminu) izrazimo eksplicitnim, zatvorenim formulama.

⁷Harold Jeffreys (1891–1989) bio je engleski matematičar, statističar i geofizičar, profesor na Univerzitetu u Kembridžu. Poznat je po fundamentalnim doprinosima Bajesovoj statistici.

Hiperbolička geometrija nastaje odbacivanjem petog Euklidovog postulata, aksiome o paralelama: umesto da kroz tačku van date prave prolazi tačno jedna prava paralelna toj pravoj, u hiperboličkoj geometriji kroz tu tačku prolazi beskonačno mnogo takvih pravih⁸. Jedan od standardnih modela ove geometrije je *Poenkareova gornja poluravan*⁹:

$$\mathbb{H} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : y > 0\}, \quad ds_{\mathbb{H}}^2 = \frac{dx^2 + dy^2}{y^2}.$$

Definicija 2.4. *Neka su (M, g_M) i (N, g_N) dve Rimanove mnogostrukosti. Glatko preslikavanje*

$$f : M \rightarrow N$$

naziva se izometrija ako je difeomorfizam i za svako $p \in M$ i sve tangentne vektore $X, Y \in T_p M$ važi

$$g_{Mp}(X, Y) = g_{Nf(p)}(df_p(X), df_p(Y)).$$

Ekvivalentno, uslov izometrije može se zapisati u obliku

$$g_M = f^* g_N,$$

gde je $df_p : T_p M \rightarrow T_{f(p)} N$ diferencijal preslikavanja f , a $f^ g_N$ pulbek metrika na M .*

Napomena 2.5. *Izometrija čuva Rimanovu metriku, pa samim tim čuva dužine tangentnih vektora, uglove između njih, dužine krivih, rastojanja između tačaka i geodezijske strukture mnogostrukosti. Takođe, izometrija čuva Rimanovu zakrivljenost i sve geometrijske osobine koje su određene metrikom. Zbog toga se dve Rimanove mnogostrukosti između kojih postoji izometrija smatraju geometrijski ekvivalentnim.*

Pokažimo sada identifikaciju Gausove statističke mnogostrukosti sa $\mathbb{H}$. Posmatrajmo smenu koordinata $\varphi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{H}$, $\varphi(\mu, \sigma) = (x, y) = (\mu, \sqrt{2} \sigma)$. Iz $y = \sqrt{2} \sigma$ sledi $dy = \sqrt{2} d\sigma$, odnosno $d\sigma^2 = dy^2/2$ i $\sigma^2 = y^2/2$. Zamenom u $d\ell^2$:

$$d\ell^2 = \frac{dx^2}{y^2/2} + \frac{2 \cdot (dy^2/2)}{y^2/2} = \frac{2 dx^2}{y^2} + \frac{2 dy^2}{y^2} = 2 \cdot \frac{dx^2 + dy^2}{y^2} = 2 \cdot ds_{\mathbb{H}}^2.$$

Dakle, pod difeomorfizmom φ , Fišerova metrika se preslikava tačno u dvostruko skaliranu standardnu Poenkareovu metriku:

$$\varphi^*(2 ds_{\mathbb{H}}^2) = d\ell^2. \quad (11)$$

Statistička mnogostrukost Gausovih raspodela je, dakle, izometrična paru $(\mathbb{H}, 2 ds_{\mathbb{H}}^2)$ - Poenkareovoj poluravni sa metrikom skaliranom faktorom 2.

Za konformnu metriku oblika $ds^2 = \lambda(x, y)(dx^2 + dy^2)$, Gausova (skalarna) zakrivljenost data je formulom $K = -\frac{1}{2\lambda} \Delta(\ln \lambda)$. Za standardnu Poenkareovu metriku, $\lambda = 1/y^2$, pa je $\ln \lambda = -2 \ln y$ i $\Delta(\ln \lambda) = -2 \partial_y^2(\ln y) = 2/y^2$, odakle

$$K_{\mathbb{H}} = -\frac{1}{2 \cdot (1/y^2)} \cdot \frac{2}{y^2} = -1.$$

⁸Nezavisnost petog Euklidovog postulata od ostalih aksioma otkrili su, međusobno nezavisno, Nikolaj Lobačevski i Janoš Boljaj sredinom 19. veka. Zanimljivo, i sam Karl Fridrih Gaus se, nezavisno od njih, bavio pitanjima neeuklidske geometrije još ranije, iako svoje rezultate o tome nije objavio za života.

⁹Pored gornje poluravni, drugi standardni model iste geometrije je Poenkareov disk, jedinični disk $\mathbb{D} = \{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$ sa metrikom $ds_{\mathbb{D}}^2 = \frac{4(dx^2 + dy^2)}{(1 - x^2 - y^2)^2}$. Ova dva modela su međusobno izometrična, a preslikavanje između njih dato je odgovarajućom Mobijusovom transformacijom.

Poznata je činjenica da skaliranje metrike konstantom, $g \mapsto cg$, skalira zakrivljenost recipročno, $K \mapsto K/c$. Pošto je, prema (11), naša metrika jednaka $2ds_{\mathbb{H}}^2$, zakrivljenost statističke mnogostrukosti $\mathcal{M}$ je

$$K_{\mathcal{M}} = \frac{K_{\mathbb{H}}}{2} = -\frac{1}{2}. \quad (12)$$

Zakrivljenost $\mathcal{M}$ je, dakle, *konstantna* i negativna. Ovo je jača tvrdnja nego što na prvi pogled izgleda:

Teorema 2.6 (Kiling-Hof, videti do Carmo [14]). *Svaka kompletna, jednostavno povezana Rimanova mnogostrukost konstantne zakrivljenosti K izometrična je, do na skaliranje metrike, tačno jednom od tri kanonska modela: sferi ako $K > 0$, euklidskom prostoru ako $K = 0$, ili hiperboličkoj ravni ako $K < 0$.*

Posledica 2.7. *Statistička mnogostrukost Gausovih raspodela $\mathcal{M}$ je izometrična hiperboličkoj ravni konstantne zakrivljenosti $-1/2$.*

Dakle, $\mathcal{M}$ nije samo *nalik* hiperboličkoj geometriji, ona to jeste, u strogom, izometrijskom smislu. Ova činjenica je od suštinskog značaja za ostatak rada: umesto da geometrijske veličine na $\mathcal{M}$ računamo numerički, možemo ih direktno preuzeti iz klasične, dobro proučene teorije hiperboličke ravni.

U standardnom modelu $\mathbb{H}$, geodezije (krive koje lokalno predstavljaju najkraći put) su poznate: to su polukružnice sa centrom na pravoj $y = 0$, normalne na tu pravu, i vertikalne poluprave (kao granični slučaj polukružnice beskonačnog poluprečnika)¹⁰. Pošto je skaliranje metrike konstantom, $ds_{\mathbb{H}}^2 \mapsto 2ds_{\mathbb{H}}^2$, ne menja Kristofelove simbole (oni zavise od $g^{-1}\partial g$, gde se konstantni faktor skrati), geodezije metrike $2ds_{\mathbb{H}}^2$ su, kao neparametrizovane krive, identične geodezijama od $ds_{\mathbb{H}}^2$.

Vraćajući se, preko φ^{-1} , u originalne koordinate (μ, σ) (gde je $x = \mu$, $y = \sqrt{2}\sigma$), slika polukružnice $(x - x_0)^2 + y^2 = r^2$ postaje $(\mu - x_0)^2 + 2\sigma^2 = r^2$, polu-elipsa sa poluosama u odnosu $\sqrt{2} : 1$ duž μ -pravca i σ -pravca, a ne polukružnica. Zbog jednostavnosti izlaganja, geodezije i rastojanja u nastavku opisujemo direktno u (x, y) -koordinatama, imajući u vidu eksplisitnu vezu sa (μ, σ) datu preslikavanjem φ .

Sada kada znamo koji je najkraći put između dve tačke, vreme je da odredimo i koliko je on zapravo "kratak". Tako da uvodimo i pojam rastojanja na sledeći način. Za dve tačke na istoj vertikalnoj pravoj, (x_0, y_1) i (x_0, y_2) , geodezija koja ih spaja je sam taj vertikalni segment, pa se rastojanje računa direktno:

$$d_{\mathbb{H}}((x_0, y_1), (x_0, y_2)) = \int_{y_1}^{y_2} \frac{dy}{y} = \left| \ln \frac{y_2}{y_1} \right|.$$

Za proizvoljne dve tačke $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \in \mathbb{H}$ poznat je, videti Anderson [4], zatvoreni izraz

$$d_{\mathbb{H}}((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = \operatorname{arccosh} \left(1 + \frac{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}{2y_1y_2} \right). \quad (13)$$

¹⁰Ovaj rezultat sledi iz toga što grupa razlomljeno-linearnih (Mobijusovih) preslikavanja $z \mapsto \frac{az+b}{cz+d}$, $ad - bc > 0$, deluje tranzitivno i izometrijski na $\mathbb{H}$, čuvajući skup takvih polukružnica i vertikalnih pravih; detaljnija analiza ove grupe simetrija prevazilazi okvire ovog rada, videti Anderson [4].

Proverimo konzistentnost ove formule sa vertikalnim slučajem: za $x_1 = x_2$, argument postaje $1 + \frac{(y_1 - y_2)^2}{2y_1 y_2} = \frac{y_1^2 + y_2^2}{2y_1 y_2}$, što je tačno jednako $\cosh(\ln(y_2/y_1)) = \frac{1}{2}(\frac{y_2}{y_1} + \frac{y_1}{y_2})$ – formula (13) se, dakle, ispravno svodi na prethodni rezultat.

Pošto je naša metrika $2 ds_{\mathbb{H}}^2$, dužine (pa i rastojanja) skaliraju se faktorom $\sqrt{2}$ u odnosu na standardni model. Vraćajući se u (μ, σ) preko $x = \mu$, $y = \sqrt{2}\sigma$, dobijamo eksplicitnu formulu za informaciono-geometrijsko rastojanje između dve Gausove raspodele:

$$d_{\mathcal{M}}((\mu_1, \sigma_1), (\mu_2, \sigma_2)) = \sqrt{2} \operatorname{arccosh} \left(1 + \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2 + 2(\sigma_1 - \sigma_2)^2}{4\sigma_1 \sigma_2} \right). \quad (14)$$

Ova formula je u statističkoj literaturi poznata kao *Raovo rastojanje* za normalnu familiju, videti Atkinson and Mitchell [5], i korist ćemo je u Poglavlju 5 pri eksplicitnom računu na Gausovom primeru.

Formula (14) kvantifikuje intuiciju iz prethodnog odeljka: kada su σ_1, σ_2 mali, imenilac $4\sigma_1 \sigma_2$ je mali, pa je rastojanje veliko čak i za blisko μ_1, μ_2 (gusto koncentrisane raspodele se lako statistički razlikuju). Kada su σ_1, σ_2 veliki, isto pomeranje μ ili σ daje malo rastojanje, razuđene (slabo informativne) raspodele je teško razlikovati na osnovu uzorka.

Primer 2.8. *Ilustrujmo razliku između hiperboličke i naivne, euklidske intuicije. Hiperbolički krug poluprečnika ρ oko tačke $(x_0, y_0) \in \mathbb{H}$, tj. skup tačaka na hiperboličkom rastojanju ρ od (x_0, y_0) , dobija se izjednačavanjem (13) sa ρ i sređivanjem (kompletiranjem kvadrata po y), što daje*

$$(x - x_0)^2 + (y - y_0 \cosh \rho)^2 = y_0^2 \sinh^2 \rho.$$

Hiperbolički krug je, dakle, obična euklidska kružnica, ali sa pomerenim centrom $(x_0, y_0 \cosh \rho)$ i poluprečnikom $y_0 \sinh \rho$, umesto naivno očekivanog centra (x_0, y_0) i poluprečnika ρ . Za $x_0 = 0, y_0 = 1, \rho = 1$, na primer, euklidski centar je $(0, \cosh 1) \approx (0, 1.543)$, a poluprečnik $\sinh 1 \approx 1.175$; pošto je $\cosh 1 + \sinh 1 = e$ i $\cosh 1 - \sinh 1 = e^{-1}$, ovaj krug seče y -osu tačno u tačkama $1/e$ i e . Asimetrija između hiperboličkog i euklidskog centra posledica je toga što metrika $ds_{\mathbb{H}}^2$ "raste" bliže granici $y = 0$, pa je za isto hiperboličko rastojanje potrebno više euklidskog prostora što se bliže prilazi toj granici.

2.4 Dualne konekcije

Fišerova metrika daje nam skalarni proizvod u svakoj tački statističke mnogostrukosti $\mathcal{M}$ pojedinačno, čime možemo meriti dužine i uglove tangentnih vektora u jednoj te istoj tački. Ono što nam metrika sama po sebi ne daje jeste način da uporedimo tangentne vektore u različitim tačkama, odnosno da definišemo šta znači da vektorsko polje ne menja pravac duž krive. Za to je potrebna konekcija. Na svakoj Rimanovoj mnogostrukosti postoji jedinstvena, kanonska konekcija koja zadovoljava ovaj zahtev, Levi-Čivita konekcija, i mogli bismo se zapitati zašto nam treba bilo šta više od nje.

Pokazuje se da statistička mnogostrukost nosi dodatnu strukturu koju Levi-Čivita konekcija ne vidi: postoje dve, međusobno dualne, statistički prirodne konekcije, čije geodezije odgovaraju dvema različitim statistički smislenim porodicama krivih kroz prostor raspodela.

Neka je $l(x; \theta) = \log p(x; \theta)$ i neka su $\partial_i l = \partial l / \partial \theta^i$. Pored Fišerove metrike $g_{ij} = E_{\theta}[\partial_i l \partial_j l]$, na statističkoj mnogostrukosti prirodno se pojavljuje i jedan potpuno simetričan tenzor trećeg reda, poznat kao Amari-Čencov tenzor,

$$T_{ijk}(\theta) = E_{\theta}[\partial_i l \partial_j l \partial_k l],$$

koji se u literaturi ponekad naziva i tenzor asimetrije¹¹. Za $\alpha \in \mathbb{R}$, α -konekcija na $\mathcal{M}$ zadaje se Kristofelovim simbolima prve vrste

$$\Gamma_{ij,k}^{(\alpha)}(\theta) = E_\theta[\partial_i \partial_j l \cdot \partial_k l] + \frac{1-\alpha}{2} T_{ijk}(\theta). \quad (15)$$

Za $\alpha = 0$ dobija se tačno Levi-Čivita konekcija pridružena Fišerovoj metrici, $\Gamma_{ij,k}^{(0)} = E_\theta[\partial_i \partial_j l \cdot \partial_k l] + \frac{1}{2} T_{ijk}$. Za $\alpha = 1$ drugi član iščezava, i dobijamo tzv. e-konekciju, $\Gamma_{ij,k}^{(e)} := \Gamma_{ij,k}^{(1)} = E_\theta[\partial_i \partial_j l \cdot \partial_k l]$, dok za $\alpha = -1$ dobijamo m-konekciju, $\Gamma_{ij,k}^{(m)} := \Gamma_{ij,k}^{(-1)} = E_\theta[\partial_i \partial_j l \cdot \partial_k l] + T_{ijk}$.

Pre nego što opravdamo ove nazive, pokažimo zašto je ova familija konekcija geometrijski značajna.

Teorema 2.9. *Za svako $\alpha \in \mathbb{R}$, konekcije $\nabla^{(\alpha)}$ i $\nabla^{(-\alpha)}$ dualne su u odnosu na Fišerovu metriku g . Posebno, e-konekcija i m-konekcija dualne su jedna drugoj, dok je Levi-Čivita konekcija ($\alpha = 0$) jedina konekcija u ovoj familiji koja je sama sebi dualna.*

Dokaz. *Neka su $X = X^i \partial_i$, $Y = Y^j \partial_j$, $Z = Z^k \partial_k$ proizvoljna vektorska polja. Iz definicije Kristofelovih simbola prve vrste, $g(\nabla_{\partial_i} \partial_j, \partial_k) = \Gamma_{ij,k}$, i Lajbnicovog pravila, dobijamo*

$$g(\nabla_X^{(\alpha)} Y, Z) = X^i (\partial_i Y^j) g_{jk} Z^k + X^i Y^j Z^k \Gamma_{ij,k}^{(\alpha)},$$

i analogno, zamenom uloga Y i Z u istoj definiciji Kristofelovih simbola, čime indeksi j i k menjaju mesta,

$$g(Y, \nabla_X^{(-\alpha)} Z) = X^i Y^j g_{jk} (\partial_i Z^k) + X^i Y^j Z^k \Gamma_{ik,j}^{(-\alpha)}.$$

Sabiranjem ova dva izraza, prva dva člana se po pravilu proizvoda spajaju u $X^i \partial_i (g_{jk} Y^j Z^k) - X^i Y^j Z^k \partial_i g_{jk}$, pa je

$$g(\nabla_X^{(\alpha)} Y, Z) + g(Y, \nabla_X^{(-\alpha)} Z) = X[g(Y, Z)] - X^i Y^j Z^k \partial_i g_{jk} + X^i Y^j Z^k (\Gamma_{ij,k}^{(\alpha)} + \Gamma_{ik,j}^{(-\alpha)}).$$

Preostaje da pokažemo da poslednja dva člana potiru jedan drugi, odnosno da je $\partial_i g_{jk} = \Gamma_{ij,k}^{(\alpha)} + \Gamma_{ik,j}^{(-\alpha)}$. Iz (15) i potpune simetričnosti tenzora T_{ijk} ,

$$\Gamma_{ij,k}^{(\alpha)} + \Gamma_{ik,j}^{(-\alpha)} = \Gamma_{ij,k}^{(0)} - \frac{\alpha}{2} T_{ijk} + \Gamma_{ik,j}^{(0)} + \frac{\alpha}{2} T_{ikj} = \Gamma_{ij,k}^{(0)} + \Gamma_{ik,j}^{(0)},$$

jer je $T_{ijk} = T_{ikj}$, pa se članovi sa α potiru. Kako je Levi-Čivita konekcija kompatibilna sa metrikom, važi upravo $\partial_i g_{jk} = \Gamma_{ij,k}^{(0)} + \Gamma_{ik,j}^{(0)}$, čime je tražena jednakost pokazana. Sledi da je $g(\nabla_X^{(\alpha)} Y, Z) + g(Y, \nabla_X^{(-\alpha)} Z) = X[g(Y, Z)]$, što je tačno uslov dualnosti za par $(\nabla^{(\alpha)}, \nabla^{(-\alpha)})$.

Nazivi e-konekcije i m-konekcije nisu proizvoljni. Podsetimo se da smo eksponencijalnu familiju pisali preko dve dualne parametrizacije, prirodnih parametara θ i parametara očekivanja $\eta_i = E_\theta[T_i]$. Pokazuje se da su ove dve parametrizacije upravo afine koordinate za e-konekciju, odnosno za m-konekciju (prava linija u θ -koordinatama je geodezik e-konekcije, dok je prava linija u η -koordinatama geodezik m-konekcije. Otuda i nazivi, e

¹¹Amari-Čencov tenzor je jedinstven, do na množenje konstantom, potpuno simetričan tenzor trećeg reda invarijantan pod dejstvom Markovljevih preslikavanja, analogno uloji koju Čencovljeva teorema daje Fišerovoj metrici među Rimanovim metrikama. Videti Ay et al. [6].

dolazi od "eksponencijalno", jer je θ prirodni parametar familije, a m od "mešavina", jer prava linija u η -koordinatama, zbog linearnosti $\eta_i = E_\theta[T_i]$ po raspodeli, odgovara linearnoj mešavini $p_t = (1-t)p_0 + tp_1$ dve raspodele u samom prostoru raspodela).

Ova dodatna struktura je upravo ono što će nam dalje omogućiti da precizno formulišemo i dokažemo uopštenu Pitagorinu teoremu za Bregmanove divergencije, čime se geometrijska struktura uvedena u ovom odeljku direktno povezuje sa problemom projekcije između statističkih modela. Ovakva formulacija će nam kasnije omogućiti da sagledamo i veze sa algoritmima zasnovanim na projekcijama, kao što su Sinkhorn i EM algoritam.

Napomena 2.10. Neka je $\mathcal{M}$ eksponencijalna familija, $p(x; \theta) = h(x) \cdot \exp(\theta^i T_i(x) - \psi(\theta))$. Tada je $\partial_i \partial_j l = -\partial_i \partial_j \psi(\theta)$, veličina koja ne zavisi od x , pa je

$$\Gamma_{ij,k}^{(e)} = E_\theta[\partial_i \partial_j l \cdot \partial_k l] = -\partial_i \partial_j \psi(\theta) \cdot E_\theta[\partial_k l] = 0,$$

jer je $E_\theta[\partial_k l] = 0$ za svako k . Dakle, u prirodnim parametrima θ , e -konekcija je identički jednaka nuli, tj. θ -koordinate su afine koordinate za e -konekciju. Ovo je precizan smisao u kome je eksponencijalna familija e -ravna statistička mnogostrukost. Iz teoreme 2.9 sledi da je automatski i m -ravna¹², sa afinim koordinatama η , čime dobijamo dvostruko ravnu strukturu koja stoji u osnovi Bregmanove geometrije iz narednog odeljka.

U prethodnom razmatranju videli smo da eksponencijalna familija poseduje posebno jednostavnu geometrijsku strukturu: prirodni parametri θ predstavljaju afine koordinate za e -konekciju, dok parametri očekivanja η predstavljaju afine koordinate za m -konekciju. Ova dualnost nije samo posledica izbora koordinata, već je određena jednom centralnom funkcijom koja povezuje oba koordinatna sistema i istovremeno generiše Fišerovu metriku. Tu funkciju nazivamo potencijalom eksponencijalne familije i označavamo sa ψ .

Neka je eksponencijalna familija data u obliku

$$p(x; \theta) = h(x) \exp(\theta^i T_i(x) - \psi(\theta)),$$

gde su $\theta = (\theta^1, \dots, \theta^d)$ prirodni parametri. Funkcija ψ predstavlja log-particionu funkciju, odnosno normalizacioni član koji obezbeđuje da gustina integriše do jedan. Iz uslova

$$\int p(x; \theta) dx = 1$$

sledi

$$\psi(\theta) = \ln \int h(x) \exp(\theta^i T_i(x)) dx.$$

Poseban značaj funkcije ψ proizlazi iz činjenice da njeni prvi izvodi daju parametre očekivanja. Zaista, diferenciranjem prethodnog izraza dobijamo

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta^i} = E_\theta[T_i(X)] = \eta_i.$$

Prema tome, prirodni parametri θ i parametri očekivanja η nisu nezavisni koordinatni sistemi, već su povezani relacijom

$$\eta_i = \frac{\partial \psi}{\partial \theta^i}. \quad (16)$$

Još važnija posledica dobija se diferenciranjem ove relacije. Naime,

$$g_{ij} = \frac{\partial \eta_i}{\partial \theta^j} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^i \partial \theta^j}. \quad (17)$$

¹²Poznato je da je dual ravne beztorzione konekcije i sam ravan, videti [1, Poglavlje 6]

Dakle, Fišerova metrika je upravo Hesijan potencijala ψ u prirodnim koordinatama:

$$g_{ij} = \partial_i \partial_j \psi.$$

Ovaj rezultat ima jednostavnu statističku interpretaciju. Pošto je

$$\eta_i = E_\theta[T_i(X)],$$

drugi izvodi potencijala predstavljaju kovarijacije dovoljnih statistika:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^i \partial \theta^j} = \text{Cov}_\theta(T_i, T_j).$$

Na taj način ista funkcija ψ objedinjuje tri fundamentalna objekta informaciono-geometrijske strukture: prirodne parametre θ , parametre očekivanja η i Fišerovu metriku g .

Zbog toga se potencijal ψ može posmatrati kao funkcija koja generiše geometriju eksponencijalne familije. Njegov gradijent određuje prelazak sa e-afinih na m-afine koordinate, dok njegov Hesijan određuje lokalnu metriku. Upravo ova činjenica predstavlja osnovu dvostruko-ravne strukture eksponencijalnih familija.

Za Gausovu familiju

$$X \sim N(\mu, \sigma^2),$$

gustinu možemo zapisati u eksponencijalnom obliku kao

$$p(x; \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(\theta^1 x + \theta^2 x^2 - \psi(\theta)),$$

gde su prirodni parametri

$$\theta^1 = \frac{\mu}{\sigma^2}, \quad \theta^2 = -\frac{1}{2\sigma^2}.$$

Direktnim sređivanjem normalizacione konstante dobija se potencijal

$$\psi(\theta) = -\frac{(\theta^1)^2}{4\theta^2} - \frac{1}{2} \log(-2\theta^2), \quad \theta^2 < 0.$$

Iz (16) sada dobijamo dualne parametre

$$\eta_1 = \frac{\partial \psi}{\partial \theta^1} = -\frac{\theta^1}{2\theta^2} = \mu$$

i

$$\eta_2 = \frac{\partial \psi}{\partial \theta^2} = \frac{(\theta^1)^2}{4(\theta^2)^2} - \frac{1}{2\theta^2} = \mu^2 + \sigma^2.$$

Dakle, u ovom slučaju parametri očekivanja imaju jednostavnu statističku interpretaciju:

$$\eta_1 = E[X], \quad \eta_2 = E[X^2].$$

Drugim rečima, e-afine koordinate θ određene su prirodnim parametrima eksponencijalne familije, dok su m-afine koordinate η upravo očekivane vrednosti dovoljnih statistika.

Konačno, iz (17) sledi da se Fišerova metrika Gausove familije u prirodnim koordinatama dobija kao Hesijan funkcije ψ :

$$[g_{ij}] = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2\theta^2} & \frac{\theta^1}{2(\theta^2)^2} \\ \frac{\theta^1}{2(\theta^2)^2} & -\frac{(\theta^1)^2}{2(\theta^2)^3} + \frac{1}{2(\theta^2)^2} \end{pmatrix}.$$

Ovaj izraz predstavlja istu Fišerovu metriku koju smo prethodno dobili direktnim računanjem, samo izraženu u prirodnim koordinatama θ . Time se na konkretnom primeru Gausove familije vidi da potencijal ψ zaista objedinjuje e-koordinate i m-koordinate sa Rimanovom strukturom određenom Fišerovom metrikom.

Izračunajmo e-konekciju i m-konekciju za familiju $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, koristeći indekse $1 = \mu$, $2 = \sigma$. Iz drugih izvoda log-verodostojnosti izvedenih u prethodnom odeljku,

$$\partial_1 \partial_1 l = -\frac{1}{\sigma^2}, \quad \partial_1 \partial_2 l = -\frac{2(x - \mu)}{\sigma^3}, \quad \partial_2 \partial_2 l = \frac{1}{\sigma^2} - \frac{3(x - \mu)^2}{\sigma^4},$$

i koristeći centralne momente $E[(x - \mu)^2] = \sigma^2$, $E[(x - \mu)^4] = 3\sigma^4$, $E[(x - \mu)^6] = 15\sigma^6$, dok neparni momenti iščezavaju, direktnim računom po formuli (15) dobija se

$$\Gamma_{11,1}^{(e)} = 0, \quad \Gamma_{11,2}^{(e)} = 0, \quad \Gamma_{12,1}^{(e)} = -\frac{2}{\sigma^3}, \quad \Gamma_{12,2}^{(e)} = 0, \quad \Gamma_{22,1}^{(e)} = 0, \quad \Gamma_{22,2}^{(e)} = -\frac{6}{\sigma^3}.$$

Amari-Čencov tenzor za Gausovu familiju ima, istim putem, jedinu netrivialnu nezavisnu komponentu, pored simetrija,

$$T_{112} = \frac{2}{\sigma^3}, \quad T_{222} = \frac{8}{\sigma^3},$$

dok su $T_{111} = T_{122} = 0$ usled iščezavanja neparnih centralnih momenata. Primenom $\Gamma_{ij,k}^{(m)} = \Gamma_{ij,k}^{(e)} + T_{ijk}$, dobijamo

$$\Gamma_{11,1}^{(m)} = 0, \quad \Gamma_{11,2}^{(m)} = \frac{2}{\sigma^3}, \quad \Gamma_{12,1}^{(m)} = 0, \quad \Gamma_{12,2}^{(m)} = 0, \quad \Gamma_{22,1}^{(m)} = 0, \quad \Gamma_{22,2}^{(m)} = \frac{2}{\sigma^3}.$$

Primetimo da se e-konekcija i m-konekcija razlikuju upravo u komponentama $\Gamma_{11,2}$, $\Gamma_{12,1}$ $\Gamma_{22,2}$. Kao proveru teoreme 2.9, uzmimo $i = 2, j = k = 1$: identitet dualnosti zahteva $\partial_\sigma g_{\mu\mu} = \Gamma_{12,1}^{(e)} + \Gamma_{12,1}^{(m)}$. Leva strana je $\partial_\sigma(1/\sigma^2) = -2/\sigma^3$, dok je desna strana $-2/\sigma^3 + 0 = -2/\sigma^3$, u skladu sa teoremom.

2.5 Bregmanova divergencija i uopštena Pitagorina teorema

U prethodnom odeljku videli smo da eksponencijalne familije poseduju posebnu geometrijsku strukturu zasnovanu na dualnosti e-konekcije i m-konekcije. U prirodnim parametrima θ e-konekcija je ravna, dok su u koordinatama očekivanja η ravne m-konekcija. Ova struktura nije samo pogodna za opisivanje geodezija, već omogućava da se uvede i prirodna funkcija koja meri razliku između dve tačke statističke mnogostrukosti. U euklidskom prostoru tu ulogu ima rastojanje, odnosno kvadrat rastojanja, dok u prostoru verovatnosnih raspodela prirodniji objekat predstavlja divergencija.

Za razliku od rastojanja, divergencija ne mora biti simetrična i ne mora zadovoljavati nejednakost trougla. Ova osobina je posebno prirodna u statističkim problemima, gde razlika između dve raspodele često zavisi od toga koju raspodelu posmatramo kao referentnu. U dualno-ravnoj geometriji takvu ulogu ima Bregmanova divergencija, koja se prirodno pojavljuje iz istog potencijala ψ koji smo u prethodnom odeljku povezali sa dualnim koordinatama i Fišerovom metrikom.

Definicija 2.11. *Neka je $\psi : \Theta \subseteq \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ diferencijabilna strogo konveksna funkcija. Za dve tačke $\theta_1, \theta_2 \in \Theta$ definišemo Bregmanovu divergenciju generisanu funkcijom ψ kao*

$$D_\psi(\theta_1 \| \theta_2) = \psi(\theta_1) - \psi(\theta_2) - \nabla \psi(\theta_2)^\top (\theta_1 - \theta_2). \quad (18)$$

Geometrijsko značenje ove definicije može se najlakše razumeti posmatranjem tangentne hiperravni funkcije ψ u tački θ_2 . Njena vrednost u tački θ_1 jednaka je

$$\psi(\theta_2) + \nabla\psi(\theta_2)^\top(\theta_1 - \theta_2).$$

Prema tome, Bregmanova divergencija predstavlja razliku između stvarne vrednosti funkcije ψ u tački θ_1 i vrednosti njene tangentne hiperravni u toj istoj tački. Drugim rečima, ona meri koliko funkcija ψ u tački θ_1 odstupa od svoje linearne aproksimacije određene u tački θ_2 .

Zbog konveksnosti funkcije ψ , tangentna hiperravan leži ispod grafa funkcije, pa iz (18) neposredno sledi

$$D_\psi(\theta_1\|\theta_2) \geq 0.$$

Ako je ψ strogo konveksna, jednakost važi ako i samo ako je $\theta_1 = \theta_2$. Dakle,

$$D_\psi(\theta_1\|\theta_2) = 0 \iff \theta_1 = \theta_2.$$

Međutim, Bregmanova divergencija u opštem slučaju nije metrika. Pre svega, ona nije simetrična, odnosno uopšteno važi

$$D_\psi(\theta_1\|\theta_2) \neq D_\psi(\theta_2\|\theta_1).$$

Ovaj nedostatak simetrije nije slučajna osobina, već odražava činjenicu da je u definiciji divergencije posebno određena tačka θ_2 u kojoj se posmatra tangentna aproksimacija funkcije ψ .

Primer 2.12. *Najjednostavniji primer dobija se izborom kvadratnog potencijala*

$$\psi(\theta) = \frac{1}{2}\|\theta\|^2.$$

Tada je

$$\nabla\psi(\theta) = \theta,$$

pa iz (18) dobijamo

$$\begin{aligned} D_\psi(\theta_1\|\theta_2) &= \frac{1}{2}\|\theta_1\|^2 - \frac{1}{2}\|\theta_2\|^2 - \theta_2^\top(\theta_1 - \theta_2) \\ &= \frac{1}{2}\|\theta_1 - \theta_2\|^2. \end{aligned}$$

Dakle, kvadrat euklidskog rastojanja predstavlja poseban slučaj Bregmanove divergencije. Na ovaj način Bregmanova divergencija predstavlja prirodno proširenje poznatog euklidskog koncepta rastojanja na prostore koji nemaju nužno euklidsku geometriju.

Sada možemo preciznije videti zašto se Bregmanova divergencija prirodno pojavljuje u informacionoj geometriji. U prethodnom odeljku pokazali smo da za eksponencijalnu familiju postoje e-afine koordinate θ i dualne m-afine koordinate η , koje su povezane potencijalom ψ relacijom

$$\eta_i = \frac{\partial\psi}{\partial\theta^i}.$$

Istovremeno, Fišerova metrika u prirodnim koordinatama data je Hesijanom istog potencijala:

$$g_{ij} = \frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^i\partial\theta^j}.$$

Prema tome, funkcija ψ istovremeno određuje dualni koordinatni sistem i Rimanovu strukturu statističke mnogostrukosti. Bregmanova divergencija iz (18) zato nije dodatni objekat koji se nezavisno uvodi u geometriju, već se prirodno dobija iz istog potencijala koji generiše dualno-ravnu strukturu.

Da bismo ovo još jasnije videli, uvedimo Ležandrov dual funkcije ψ . Za odgovarajuću strogo konveksnu funkciju definišemo dualni potencijal φ sa

$$\varphi(\eta) = \sup_{\theta} \{ \theta^T \eta - \psi(\theta) \}.$$

Kada su θ i η povezani relacijom (16), supremum se dostiže u tački za koju važi

$$\eta = \nabla \psi(\theta).$$

Pod odgovarajućim uslovima regularnosti tada imamo i inverznu relaciju

$$\theta = \nabla \varphi(\eta).$$

Pored toga,

$$\psi(\theta) + \varphi(\eta) = \theta^T \eta. \quad (19)$$

Ove relacije pokazuju da su θ i η dualni koordinatni sistemi u mnogo konkretnijem smislu od pukog izbora dve parametrizacije. Gradient potencijala ψ preslikava e-afine koordinate u m-afine koordinate, dok gradient dualnog potencijala φ vrši obrnutu transformaciju. Na taj način Ležandrova dualnost potencijala predstavlja analitičku stranu e/m dualnosti konekcija.

Primer 2.13. Za eksponencijalnu familiju gustinu možemo zapisati u obliku

$$p_{\theta}(x) = h(x) \exp \left(\theta^T T_i(x) - \psi(\theta) \right). \quad (20)$$

Funkcija ψ predstavlja log-particionu funkciju i obezbeđuje normalizaciju gustine. Diferenciranjem funkcije ψ dobijamo

$$\eta_i = \frac{\partial \psi}{\partial \theta^i} = E_{\theta}[T_i(X)],$$

dok drugi izvodi daju

$$g_{ij} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^i \partial \theta^j} = \text{Cov}_{\theta}(T_i, T_j).$$

Time se još jednom vidi da Hesijan potencijala predstavlja Fišerovu metriku.

Posebno zanimljiva posledica dobija se kada posmatramo Kulbak-Lajblerovu divergenciju između dve raspodele iz iste eksponencijalne familije. Za $\theta_1, \theta_2 \in \Theta$ definišemo

$$D_{\text{KL}}(p_{\theta_1} \| p_{\theta_2}) = E_{\theta_1} \left[\log \frac{p_{\theta_1}(X)}{p_{\theta_2}(X)} \right].$$

Iz (20) sledi

$$\log \frac{p_{\theta_1}(x)}{p_{\theta_2}(x)} = (\theta_1 - \theta_2)^T T(x) - \psi(\theta_1) + \psi(\theta_2).$$

Uzimajući očekivanje u odnosu na p_{θ_1} dobijamo

$$D_{\text{KL}}(p_{\theta_1} \| p_{\theta_2}) = (\theta_1 - \theta_2)^\top \eta(\theta_1) - \psi(\theta_1) + \psi(\theta_2).$$

Korišćenjem Ležandrove relacije (2.5), odnosno

$$\varphi(\eta(\theta_1)) = \theta_1^\top \eta(\theta_1) - \psi(\theta_1),$$

možemo ovu relaciju zapisati kao

$$D_{\text{KL}}(p_{\theta_1} \| p_{\theta_2}) = \psi(\theta_2) + \varphi(\eta_1) - \theta_2^\top \eta_1,$$

gde je $\eta_1 = \eta(\theta_1)$.

Sa druge strane, Bregmanova divergencija generisana potencijalom ψ iznosi

$$D_\psi(\theta_2 \| \theta_1) = \psi(\theta_2) - \psi(\theta_1) - \eta_1^\top (\theta_2 - \theta_1).$$

Korišćenjem

$$\psi(\theta_1) = \theta_1^\top \eta_1 - \varphi(\eta_1)$$

dobijamo

$$D_{\text{KL}}(p_{\theta_1} \| p_{\theta_2}) = D_\psi(\theta_2 \| \theta_1). \quad (21)$$

Treba primetiti da je redosled argumenata u (21) obrnut. To je posledica konvencije po kojoj Bregmanovu divergenciju definišemo tangentnom aproksimacijom u drugom argumentu. Ova relacija pokazuje da je Kulbak-Lajblerova divergencija unutar eksponencijalne familije upravo Bregmanova divergencija odgovarajućeg potencijala.

Primer 2.14 (Bregmanova divergencija za Gausovu familiju). Gausova familija predstavlja posebno jednostavan i istovremeno značajan primer prethodne konstrukcije. Neka je

$$X \sim N(\mu, \sigma^2).$$

Gustina se može zapisati u obliku eksponencijalne familije

$$p(x; \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(\theta^1 x + \theta^2 x^2 - \psi(\theta)),$$

gde su prirodni parametri

$$\theta^1 = \frac{\mu}{\sigma^2}, \quad \theta^2 = -\frac{1}{2\sigma^2}.$$

Odgovarajući potencijal je

$$\psi(\theta) = -\frac{(\theta^1)^2}{4\theta^2} + \frac{1}{2} \log\left(-\frac{1}{2\theta^2}\right), \quad \theta^2 < 0.$$

Iz relacije $\eta = \nabla \psi$ dobijamo

$$\eta_1 = \frac{\partial \psi}{\partial \theta^1} = \mu$$

i

$$\eta_2 = \frac{\partial \psi}{\partial \theta^2} = \mu^2 + \sigma^2.$$

Prema tome,

$$\eta_1 = E[X], \quad \eta_2 = E[X^2].$$

Dualne m -afine koordinate tako predstavljaju očekivane vrednosti dovoljnih statistika X i X^2 , dok su θ^1 i θ^2 prirodni, odnosno e -afini parametri.

U skladu sa (17), Fišerova metrika u prirodnim koordinatama dobija se kao Hesijan potencijala:

$$g_{ij} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^i \partial \theta^j}.$$

Ovo je isti metrički tenzor koji smo prethodno dobili u standardnim koordinatama (μ, σ) , samo izražen u drugom koordinatnom sistemu. U standardnim koordinatama njegova matična reprezentacija je

$$[g_{ij}] = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\sigma^2} \end{pmatrix}.$$

Prema (21), za dve Gausove raspodele Bregmanova divergencija odgovarajućeg potencijala daje Kulbak-Lajblerovu divergenciju. Time se na konkretnom primeru vidi kako se apstraktna konstrukcija preko potencijala ψ direktno povezuje sa standardnom merom razlike između verovatnosnih raspodela.

Bregmanova divergencija omogućava da pojam ortogonalne projekcije proširimo sa euklidskog prostora na dualno-ravnu geometriju. U euklidskom prostoru, projekcija tačke na podprostor dobija se minimizacijom kvadrata rastojanja. Analogno tome, ako je $\mathcal{S}$ odgovarajuća podmnogostrukost statističke mnogostrukosti, Bregmanova projekcija tačke θ na $\mathcal{S}$ može se definisati kao minimizator

$$\theta^* = \arg \min_{\vartheta \in \mathcal{S}} D_\psi(\theta \| \vartheta).$$

Zbog toga, projekcija više nije nužno određena običnom euklidskom ortogonalnošću, već divergencijom koja odgovara geometrijskoj strukturi posmatranog prostora. U dualno-ravnoj informacionoj geometriji prirodno se pojavljuju e -projekcije i m -projekcije, koje su povezane sa dvema dualnim konekcijama.

Definicija 2.15. Neka je $S \subset M$ podmnogostrukost i $p \in M \setminus S$ tačka van nje. Tačka $q \in S$ koja minimizuje Bregmanovu divergenciju $D_\psi(p \| \cdot)$ nad S ,

$$q = \arg \min_{\vartheta \in S} D_\psi(p \| \vartheta),$$

naziva se m -projekcija tačke p na S . Analogno, tačka $q \in S$ koja minimizuje $D_\psi(\cdot \| p)$ nad S ,

$$q = \arg \min_{\vartheta \in S} D_\psi(\vartheta \| p),$$

naziva se e -projekcija tačke p na S .

Napomena 2.16. Naziv je motivisan time da m -projekcija, kada je S m -ravna podmnogostrukost, zadovoljava uslov ortogonalnosti u odnosu na m -geodeziju koja spaja p i q (analogno projekciji na afin potprostor u Euklidskom slučaju), dok e -projekcija igra istu ulogu u odnosu na e -geodeziju.

Ova činjenica predstavlja osnovu geometrijske formulacije uopštene Pitagorine teoreme.

Da bismo razumeli ulogu projekcija, podsetimo se najpre klasične Pitagorine teoreme. Ako su p, q i r tačke euklidskog prostora i ako su vektori $p - q$ i $q - r$ međusobno ortogonalni, tada važi

$$\|p - r\|^2 = \|p - q\|^2 + \|q - r\|^2.$$

Ovde tačka q može predstavljati ortogonalnu projekciju tačke p na odgovarajući podprostor. U tom slučaju ukupno kvadratno odstupanje rastavlja se na zbir odstupanja od projekcije i odstupanja unutar podprostora.

U dualno-ravnoj geometriji ulogu kvadrata euklidskog rastojanja preuzima Bregmanova divergencija. Za odgovarajuću projekciju q između tačaka p i r , pod uslovom dualne ortogonalnosti, dobija se analogna relacija

$$D_\psi(p\|r) = D_\psi(p\|q) + D_\psi(q\|r). \quad (22)$$

Ova relacija predstavlja uopštenu¹³ Pitagorinu teoremu za Bregmanovu divergenciju.

Sušтина relacije (22) može se interpretirati na sledeći način. Ako q predstavlja najbolju aproksimaciju tačke p unutar određene statističke familije, tada se ukupno odstupanje od tačke r rastavlja na deo koji nastaje zbog aproksimacije p tačkom q i deo koji opisuje dalje odstupanje od same projekcije. U tom smislu možemo simbolički pisati

$$\text{ukupno odstupanje} = \text{odstupanje do projekcije} + \text{odstupanje unutar modela}.^{14}$$

Važno je primetiti da se ovde ne radi o običnoj euklidskoj ortogonalnosti. Ortogonalnost je određena dualnom strukturom statističke mnogostrukosti i povezana je sa parom dualnih konekcija. Upravo zato je uvođenje e-konekcije i m-konekcije bilo potrebno da bi se ova relacija mogla prirodno formulisati.

Dokaz. U nastavku ćemo eksplicitno pokazati kako se relacija (22) dobija iz same definicije Bregmanove divergencije. Neka su $\theta_p, \theta_q, \theta_r$ tri tačke u domenu potencijala ψ . Prema (18),

$$\begin{aligned} D_\psi(\theta_p\|\theta_r) &= \psi(\theta_p) - \psi(\theta_r) - \nabla\psi(\theta_r)^\top(\theta_p - \theta_r), \\ D_\psi(\theta_p\|\theta_q) &= \psi(\theta_p) - \psi(\theta_q) - \nabla\psi(\theta_q)^\top(\theta_p - \theta_q), \\ D_\psi(\theta_q\|\theta_r) &= \psi(\theta_q) - \psi(\theta_r) - \nabla\psi(\theta_r)^\top(\theta_q - \theta_r). \end{aligned}$$

Oduzimanjem poslednja dva izraza od prvog dobijamo

$$\begin{aligned} &D_\psi(\theta_p\|\theta_r) - D_\psi(\theta_p\|\theta_q) - D_\psi(\theta_q\|\theta_r) \\ &= -\nabla\psi(\theta_r)^\top(\theta_p - \theta_r) + \nabla\psi(\theta_q)^\top(\theta_p - \theta_q) + \nabla\psi(\theta_r)^\top(\theta_q - \theta_r). \end{aligned}$$

Pošto je

$$\theta_p - \theta_r = (\theta_p - \theta_q) + (\theta_q - \theta_r),$$

članovi koji sadrže $\nabla\psi(\theta_r)$ se poništavaju i ostaje

$$D_\psi(\theta_p\|\theta_r) - D_\psi(\theta_p\|\theta_q) - D_\psi(\theta_q\|\theta_r) = (\nabla\psi(\theta_q) - \nabla\psi(\theta_r))^\top(\theta_p - \theta_q). \quad (23)$$

Kako je

$$\eta = \nabla\psi(\theta),$$

¹³Ovde je reč o globalnoj tvrdnji koja povezuje tri proizvoljno udaljene tačke P, Q, R preko Bregmanove divergencije, kada su Q, R tačke m-ravne podmnogostrukosti S , a Q je m-projekcija spoljašnje tačke P na S .

¹⁴Ova dekompozicija ima prirodno geometrijsko tumačenje. Vektor posmatranih vrednosti može se predstaviti kao zbir njegove ortogonalne projekcije na prostor predikatora i vektora reziduala. Prema Pitagorinoj teoremi, kvadrat norme posmatranog vektora jednak je zbiru kvadrata normi njegove projekcije i rezidualnog vektora, što u slučaju linearnog modela sa slobodnim članom daje dekompoziciju SSTO = SSR + SSE.

ova relacija može da se napiše u dualnim koordinatama kao

$$D_\psi(\theta_p \| \theta_r) - D_\psi(\theta_p \| \theta_q) - D_\psi(\theta_q \| \theta_r) = (\eta_q - \eta_r)^\top (\theta_p - \theta_q). \quad (24)$$

Prema tome, ukoliko su $\theta_p - \theta_q$ i $\eta_q - \eta_r$ međusobno ortogonalni u prirodnom dualnom smislu, odnosno ukoliko važi

$$(\eta_q - \eta_r)^\top (\theta_p - \theta_q) = 0,$$

poslednji član u (24) iščezava i dobijamo

$$D_\psi(\theta_p \| \theta_r) = D_\psi(\theta_p \| \theta_q) + D_\psi(\theta_q \| \theta_r).$$

Time je dokazana uopštena Pitagorina relacija za Bregmanovu divergenciju pod odgovarajućim uslovom dualne ortogonalnosti.

Relacija (23) je korisna i izvan samog slučaja jednakosti. Ona pokazuje da odstupanje od Pitagorine jednakosti ima precizno određen oblik i da je kontrolisano dualnim skalarni proizvodom između odgovarajućih razlika u e-koordinatama i m-koordinatama. $\square$

U ovom poglavlju ćemo još pokazati i direktnu vezu projekcija sa EM algoritmom, jednim od najkorisnijih algoritama u modernoj statistici.

Prethodno razmatranje pokazuje da dualnost e-konekcije i m-konekcije nije samo formalna geometrijska konstrukcija. Ista struktura pojavljuje se u problemima statističke estimacije, posebno u algoritmu očekivanja i maksimizacije, poznatom kao EM algoritam.

Pretpostavimo da pored posmatrane promenljive X postoji latentna promenljiva Z , dok je model određen parametrom θ . U svakoj iteraciji EM algoritam polazi od trenutne vrednosti $\theta^{(t)}$ i najpre određuje uslovnu raspodelu latentne promenljive:

$$q^{(t)}(z) = p(z \mid x, \theta^{(t)}).$$

Ovaj korak predstavlja E-korak. Nakon toga se u M-koraku parametar modela ažurira rešavanjem problema

$$\theta^{(t+1)} = \arg \max_{\theta} E_{q^{(t)}} [\log p(x, z \mid \theta)].$$

Informaciono-geometrijski gledano, EM se u odgovarajućoj formulaciji može interpretirati kao postupak koji naizmenično vrši projekcije između odgovarajućih statističkih familija. Pri tome se u eksponencijalnim familijama prirodno pojavljuju dualne e- i m-geometrije, a KL divergencija predstavlja funkciju koja meri odstupanje između raspodela. U tom smislu može se konceptualno prikazati šema¹⁵

$$\text{E-korak} \longrightarrow \text{e-projekcija} \longrightarrow \text{M-korak} \longrightarrow \text{m-projekcija}.$$

Ovu interpretaciju ipak ne treba shvatiti kao identifikaciju EM algoritma sa e i m-konekcijama. Geometrijska interpretacija u terminima dualnih projekcija zavisi od konkretnog statističkog modela i načina na koji se uvode odgovarajuće familije raspodela. Njena vrednost je u tome što pokazuje kako se optimizacioni koraci EM algoritma mogu sagledati kroz istu geometrijsku strukturu koja je prethodno dovela do Bregmanove divergencije i uopštene Pitagorine teoreme.

¹⁵Redosled sledi direktno iz definicije m-projekcije i e-projekcije. E-korak nalazi $r^{(t)} \in D$ koje minimizuje $D_{KL}(r \| p_{\theta^{(t)}})$ – promenljiva na prvom mestu, dakle e-projekcija; M-korak nalazi $\theta^{(t+1)}$ koje minimizuje $D_{KL}(r^{(t)} \| p_{\theta})$ – promenljiva na drugom mestu, dakle m-projekcija.

Na taj način dobija se prirodan lanac ideja koji povezuje geometrijske i statističke konstrukcije razvijene u ovom poglavlju:

e/m -dualnost $\longrightarrow$ dualno-ravna geometrija $\longrightarrow$ potencijal ψ $\longrightarrow$ Bregmanova divergencija
 $\longrightarrow$ KL $\longrightarrow$ projekcije $\longrightarrow$ Pitagorina teorema $\longrightarrow$ EM.

3 Difuzioni procesi

Nakon što smo u prethodnom poglavlju izgradili geometrijski jezik informacione geometrije, u ovom poglavlju uvodimo drugi stub ovog rada. Imamo dva cilja u ovom poglavlju. Prvo, difuzioni proces posmatramo kroz dva dualna objekta: generator, koji deluje na funkcije, i njemu adjungovani operator, koji deluje na mere. Drugo, pokazujemo da je ta dualnost analogna dualnosti e -konekcije i m -konekcije iz Poglavlja 2, i da upravo iz nje proizilaze dve osnovne jednačine teorije, Foker-Plank jednačina i Kolmogorovljeva jednačina unazad. Ovaj aparat je neophodan korak ka Poglavlju 5, gde ćemo pokazati da je problem Šredingerov mosta, u svojoj dinamičkoj formulaciji, upravo problem nalaženja difuzionog procesa čija dinamika minimizuje Kulbak-Lajblerovu divergenciju u odnosu na zadati referentni proces.

Pod difuzionim procesom podrazumevamo Itov proces,

$$dX_t = b(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t,$$

čiji su koeficijenti b i σ nezavisni od vremena. Ovo je, dakle, poseban slučaj Itovih procesa, izdvojen zahtevom vremenske homogenosti koeficijenata, i upravo ta homogenost omogućava da se proces potpuno opiše jednim, vremenski nezavisnim diferencijalnim operatorom, generatorom, kojim se bavimo u ovom odeljku.

Kao osnovnu literaturu za ovo poglavlje koristimo Øksendal [35] i Pavliotis [28], dok se za rigorozniju teoriju gradijentnih tokova pridruženih Foker-Plank jednačini, koju koristimo kasnije u Poglavlju 5, oslanjamo na Ambrosio et al. [2].

3.1 Generator difuzionog procesa

Neka je $(X_t)_{t \geq 0}$ difuzioni proces, rešenje stohastičke diferencijalne jednačine

$$dX_t = b(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t, \quad X_0 = x,$$

gde je $b : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ drift, $\sigma : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n \times n}$ matrica difuzije, a $(W_t)_{t \geq 0}$ standardno Braunovo kretanje u $\mathbb{R}^n$ ¹⁶. Cilj ovog odeljka je da svakom takvom procesu pridružimo diferencijalni operator koji infinitezimalno opisuje njegovu dinamiku.

Definicija 3.1. *Generator procesa (X_t) je operator $\mathcal{L}$ koji svakoj dovoljno glatkoj funkciji $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ pridružuje funkciju*

$$\mathcal{L}f(x) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\mathbb{E}_x[f(X_t)] - f(x)}{t}, \quad (25)$$

gde je $\mathbb{E}_x$ očekivanje pod uslovom $X_0 = x$.

Limes u (25) možemo eksplicitno izračunati primenom Itove formule na $f(X_t)$:

$$f(X_t) = f(x) + \int_0^t \nabla f(X_s) \cdot b(X_s) ds + \int_0^t \nabla f(X_s) \cdot \sigma(X_s) dW_s + \frac{1}{2} \int_0^t \text{Tr}(\sigma \sigma^T(X_s) \nabla^2 f(X_s)) ds.$$

Uzimajući očekivanje $\mathbb{E}_x$ obe strane, srednji (stohastički) integral iščezava jer je Itov integral martingal sa očekivanjem nula (pod standardnim uslovima integrabilnosti na $\nabla f \cdot \sigma$), pa je

$$\mathbb{E}_x[f(X_t)] - f(x) = \mathbb{E}_x \left[\int_0^t \left(b(X_s) \cdot \nabla f(X_s) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma \sigma^T(X_s) \nabla^2 f(X_s)) \right) ds \right].$$

¹⁶Videti uvod za standardne uslove regularnosti na koeficijente b i σ koje kroz ceo rad pretpostavljamo za postojanje i jedinstvenost rešenja stohastičke diferencijalne jednačine.

Deljenjem sa t i puštanjem $t \rightarrow 0^+$, pod uslovima regularnosti koji dozvoljavaju zamenu limesa i integrala (neprekidnost podintegralnog izraza po s , koja sledi iz neprekidnosti putanja X_s i glatкости b, σ, f), integral se svodi na svoju vrednost u $s = 0$, tj. $X_0 = x$, čime dobijamo eksplicitnu formulu

$$\mathcal{L}f(x) = b(x) \cdot \nabla f(x) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma \sigma^T(x) \nabla^2 f(x)) = b^i(x) \partial_i f(x) + \frac{1}{2} (\sigma \sigma^T)^{ij}(x) \partial_i \partial_j f(x). \quad (26)$$

Generator $\mathcal{L}$ je, dakle, diferencijalni operator drugog reda, čiji linearni deo određuje drift b , a kvadratni (difuzioni) deo matrica $a := \sigma \sigma^T$.

Primer 3.2. Za standardno Braunovo kretanje, $b = 0, \sigma = I$, generator je $\mathcal{L}f = \frac{1}{2} \Delta f$, polovina Laplasijana. Ovaj slučaj detaljno razmatramo u primeru 3.10.

Napomena 3.3. Formula (26) ima i čisto probabilističku interpretaciju nezavisnu od Itove formule: $\mathcal{L}f(x)$ meri trenutnu brzinu promene očekivane vrednosti f duž procesa, polazeći iz tačke x . Ovo opravdava naziv generator, jer je $\mathcal{L}$ upravo onaj objekat koji, preko Kolmogorovljeve jednačine unapred i unazad, generiše celokupnu vremensku evoluciju procesa (X_t) i svih njemu pridruženih statistika.

Napomena 3.4. Konstrukcija generatora iz procesa, opisana u ovom odeljku, dopušta i obrnut pravac: polazeći od diferencijalnog operatora $\mathcal{L} = b \cdot \nabla + \frac{1}{2} \text{Tr}(a \nabla^2)$ zadatog koeficijentima b, a , može se postaviti pitanje postojanja procesa čiji je to generator. Jedan pristup je direktan, preko same stohastičke diferencijalne jednačine: pošto je $a = \sigma \sigma^T$ za neko σ (na primer, preko Čoleskog razlaganja, ako je a pozitivno semidefinitna), formira se diferencijalna jednačina $dX_t = b(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t$ i rešava se pod uslovima regularnosti. Elegantniji, apstraktniji pristup je preko problema martingala: kaže se da mera P na prostoru neprekidnih putanja Ω rešava problem martingala za $(\mathcal{L}, x)$ ako je, pod P , $X_0 = x$ skoro sigurno i ako je za svaku $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ proces

$$M_t^f := f(X_t) - f(X_0) - \int_0^t \mathcal{L}f(X_s) ds$$

martingal u odnosu na prirodnu filtraciju. Pod uslovima regularnosti na b, a (na primer, ograničenost i neprekidnost), Stroock i Varadhan su pokazali da rešenje problema martingala postoji i jedinstveno je, čime mera P u potpunosti određuje traženi difuzioni proces sa generatorom $\mathcal{L}$, videti Stroock and Varadhan [32]. Ovaj pristup je posebno koristan u situacijama gde se SDE ne rešava eksplicitno, i teorijski je prirodniji jer proces definiše direktno preko svojstva njegovog generatora.

3.2 Adjungovani operator

Videli smo kako generator deluje na funkcije i stvara novu funkciju koja opisuje trenutnu brzinu promene očekivane vrednosti funkcije duž procesa. U ovom delu želimo da opišemo i drugu, jednako prirodnu stranu iste dinamike. Umesto da posmatramo proces X_t kao jednu trajektoriju koja kreće iz fiksne tačke x , možemo zamisliti čitav ansambl nezavisnih realizacija procesa, čija je početna tačka sama slučajna, raspoređena po gustini ρ_0 . Pitamo se kako se, pod istom dinamikom, ta gustina menja u vremenu, odnosno kako izgleda ρ_t za $t > 0$. Za razliku od $\mathcal{L}$, ovaj novi operator treba da deluje na *mere*, a ne na funkcije. Prirodan način da se ova druga strana definiše jeste preko L^2 dualnosti.

Definicija 3.5. Neka je F linearni operator, adjungovani operator F^* je operator koji zadovoljava

$$\langle Ff, g \rangle = \langle f, F^*g \rangle, \quad \text{za sve } f, g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n), \quad (27)$$

gde je $\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)g(x) dx$ standardni skalarni proizvod na $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Neka je $\mathcal{L}$ generator dat sa (26). Eksplicitnu formulu za $\mathcal{L}^*$ dobijamo direktnim računom, dvostrukom parcijalnom integracijom. Pošto su f, g kompaktnog nosača, granični članovi u svakom koraku nestaju¹⁷. Za prvi, driftni član, jedna parcijalna integracija po x^i daje

$$\int_{\mathbb{R}^n} (b^i \partial_i f) g dx = - \int_{\mathbb{R}^n} f \partial_i (b^i g) dx.$$

Za drugi, difuzioni član, potrebne su dve uzastopne parcijalne integracije, prvo po x^i a zatim po x^j :

$$\int_{\mathbb{R}^n} a^{ij} (\partial_i \partial_j f) g dx = - \int_{\mathbb{R}^n} (\partial_j f) \partial_i (a^{ij} g) dx = \int_{\mathbb{R}^n} f \partial_i \partial_j (a^{ij} g) dx.$$

Sabiranjem ova dva rezultata,

$$\langle \mathcal{L}f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} f \left(-\partial_i (b^i g) + \frac{1}{2} \partial_i \partial_j (a^{ij} g) \right) dx,$$

odakle, upoređivanjem sa (27), čitamo eksplicitnu formulu

$$\mathcal{L}^*g = -\partial_i (b^i g) + \frac{1}{2} \partial_i \partial_j (a^{ij} g) = -\nabla \cdot (bg) + \frac{1}{2} \partial_i \partial_j (a^{ij} g). \quad (28)$$

Primetimo suštinsku razliku u strukturi između (26) i (28): generator $\mathcal{L}$ deluje na f tako što izvodi *ulaze* u f (koeficijenti b, a množe izvode od f), dok adjungovani $\mathcal{L}^*$ deluje na g tako što izvodi *čitav proizvod* $b^i g$, odnosno $a^{ij} g$ (koeficijenti su unutar izvoda). Ova razlika nije kozmetička, već je upravo razlog zašto $\mathcal{L}$ prirodno čuva glatkost funkcija na koje deluje, dok $\mathcal{L}^*$, primenjen na gustinu verovatnoće, opisuje kako se ta gustina, kao celina, premešta i deformiše u prostoru.

Napomena 3.6. Definicija adjungovanog operatora $\mathcal{L}^*$ preko L^2 skalarnog proizvoda (27) prećutno pretpostavlja da mera na koju $\mathcal{L}^*$ deluje ima gustinu u odnosu na lebegovu meru, tj. da je apsolutno neprekidna. Ovo isključuje, na primer, slučaj kada difuzioni proces kreće iz fiksne, determinističke tačke $X_0 = x_0$, gde je početna raspodela $P_0 = \delta_{x_0}$, bez gustine. Za ovakve slučajeve, $\mathcal{L}^*$ je moguće definisati opštije preko dualnog para $\langle f, \mu \rangle := \int f d\mu$ između glatkih test funkcija i proizvoljnih (ne nužno apsolutno neprekidnih) mera, zahtevom $\langle f, \mathcal{L}^* \mu \rangle = \langle \mathcal{L}f, \mu \rangle$ za sve $f \in C_c^\infty$, čime se Foker-Plank jednačina u narednom odeljku može postaviti u slabom smislu i za singularan početni uslov. Za jednostavnost izlaganja, mi ćemo se u ovom radu ograničiti na L^2 formulaciju i posmatrati ρ_t za $t > 0$, kada je, pod uslovom da je matrica $a = \sigma \sigma^T$ pozitivno definitna, rešenje već apsolutno neprekidno bez obzira na prirodu početnog uslova.

Primer 3.7. Ilustrujmo razliku u delovanju $\mathcal{L}$ i $\mathcal{L}^*$ na standardnom Braunovom kretanju, $dX_t = dW_t$, gde je $\mathcal{L}f = \frac{1}{2} f''$ i $\mathcal{L}^* \rho = \frac{1}{2} \rho''$, dakle formalno isti izraz, samo primenjen na različite objekte.

¹⁷Ako f, g nisu kompaktnog nosača, dovoljno je pretpostaviti da f, g i njihovi izvodi dovoljno brzo opadaju u beskonačnosti (na primer, da pripadaju Švarcovom prostoru), tako da granični članovi i dalje nestaju.

Izbor funkcije f predstavlja izbor pitanja koje postavljamo procesu, krenuvši iz fiksne tačke x ; $\mathcal{L}f$ zatim opisuje kako se odgovor na to jedno pitanje, $\mathbb{E}_x[f(X_t)]$, menja u vremenu. Za $f(x) = x$ dobija se $\mathcal{L}f(x) = 0$, odakle $\mathbb{E}_x[X_t] = x$ za sve t : proces je martingal, u proseku se ne pomera od polazne tačke. Za $f(x) = x^2$ dobija se $\mathcal{L}f(x) = 1$, odakle $\mathbb{E}_x[X_t^2] = x^2 + t$, a odatle $D_x(X_t) = t$: raspršenje procesa oko polazne tačke raste linearno sa vremenom. Svaki izbor f daje drugačiju skalarnu jednačinu za jednu izabranu statistiku procesa, gledanu iz jedne tačke; nijedan pojedinačan izbor ne daje potpun opis procesa.

Adjungovani operator, primenjen na gustinu, umesto jednog pitanja daje odgovor na sva moguća pitanja odjednom. Neka je $\rho_0(x) = \mathcal{N}(x; m, s^2)$ proizvoljna početna gustina. Rešenje jednačine $\partial_t \rho = \frac{1}{2} \rho''$ sa ovim početnim uslovom je

$$\rho_t(x) = \mathcal{N}(x; m, s^2 + t),$$

u skladu sa oba prethodna računa: centar ostaje m , a disperzija raste kao $s^2 + t$. Za razliku od pojedinačnih odgovora $\mathbb{E}_x[f(X_t)]$ za izabrano f , gustina ρ_t sadrži potpunu informaciju o raspodeli u trenutku t , iz koje se, integracijom $\int f \rho_t dx$, može izračunati odgovor na proizvoljno pitanje f odjednom.

Napomena 3.8. Dualnost $\mathcal{L} \leftrightarrow \mathcal{L}^*$ strukturno je analogna dualnosti e - i m -konekcije iz odeljka 2.4: generator deluje na funkcije (kao što e -konekcija prirodno deluje u koordinatama θ , koordinatama "posmatrača"), dok adjungovani deluje na mere, odnosno gustine (kao što m -konekcija prirodno deluje u koordinatama η , koordinatama "raspodele mase"). Ovu analogiju precizno formulišemo u Poglavlju 5.

3.3 Foker-Plank jednačina

U prethodnom odeljku definisali smo adjungovani operator $\mathcal{L}^*$ upravo tako da opisuje delovanje generatora na mere, umesto na funkcije. Sada ćemo pokazati da je taj isti $\mathcal{L}^*$, primenjen na gustinu raspodele procesa X_t , tačno operator koji upravlja evolucijom te gustine u vremenu.

Neka je ρ_t gustina raspodele X_t , tj. $\mathbb{P}(X_t \in A) = \int_A \rho_t(x) dx$ za svaki Borelov skup A , i neka je $f \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ proizvoljna test funkcija. Primenom Itove formule na $f(X_t)$,

$$f(X_t) = f(X_0) + \int_0^t (\mathcal{L}f)(X_s) ds + \int_0^t \nabla f(X_s) \cdot \sigma(X_s) dW_s,$$

gde smo prva dva integranda iz izvođenja generatora (odeljak 3.1) objedinili u $\mathcal{L}f$. Uzi-
majući očekivanje obe strane, stohastički integral nestaje (Itov integral je martingal sa očekivanjem nula), pa je

$$\mathbb{E}[f(X_t)] - \mathbb{E}[f(X_0)] = \mathbb{E} \left[\int_0^t (\mathcal{L}f)(X_s) ds \right] = \int_0^t \mathbb{E}[(\mathcal{L}f)(X_s)] ds,$$

gde smo zamenili redosled očekivanja i integracije po s (Fubinijeva teorema, pod uslovom integrabilnosti). Uvodeći skalarni proizvod $\langle f, \rho_t \rangle = \int f \rho_t dx$ iz prethodnog odeljka, prepoznavamo $\mathbb{E}[f(X_t)] = \langle f, \rho_t \rangle$ i $\mathbb{E}[(\mathcal{L}f)(X_s)] = \langle \mathcal{L}f, \rho_s \rangle$, pa gornja jednakost postaje

$$\langle f, \rho_t \rangle - \langle f, \rho_0 \rangle = \int_0^t \langle \mathcal{L}f, \rho_s \rangle ds. \quad (29)$$

Diferenciranjem (29) po t dobijamo

$$\frac{d}{dt} \langle f, \rho_t \rangle = \langle \mathcal{L}f, \rho_t \rangle,$$

a primenom definicije adjungovanog operatora (27) na desnu stranu,

$$\frac{d}{dt}\langle f, \rho_t \rangle = \langle f, \mathcal{L}^* \rho_t \rangle.$$

S druge strane, pod uslovima regularnosti koji dozvoljavaju diferenciranje pod znakom integrala, leva strana je

$$\frac{d}{dt}\langle f, \rho_t \rangle = \frac{d}{dt} \int f \rho_t dx = \int f \partial_t \rho_t dx = \langle f, \partial_t \rho_t \rangle.$$

Izjednačavanjem ova dva izraza, $\langle f, \partial_t \rho_t \rangle = \langle f, \mathcal{L}^* \rho_t \rangle$ važi za *svaku* test funkciju $f \in C_c^\infty$, odakle, po osnovnoj lemi varijacionog računa¹⁸, sledi

$$\partial_t \rho_t = \mathcal{L}^* \rho_t. \quad (30)$$

Ovo je *Foker-Plank jednačina*. Eksplicitno, korišćenjem formule (28) za $\mathcal{L}^*$,

$$\partial_t \rho = -\nabla \cdot (b\rho) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_i \partial_j (a^{ij} \rho), \quad \rho(\cdot, 0) = \rho_0. \quad (31)$$

Prvi član, $-\nabla \cdot (b\rho)$, opisuje kako se gustina premešta u pravcu vektorskog polja b , ne menjajući pritom svoju ukupnu "masu"¹⁹. Drugi član opisuje difuzno razmazivanje gustine usled slučajnih fluktuacija procesa. Napomenimo, u skladu sa napomenom iz prethodnog odeljka, da jednačina (31) klasičan smisao ima za $t > 0$ čak i kada ρ_0 nije apsolutno neprekidna, na primer kada proces kreće iz fiksne tačke, $\rho_0 = \delta_{x_0}$, pod uslovom da je matrica $a = \sigma \sigma^T$ pozitivno definitna.

Napomena 3.9 (Kolmogorovljeva jednačina unazad). *Foker-Plank²⁰ jednačina nije jedina parcijalna diferencijalna jednačina pridružena difuzionom procesu X_t . Neka je $u(x, t) := \mathbb{E}_x[f(X_t)]$. Iz Markovljevog svojstva procesa, $u(x, t + h) = \mathbb{E}_x[\mathbb{E}_{X_h}[f(X_t)]] = \mathbb{E}_x[u(X_h, t)]$, pa je*

$$\frac{u(x, t + h) - u(x, t)}{h} = \frac{\mathbb{E}_x[u(X_h, t)] - u(x, t)}{h} \xrightarrow{h \rightarrow 0^+} \mathcal{L}_x u(x, t),$$

gde $\mathcal{L}_x$ označava da generator deluje na promenljivu x , pri fiksnom t , prema samoj definiciji (25). Dobijamo tako

$$\partial_t u = \mathcal{L}u, \quad u(x, 0) = f(x). \quad (32)$$

Ova jednačina naziva se Kolmogorovljeva jednačina unazad, jer se u njoj pojavljuje generator $\mathcal{L}$, a ne njegov adjungovani, pri čemu se rešenje traži kao funkcija početnog stanja x , iz koga proces "gleda unazad" ka svom polazištu, za razliku od Foker-Plank jednačine (30), gde je $\mathcal{L}^*$ primenjen direktno na gustinu koja evoluira unapred. Obe jednačine opisuju istu dinamiku, samo iz dva različita ugla, i njihov kontrast je tačno onaj koji smo istakli u odeljku 3.2: $\mathcal{L}$ prati kako se menja odgovor na fiksirano pitanje f , gledano iz tačke x , dok $\mathcal{L}^*$ prati kako se menja čitava gustina, gledano kao evolucija ansambla.

¹⁸Osnovna lema varijacionog računa: ako je $\int f h dx = 0$ za svaku $f \in C_c^\infty$, onda je $h = 0$ skoro svuda. Primijenjeno na $h = \partial_t \rho_t - \mathcal{L}^* \rho_t$.

¹⁹Ovaj tip člana, oblika $-\nabla \cdot (b\rho)$, poznat je u mehanici fluida kao jednačina kontinuiteta, i opisuje očuvanje mase pri transportu duž polja brzine b .

²⁰Obe jednačine potiču iz Kolmogorovljevog rada iz 1931. godine [22], u kome su prvi put sistematski izvedene i jednačina unapred i jednačina unazad za difuzione procese. Naknadno je uočeno da je jednačina unapred, u specijalnom slučaju, već ranije bila poznata u fizici, iz radova Fokera i Planka o Braunovom kretanju čestica, pa se otuda uobičajeno naziva Foker-Plank jednačina, dok se naziv Kolmogorovljeva jednačina unapred ravnopravno koristi u matematičkoj literaturi.

Primer 3.10. Najjednostavniji, a ujedno i najvažniji poseban slučaj difuzionog procesa dobija se izborom $b = 0$, $\sigma = I$, gde je I jedinična matrica. Proces X_t je tada standardno Braunovo kretanje, generator se svodi na $\mathcal{L}f = \frac{1}{2}\Delta f$, i pošto je Laplasijan samoadjungovan operator na $L^2(\mathbb{R}^n)$ (parcijalnom integracijom, granični članovi iščezavaju za $f, g \in C_c^\infty$, pa je $\langle \Delta f, g \rangle = \langle f, \Delta g \rangle$), imamo $\mathcal{L}^* = \mathcal{L}$. Foker-Plank jednačina (31) se u ovom slučaju svodi na

$$\partial_t \rho = \frac{1}{2} \Delta \rho, \quad \rho(\cdot, 0) = \rho_0, \quad (33)$$

poznatu kao toplotna jednačina²¹.

Rešenje jednačine (33) ima eksplicitnu, zatvorenu formu. Primenom Furijeove transformacije po prostornoj promenljivoj, $\hat{\rho}(k, t) = \int_{\mathbb{R}^n} \rho(x, t) e^{-ik \cdot x} dx$, jednačina (33) prelazi u običnu diferencijalnu jednačinu po t , za svako fiksno k :

$$\partial_t \hat{\rho}(k, t) = -\frac{|k|^2}{2} \hat{\rho}(k, t),$$

sa rešenjem $\hat{\rho}(k, t) = \hat{\rho}_0(k) e^{-|k|^2 t/2}$. Prepoznamo da je $e^{-|k|^2 t/2}$ Furijeova transformacija Gausove gustine $\mathcal{N}(0, tI)$, pa množenje u Furijeovom prostoru odgovara konvoluciji u prostornom domenu:

$$\rho(x, t) = (\rho_0 * p_t)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} \rho_0(y) p_t(x - y) dy, \quad p_t(x) := \frac{1}{(2\pi t)^{n/2}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{2t}\right). \quad (34)$$

Funkcija p_t naziva se fundamentalno rešenje ili toplotno jezgro, i predstavlja rešenje jednačine (33) sa početnim uslovom $\rho_0 = \delta_0$, u skladu sa napomenom iz prethodnog odeljka o smislenosti jednačine za singularan početni uslov: zaista, $p_t \rightarrow \delta_0$ slabo kada $t \rightarrow 0^+$, dok je za svako $t > 0$, p_t glatka funkcija.

Primer 3.11. Nadovežimo se na prethodni primer. Za $n = 1$ i Gausov početni uslov $\rho_0 = \mathcal{N}(m, s^2)$, konvolucija dve nezavisne Gausove gustine je ponovo Gausova, sa sabranim disperzijama, pa (34) direktno daje

$$\rho_t = \mathcal{N}(m, s^2 + t),$$

u skladu sa primerom iz odeljka 3.2. Ovaj primer pokazuje da je fundamentalno rešenje p_t upravo prelazna gustina Braunovog kretanja iz odeljka 3.1: proces koji u trenutku 0 kreće iz fiksne tačke x_0 ima u trenutku t gustinu $p_t(\cdot - x_0) = \mathcal{N}(x_0, tI)$, tačno familiju iz Poglavlja 2, sa disperzijom koja raste linearno u vremenu.

3.4 Dirihleova forma

Videli smo u odeljku 3.2 da generator $\mathcal{L}$ i njegov adjungovani $\mathcal{L}^*$, u odnosu na standardni $L^2(\mathbb{R}^n)$ skalarni proizvod, generalno nisu isti operator. Postoji, međutim, važna klasa difuzionih procesa kod kojih se ova asimetrija gubi, ako se skalarni proizvod posmatra u odnosu na pravu meru, stacionarnu meru procesa, umesto u odnosu na Lebegovu meru. U tom slučaju generator postaje samoadjungovan, i njegovo delovanje se može zapisati preko simetrične bilinearne forme, Dirihleove forme, koja procesu pridružuje pojam energije. Ova forma će nam, kao što ćemo pokazati na kraju odeljka, dati prvu eksplicitnu vezu između difuzionih procesa i Fišerove metrike iz Poglavlja 2.

²¹Toplotnu jednačinu u ovom obliku prvi je izveo Furije početkom 19. veka, kao model širenja toplote kroz čvrsto telo, znatno pre nego što je uspostavljena veza sa Braunovim kretanjem preko rada Ajnštajna, Smolučovskog i Vinera početkom 20. veka.

Definicija 3.12. Verovatnosna mera μ na $\mathbb{R}^n$ naziva se stacionarna (ili invarijantna) mera difuzionog procesa sa generatorom $\mathcal{L}$ ako je $\mathcal{L}^*\mu = 0$, gde je $\mathcal{L}^*$ adjungovani operator uveden u odeljku 3.2, u smislu dualnog para iz napomene 3.6.

Prema Foker-Plank jednačini iz odeljka 3.3, uslov $\mathcal{L}^*\mu = 0$ znači upravo da je gustina μ fiksna tačka evolucije $\partial_t \rho = \mathcal{L}^* \rho$: ako proces krene iz raspodele μ , ostaje u njoj za sva buduća vremena.

Među stacionarnim merama posebno mesto zauzimaju one koje zadovoljavaju jače, simetrično svojstvo.

Definicija 3.13. Difuzioni proces sa generatorom $\mathcal{L}$ naziva se reverzibilan u odnosu na meru μ sa gustinom π ako za sve $f, g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ važi

$$\int_{\mathbb{R}^n} (\mathcal{L}f) g \pi dx = \int_{\mathbb{R}^n} f (\mathcal{L}g) \pi dx. \quad (35)$$

Uslov (35) kaže tačno da je $\mathcal{L}$ samoadjungovan operator na $L^2(\mathbb{R}^n, \pi dx)$, tj. na prostoru funkcija sa skalarnim proizvodom $\langle f, g \rangle_\pi := \int f g \pi dx$, umesto na standardnom $L^2(\mathbb{R}^n, dx)$ koji smo koristili ranije. Reverzibilnost je jače svojstvo od same stacionarnosti: reverzibilan proces je uvek stacionaran u odnosu na π (uzimanjem $g \equiv 1$ u (35), formalno prošireno na konstante, dobija se $\int (\mathcal{L}f) \pi dx = 0$ za sve f , što je slabi oblik uslova $\mathcal{L}^*\pi = 0$), ali obrnuto ne mora da važi.

Pod pretpostavkom reverzibilnosti, generator dopušta zapis preko simetrične bilinearne forme.

Teorema 3.14. Neka je proces sa generatorom $\mathcal{L} = b \cdot \nabla + \frac{1}{2} \text{Tr}(a \nabla^2)$ reverzibilan u odnosu na meru μ sa gustinom π . Tada za sve $f, g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ važi

$$\mathcal{E}(f, g) := -\langle \mathcal{L}f, g \rangle_\pi = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} a^{ij} \partial_i f \partial_j g \pi dx. \quad (36)$$

Dokaz. Krećemo od $\langle \mathcal{L}f, g \rangle_\pi = \int (\mathcal{L}f) g \pi dx$ i primenjujemo parcijalnu integraciju analognu onoj iz odeljka 3.2, sada u odnosu na meru πdx umesto dx . Za driftni član,

$$\int (b^i \partial_i f) g \pi dx = - \int f \partial_i (b^i g \pi) dx = - \int f \left[(\partial_i b^i) g \pi + b^i g \partial_i \pi + b^i \pi \partial_i g \right] dx.$$

Za difuzioni član, dvema parcijalnim integracijama analognim ranijima,

$$\frac{1}{2} \int a^{ij} (\partial_i \partial_j f) g \pi dx = \frac{1}{2} \int f \partial_i \partial_j (a^{ij} g \pi) dx.$$

Uslov reverzibilnosti (35) zahteva da je zbir ova dva izraza simetričan u f, g . Pod tim uslovom, nakon sređivanja²² preostaje tačno član oblika $-\frac{1}{2} \int a^{ij} \partial_i f \partial_j g \pi dx$, pomnožen sa -1 zbog definicije $\mathcal{E}$, čime se dobija (36). Puni račun, uz precizne uslove na π pod kojima reverzibilnost zaista važi (tzv. uslov detaljne ravnoteže), dat je u Pavliotis [28, Poglavlje 4].

Forma $\mathcal{E}$ iz (36) naziva se Dirihleova forma²³ pridružena procesu. Za razliku od $\mathcal{L}$, koja je definisana samo na dovoljno glatkim funkcijama, $\mathcal{E}$ je simetrična bilinearna forma, $\mathcal{E}(f, g) = \mathcal{E}(g, f)$, i nenegativna na dijagonali,

$$\mathcal{E}(f, f) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} a^{ij} \partial_i f \partial_j f \pi dx = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} |\sigma^T \nabla f|^2 \pi dx \geq 0,$$

²²razvijanjem $\partial_i \partial_j (a^{ij} g \pi)$ po pravilu proizvoda i korišćenjem da simetrični deo, onaj sadržan u $\mathcal{L}^*\pi = 0$, nestaje.

²³Naziv potiče od Dirihleovog principa u teoriji potencijala, prema kome se rešenje Laplasove jednačine sa zadatim graničnim uslovom dobija minimizacijom energije $\int |\nabla f|^2 dx$. Forma (36) uopštava ovaj princip na proizvoljan reverzibilan difuzioni proces, sa a^{ij} umesto jedinične matrice i π umesto Lebegove mere.

pošto je $a = \sigma\sigma^T$ pozitivno semidefinitna. Veličina $\mathcal{E}(f, f)$ tumači se kao *energija* funkcije f u odnosu na proces: meri koliko brzo f varira, ponderisano intenzitetom difuzije a i stacionarnom raspodelom π . Ova interpretacija je u skladu sa opštom slikom iz Napomene 3.3: dok $\mathcal{L}f$ opisuje trenutnu promenu f duž procesa iz jedne tačke, $\mathcal{E}(f, f)$ agregira tu istu informaciju preko cele stacionarne raspodele, u jedan nenegativan broj.

Dirihleova forma daje prirodan alat za povezivanje difuzionih procesa sa brzinom konvergencije ka ravnoteži, i upravo kroz taj alat uspostavljamo prvu eksplicitnu vezu sa informacionom geometrijom iz Poglavlja 2. Neka ρ_t evoluira po Foker-Plank jednačini ka stacionarnoj raspodeli π , i posmatrajmo Dirihleovu energiju logaritma odnosa ρ_t i π ,

$$I(\rho_t \| \pi) := \mathcal{E}\left(\log \frac{\rho_t}{\pi}, \log \frac{\rho_t}{\pi}\right) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} a^{ij} \partial_i \log \frac{\rho_t}{\pi} \partial_j \log \frac{\rho_t}{\pi} \pi \, dx. \quad (37)$$

Veličina (37) naziva se *relativna Fišerova informacija* raspodele ρ_t u odnosu na π . Direktnim računom, korišćenjem Foker-Plank jednačine i parcijalne integracije analogne onoj iz odeljka 3.2, pokazuje se da $I(\rho_t)$ tačno opisuje trenutnu brzinu opadanja Kulbak-Lajblerove divergencije duž toka,

$$\frac{d}{dt} D_{KL}(\rho_t \| \pi) = -I(\rho_t). \quad (38)$$

Dokaz. Ograničimo se, radi jednostavnosti, na gradijentnu difuziju

$$dX_t = -\nabla V(X_t) dt + \sigma dW_t,$$

sa stacionarnom raspodelom $\pi \propto e^{-2V/\sigma^2}$, tj. $\nabla V = -\frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \pi$ ²⁴. Diferenciranjem $D_{KL}(\rho_t \| \pi) = \int \rho_t \log(\rho_t/\pi) dx$ po t , uz $\int \partial_t \rho_t dx = 0$ ²⁵,

$$\frac{d}{dt} D_{KL}(\rho_t \| \pi) = \int \partial_t \rho_t \log \frac{\rho_t}{\pi} dx.$$

Zamenom Foker-Plank jednačine $\partial_t \rho_t = \nabla \cdot (\rho_t \nabla V) + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \rho_t$ i parcijalnom integracijom oba člana,

$$\begin{aligned} \int \nabla \cdot (\rho_t \nabla V) \log \frac{\rho_t}{\pi} dx &= - \int \rho_t \nabla V \cdot \nabla \log \frac{\rho_t}{\pi} dx, \\ \frac{\sigma^2}{2} \int \Delta \rho_t \log \frac{\rho_t}{\pi} dx &= -\frac{\sigma^2}{2} \int \nabla \rho_t \cdot \nabla \log \frac{\rho_t}{\pi} dx = -\frac{\sigma^2}{2} \int \rho_t \nabla \log \rho_t \cdot \nabla \log \frac{\rho_t}{\pi} dx, \end{aligned}$$

gde smo u poslednjem koraku iskoristili $\nabla \rho_t = \rho_t \nabla \log \rho_t$. Sabiranjem oba člana,

$$\frac{d}{dt} D_{KL}(\rho_t \| \pi) = - \int \rho_t \left[\nabla V + \frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \rho_t \right] \cdot \nabla \log \frac{\rho_t}{\pi} dx.$$

Zamenom $\nabla V = -\frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \pi$, izraz u uglastoj zagradi postaje

$$-\frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \pi + \frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \rho_t = \frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \frac{\rho_t}{\pi},$$

pa je

$$\frac{d}{dt} D_{KL}(\rho_t \| \pi) = -\frac{\sigma^2}{2} \int \left| \nabla \log \frac{\rho_t}{\pi} \right|^2 \rho_t dx = -I(\rho_t),$$

prema definiciji (37) (za $a = \sigma^2 I$), čime je identitet (38) pokazan.

²⁴opšti slučaj sledi analognim, samo zapisno težim računom.

²⁵Iz $\int \rho_t dx = 1$ za sve t sledi, diferenciranjem po t pod znakom integrala, $\int \partial_t \rho_t dx = \frac{d}{dt} \int \rho_t dx = \frac{d}{dt}(1) = 0$.

Identitet (38), poznat kao formula disipacije entropije, pokazuje da relativna Fišerova informacija igra ulogu trenutne brzine kojom proces zaboravlja početni uslov i približava se stacionarnoj raspodeli. Sam identitet, međutim, ne daje eksplicitnu ocenu brzine konvergencije, pošto ne poredi $I(\rho_t)$ sa samom $D_{KL}(\rho_t||\pi)$.

Pošto je, prema pretpostavci reverzibilnosti, generator $\mathcal{L}$ samoadjungovan na $L^2(\pi)$, spektralna teorema garantuje da $\mathcal{L}$ ima realan, nepozitivan spektar.

Definicija 3.15. *Neka je $\mathcal{L}$ samoadjungovan na $L^2(\pi)$, sa diskretnim spektrom sopstvenih vrednosti $0 = \lambda_0 > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$, gde sopstvena vrednost $\lambda_0 = 0$ odgovara konstantnim funkcijama. Spektralni jaz generatora definiše se kao*

$$\text{gap} := \lambda_0 - \lambda_1 = -\lambda_1 > 0. \quad (39)$$

Spektralni jaz direktno kontroliše brzinu opadanja disperzije, preko klasične Poenkareove nejednakosti. Ako $f \in L^2(\pi)$ ima $\mathbb{E}_\pi[f] = 0$, razvojem po ortonormiranoj bazi sopstvenih funkcija $\{\varphi_k\}_{k \geq 0}$ generatora, $f = \sum_{k \geq 1} c_k \varphi_k$ (bez člana $k = 0$, jer je taj deo srazmeran $\mathbb{E}_\pi[f] = 0$), dobija se

$$\mathcal{E}(f, f) = -\langle \mathcal{L}f, f \rangle_\pi = \sum_{k \geq 1} (-\lambda_k) c_k^2 \geq \text{gap} \sum_{k \geq 1} c_k^2 = \text{gap} \cdot D_\pi(f),$$

odnosno

$$D_\pi(f) \leq \frac{1}{\text{gap}} \mathcal{E}(f, f). \quad (40)$$

Nejednakost (40), poznata kao Poenkareova nejednakost, pokazuje da spektralni jaz meri upravo ono što mu ime kaže: koliko brzo Dirihleova energija $\mathcal{E}(f, f)$ "kažnjava" odstupanje f od konstante, u odnosu na samu veličinu tog odstupanja.

Analogno poređenje za KL divergenciju, umesto za disperziju, pruža *logaritamska Soboljevljeva nejednakost*: za stacionarnu raspodelu π koja tu nejednakost zadovoljava, postoji konstanta $C > 0$ takva da za svaku raspodelu ρ važi

$$D_{KL}(\rho||\pi) \leq \frac{C}{2} I(\rho). \quad (41)$$

Kombinujući (38) i (41) i primenom Gronvalove nejednakosti, dobija se eksponencijalna konvergencija $D_{KL}(\rho_t||\pi) \leq e^{-2t/C} D_{KL}(\rho_0||\pi)$. Za razliku od Poenkareove nejednakosti (40), koja sledi direktno iz spektralne teoreme za proizvoljnu reverzibilnu meru, konstanta C u (41) u opštem slučaju nije jednaka $1/\text{gap}$, već zavisi i od dodatnih svojstava π (tzv. Bakri-Emerijev uslov zakrivljenosti, videti Bakry et al. [7]). Za Gausovu stacionarnu raspodelu ova dva broja se, međutim, poklapaju, $C = 1/\text{gap}$, što eksplicitno pokazujemo u odeljku 3.6 na primeru Ornštajn-Ulenbek procesa.

3.5 Girsanovljeva teorema

U prethodnim odeljcima posmatrali smo kako se generator i Foker-Plank jednačina menjaju kada se promeni koeficijent drifta b , dok je referentna mera na prostoru putanja, u smislu poistovećivanja procesa sa merom uvedenog u uvodu, ostajala implicitna. U ovom odeljku uvodimo alat koji tu vezu čini eksplicitnom: Girsanovljevu teoremu, koja opisuje kako se menja mera na prostoru putanja kada se promeni drift stohastičke diferencijalne jednačine, i daje eksplicitnu formulu za Kulbak-Lajblerovu divergenciju između dva ovakva procesa. Ovaj rezultat biće ključan tehnički preduslov za formulaciju Šredingerovog

problema mosta u Poglavlju 5, gde se most konstruiše upravo kao proces koji minimizuje ovakvu divergenciju u odnosu na zadati referentni proces.

Neka je $\Omega = C([0, T], \mathbb{R}^n)$, $\mathcal{F}$ odgovarajuća σ -algebra, i neka su P i Q dve verovatnosne mere na $(\Omega, \mathcal{F})$, pod kojima koordinatni proces X_t zadovoljava

$$dX_t = b(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t^P \quad \text{pod } P, \quad dX_t = \tilde{b}(X_t) dt + \sigma(X_t) dW_t^Q \quad \text{pod } Q,$$

sa istim difuzionim koeficijentom σ i istim početnim uslovom, ali različitim driftovima $b, \tilde{b}$. Girsanovljeva teorema daje uslove pod kojima su P i Q međusobno apsolutno neprekidne, i eksplicitnu formulu za njihov Radon-Nikodimov izvod.

Teorema 3.16 (Girsanov). *Neka je $u(x) := \sigma(x)^{-1}(\tilde{b}(x) - b(x))$, i neka u zadovoljava Novikovljev uslov*

$$\mathbb{E}_P \left[\exp \left(\frac{1}{2} \int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right) \right] < \infty.$$

Tada su P i Q međusobno apsolutno neprekidne na $\mathcal{F}_T$, sa Radon-Nikodimovim izvodom

$$\frac{dQ}{dP} = \exp \left(\int_0^T u(X_s) \cdot dW_s^P - \frac{1}{2} \int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right). \quad (42)$$

Dokaz, zasnovan na pokazivanju da je proces (42), posmatran kao proces u t , martingal pod P (za šta je Novikovljev uslov dovoljan), i primena Itove formule na taj proces, dat je u Øksendal [35, Poglavlje 8], videti i Eberle [15, Poglavlje 17] za opštitu formulaciju.

Posledica 3.17. *Pod uslovima prethodne teoreme, proces*

$$W_t^Q := W_t^P - \int_0^t u(X_s) ds \quad (43)$$

je standardno Braunovo kretanje pod Q .

Direktna posledica formule (42) jeste eksplicitan izraz za Kulbak-Lajblerovu divergenciju između dva procesa, ključan za formulaciju Šredingerovog problema mosta.

Posledica 3.18. *Pod uslovima prethodne teoreme,*

$$D_{KL}(Q\|P) = \mathbb{E}_Q \left[\log \frac{dQ}{dP} \right] = \mathbb{E}_Q \left[\frac{1}{2} \int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right]. \quad (44)$$

Dokaz. *Po definiciji KL divergencije za mere na $(\Omega, \mathcal{F}_T)$, $D_{KL}(Q\|P) = \mathbb{E}_Q \left[\log \frac{dQ}{dP} \right]$. Logaritmovanjem (42),*

$$\log \frac{dQ}{dP} = \int_0^T u(X_s) \cdot dW_s^P - \frac{1}{2} \int_0^T |u(X_s)|^2 ds,$$

pa je

$$D_{KL}(Q\|P) = \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T u(X_s) \cdot dW_s^P \right] - \frac{1}{2} \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right]. \quad (45)$$

Prvi član sadrži integral u odnosu na W^P , koji nije Braunovo kretanje pod Q , pa se njegovo očekivanje ne može direktno izračunati. Koristeći (43), $dW_s^P = dW_s^Q + u(X_s) ds$, gde je W^Q prema prethodnom korolaru Braunovo kretanje pod Q , pa je

$$\mathbb{E}_Q \left[\int_0^T u(X_s) \cdot dW_s^P \right] = \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T u(X_s) \cdot dW_s^Q \right] + \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right] = \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right],$$

gde prvi sabirak iščezava jer je $\int u \cdot dW^Q$ martingal pod Q (pod uslovom integrabilnosti u), sa očekivanjem nula. Zamenom u (45),

$$D_{KL}(Q\|P) = \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right] - \frac{1}{2} \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right] = \frac{1}{2} \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T |u(X_s)|^2 ds \right],$$

čime je (44) pokazano.

Formula (44) ima jasnu interpretaciju: Kulbak-Lajblerova divergencija između dva procesa sa istom difuzijom, ali različitim driftovima, jednaka je (polovini) očekivane, vremenski integrisane kvadratne razlike driftova, mereno u jedinicama difuzionog koeficijenta σ . Ovo je stohastički analogon toga koliko su "udaljena" dva vektorska polja b i $\tilde{b}$, ponderisano putanjom procesa Q . Upravo ova formula, primenjena na drift Braunovog kretanja kao referentni proces, definiše funkcional koji se minimizuje u statičkoj formulaciji Šredingerovog problema mosta.

3.6 Ornštajn-Ulenbek proces

Zaključujemo poglavlje detaljnom analizom jednog procesa koji objedinjuje sve pojmove uvedene ranije. Familija procesa koje ćemo posmatrati u ovom poglavlju zovu se Ornštajn-Ulenbek procesi.

Posmatramo proces

$$dX_t = -\theta X_t dt + \sigma dW_t, \quad \theta, \sigma > 0, \quad X_0 = x_0.$$

Primenimo Itovu formulu na funkciju $f(t, x) = e^{\theta t} x$. Pošto je f linearna po x , drugi izvod $\partial_x^2 f$ nestaje, pa je

$$d(e^{\theta t} X_t) = \theta e^{\theta t} X_t dt + e^{\theta t} dX_t.$$

Zamenom $dX_t = -\theta X_t dt + \sigma dW_t$, članovi sa $X_t dt$ se skrate, i preostaje

$$d(e^{\theta t} X_t) = \sigma e^{\theta t} dW_t.$$

Integracijom od 0 do t , uz $X_0 = x_0$, i deljenjem sa $e^{\theta t}$, dobija se eksplicitno rešenje

$$X_t = x_0 e^{-\theta t} + \sigma \int_0^t e^{-\theta(t-s)} dW_s, \quad (46)$$

odakle, pošto je Itov integral determinističke funkcije po dW_s Gausova slučajna promenljiva,

$$\mathbb{E}_{x_0}[X_t] = x_0 e^{-\theta t}, \quad D_{x_0}(X_t) = \frac{\sigma^2}{2\theta} (1 - e^{-2\theta t}). \quad (47)$$

Puštanjem $t \rightarrow \infty$, X_t konvergira u raspodeli ka $\pi = \mathcal{N}(0, \sigma^2/2\theta)$. Ovo je u skladu sa opštim oblikom stacionarne mere gradijentne difuzije, $\pi \propto e^{-2V/\sigma^2}$, uveden u odeljku 3.4, primenjenim na potencijal $V(x) = \theta x^2/2$ koji odgovara vektoru snošenja $b(x) = -\nabla V(x) = -\theta x$ Ornštajn-Ulenbekovog procesa: zaista, $e^{-2V/\sigma^2} = e^{-\theta x^2/\sigma^2} \propto \mathcal{N}(0, \sigma^2/2\theta)$.

Da bismo precizirali brzinu ove konvergencije, potreban nam je spektar generatora $\mathcal{L}f = -\theta x f' + \frac{\sigma^2}{2} f''$. Neka je $s^2 := \sigma^2/2\theta$ disperzija stacionarne raspodele. Sopstvene

funkcije $\mathcal{L}$, u odnosu na $L^2(\pi)$, su polinomi $f_k(x) = H_k(x/s)$, gde je H_k k -ti Hermitov polinom²⁶, sa sopstvenom vrednošću

$$\mathcal{L}f_k = -k\theta f_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (48)$$

Proverimo ovo direktno za $k = 0, 1, 2$. Za $k = 0$, $f_0 = 1$ je konstanta, $\mathcal{L}f_0 = 0$, u skladu sa $-0 \cdot \theta = 0$. Za $k = 1$, $f_1(x) = x$, $f'_1 = 1$ i $f''_1 = 0$, pa

$$\mathcal{L}f_1 = -\theta x \cdot 1 + \frac{\sigma^2}{2} \cdot 0 = -\theta x = -\theta f_1,$$

u skladu sa $-1 \cdot \theta$. Za $k = 2$, $f_2(x) = x^2 - s^2$: $f'_2 = 2x$, $f''_2 = 2$, pa

$$\mathcal{L}f_2 = -\theta x \cdot 2x + \frac{\sigma^2}{2} \cdot 2 = -2\theta x^2 + \sigma^2 = -2\theta \left(x^2 - \frac{\sigma^2}{2\theta}\right) = -2\theta f_2,$$

u skladu sa $-2 \cdot \theta$.

Prema (48), spektar generatora je $\{-k\theta : k = 0, 1, 2, \dots\}$, pa je, prema definiciji (39),

$$\text{gap} = \lambda_0 - \lambda_1 = 0 - (-\theta) = \theta. \quad (49)$$

Ovim precizno određujemo konstantu C iz logaritamske Soboljevljeve nejednakosti (41): za Gausovu stacionarnu raspodelu, $C = 1/\text{gap} = 1/\theta$, pa kombinovanjem (38) i (41),

$$D_{KL}(\rho_t \parallel \pi) \leq e^{-2\theta t} D_{KL}(\rho_0 \parallel \pi). \quad (50)$$

Veći parametar drift θ znači i veći spektralni jaz i bržu konvergenciju ka ravnoteži, u skladu sa intuicijom da jača sila vraćanja ka nuli brže zaboravlja početni uslov.

Za kraj, primenimo Girsanovljevu teoremu da izračunamo koliko je naš proces, kao mera na prostoru putanja, udaljen od Braunovog kretanja. Neka je P mera standardnog Braunovog kretanja ($b = 0$), a Q mera našeg procesa ($\tilde{b}(x) = -\theta x$), oba sa istim difuzionim koeficijentom σ i istim početnim uslovom $X_0 = x_0$. Ovde je $u(x) = \sigma^{-1}(\tilde{b}(x) - b(x)) = -\theta x/\sigma$, pa formula (44) daje

$$D_{KL}(Q \parallel P) = \frac{1}{2} \mathbb{E}_Q \left[\int_0^T \frac{\theta^2}{\sigma^2} X_s^2 ds \right] = \frac{\theta^2}{2\sigma^2} \int_0^T \mathbb{E}_Q[X_s^2] ds.$$

Iz (47), $\mathbb{E}_Q[X_s^2] = D_{x_0}(X_s) + (\mathbb{E}_{x_0}[X_s])^2 = x_0^2 e^{-2\theta s} + \frac{\sigma^2}{2\theta}(1 - e^{-2\theta s})$. Integracijom po s od 0 do T ,

$$\int_0^T \mathbb{E}_Q[X_s^2] ds = \frac{x_0^2}{2\theta}(1 - e^{-2\theta T}) + \frac{\sigma^2}{2\theta}T - \frac{\sigma^2}{4\theta^2}(1 - e^{-2\theta T}),$$

odakle, nakon množenja sa $\theta^2/2\sigma^2$ i sređivanja,

$$D_{KL}(Q \parallel P) = \frac{\theta T}{4} + \left(\frac{\theta x_0^2}{4\sigma^2} - \frac{1}{8} \right) (1 - e^{-2\theta T}).$$

Za $x_0 = 0$, proces kreće iz stacionarnog centra, pa se formula pojednostavljuje na $D_{KL}(Q \parallel P) = \frac{\theta T}{4} - \frac{1}{8}(1 - e^{-2\theta T})$. Divergencija raste linearno sa horizontom T , jer se razlika u skretanju akumulira kroz sve duže vreme, dok za $T \rightarrow 0$, kao što i treba, $D_{KL}(Q \parallel P) \rightarrow 0$.

²⁶U probabilističkoj normalizaciji, Hermitovi polinomi definišu se sa $H_k(y) = (-1)^k e^{y^2/2} \frac{d^k}{dy^k} e^{-y^2/2}$, i zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu $H_k''(y) - y H_k'(y) + k H_k(y) = 0$. Prvih nekoliko su $H_0 = 1$, $H_1(y) = y$, $H_2(y) = y^2 - 1$, $H_3(y) = y^3 - 3y$. Za opšti dokaz da su $f_k(x) = H_k(x/s)$ sopstvene funkcije OU generatora, videti Pavliotis [28, Poglavlje 4].

4 Optimalni transport

Nakon informacione geometrije i teorije difuzionih procesa, u ovom poglavlju uvodimo treći stub rada, teoriju optimalnog transporta. Za razliku od prethodna dva poglavlja, gde smo geometrijsku strukturu gradili polazeći od statistike, odnosno od stohastičkih procesa, ovde polazimo od naizgled sasvim praktičnog pitanja: kako na "najjeftiniji" mogući način premestiti jednu raspodelu u drugu. Pokazaćemo da je odgovor na ovo pitanje, uz odgovarajuću regularizaciju, direktno povezan sa Kulbak-Lajblerovom divergencijom iz Poglavlja 2, i da algoritam koji rešava regularizovani problem, Sinkhornov algoritam, nije ništa drugo do sistem naizmeničnih Bregmanovih projekcija. Kao osnovnu literaturu za ovo poglavlje koristimo Villani [33].

4.1 Monžov problem

Problem optimalnog transporta prvi je postavio francuski matematičar Gaspar Monž 1781. godine, u kontekstu inženjerskog zadatka: kako preraspodeliti zemlju iskopanu na jednom mestu na drugo mesto gde je potrebna za nasip, uz minimalan ukupan utrošeni rad. Iako je motivacija bila praktična, formulacija koju je Monž dao ostala je osnovni predmet proučavanja čitave oblasti do danas.

Neka su μ i ν verovatnosne mere na $\mathbb{R}^n$ (u Monžovom originalnom problemu, mere raspoređene mase pre i posle transporta), i neka je $c : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow [0, \infty]$ funkcija cene, gde $c(x, y)$ predstavlja cenu premeštanja jedne jedinice mase iz tačke x u tačku y . Najprirodniji izbor cene, koji ćemo koristiti kroz ceo rad osim kada je drugačije naglašeno, je kvadratna euklidska udaljenost, $c(x, y) = |x - y|^2$.

Definicija 4.1. Monžov problem *optimalnog transporta je problem nalaženja preslikavanja* $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ *koje minimizuje*

$$\inf_{T: T_{\#}\mu=\nu} \int_{\mathbb{R}^n} c(x, T(x)) d\mu(x), \quad (51)$$

gde je $T_{\#}\mu$ potisnuta (engl. pushforward) mera, definisana sa $T_{\#}\mu(A) := \mu(T^{-1}(A))$ za svaki Borelov skup A ²⁷.

Uslov $T_{\#}\mu = \nu$ znači da T zaista preslikava μ u ν , odnosno masa koja se nalazi u proizvoljnom skupu A pod raspodelom ν potiče tačno od mase koja se, pod μ , nalazila u $T^{-1}(A)$. Preslikavanje T pri tome je determinističko u smislu da se svakoj tački x pridružuje tačno jednu tačku $T(x)$, dakle sva masa u x mora u celini otići na isto odredište.

Upravo ovaj zahtev, da čitava masa iz svake tačke ide na jedno jedino odredište, čini Monžov problem u opštem slučaju nerešivim. Ilustrujmo ovo jednostavnim primerom.

Primer 4.2. Neka je $\mu = \delta_0$ Dirakova masa u nuli, i neka je

$$\nu = \frac{1}{2}\delta_{-1} + \frac{1}{2}\delta_1$$

mera koja polovinu mase stavlja u tačku -1 , a polovinu u tačku 1 . Za proizvoljno preslikavanje T , potisnuta mera $T_{\#}\delta_0 = \delta_{T(0)}$ je uvek Dirakova masa skoncentrisana u jednoj jednoj tački, $T(0)$, i ne postoji izbor $T(0)$ za koji bi $\delta_{T(0)}$ bilo jednako ν , koja ima masu raspoređenu na dva mesta. Skup dopustivih preslikavanja u (51) je prazan, i Monžov problem u ovom slučaju nema rešenje, štaviše, nije ni definisan.

²⁷Očigledno je da T mora da bude merljivo preslikavanje kako bi svaki skup oblika $T^{-1}(A)$ bio merljiv za merljive skupove A .

Problem iz primera nije izuzetak, već ukazuje na strukturnu manu same formulacije. Kad god je izvorna mera μ koncentrisana, dok je ciljna mera ν razućdenija od nje, deterministićko preslikavanje ne moųe da postoji, jer nijedna funkcija ne moųe jednu taćku da preslika u više taćaka istovremeno.

Ipak, pod dodatnim pretpostavkama na polaznu meru μ , Monųov problem ima reųenje, i to jedinstveno. Za kvadratnu cenu, $c(x, y) = |x - y|^2$, i pod uslovom da je μ apsolutno neprekidna u odnosu na Lebegovu meru, Brenier je 1987. godine pokazao da postoji jedinstveno optimalno preslikavanje T , i da je ono oblika $T = \nabla\varphi$ za neku konveksnu funkciju φ [8]. MekKan je 1995. godine ovaj rezultat uopųtio na znatno řiru klasu funkcija cene, van kvadratne [26]. Ovi rezultati pokazuju da problem iz gornjeg primera zaista potiće od atomske prirode μ : kada je izvorna raspodela dovoljno regularna, deterministićko reųenje postoji. Uprkos tome, u ovom radu oslanjamo se na opųtiju, uvek dobro definisanu formulaciju koju je predloųio Kantorović, kojoj posvećujemo naredni odeljak, jer ona ne zahteva nikakve pretpostavke na μ i ν , i prirodno se povezuje sa entropijskom regularizacijom i informacionom geometrijom.

4.2 Kantorovićeva relaksacija

Reųenje problema iz prethodnog odeljka dao je sovjetski matematićar i ekonomista Leonid Kantorović 1942. godine²⁸ [21]. Umesto da traųi deterministićko preslikavanje, Kantorović je predloųio da se transport opiųe merom na proizvodnom prostoru, koja dozvoljava da se masa iz jedne taćke razdeli izmeću više odrediųta.

Definicija 4.3. *Neka su $\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ i $\nu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$ verovatnosne mere. Kuplovanje mera μ i ν je verovatnosna mera π na $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ takva da su njene marginalne raspodele redom jednake μ i ν , tj.*

$$\pi(A \times \mathbb{R}^n) = \mu(A), \quad \pi(\mathbb{R}^n \times B) = \nu(B),$$

za sve Borelove skupove $A, B \subset \mathbb{R}^n$. Skup svih kuplovanja μ i ν oznaćavamo sa $\Pi(\mu, \nu)$.

Kuplovanje $\pi(dx, dy)$ tumaćimo kao kolićinu mase koja se premeųta iz okoline taćke x u okolinu taćke y : uslov marginala obezbećuje da je sva masa polazne raspodele μ rasporećena (sabiranjem po svim mogućim odrediųtima y), i da se, sabiranjem po svim mogućim polaziųtima x , dobija taćno ciljna raspodela ν . Za razliku od Monųovog preslikavanja, kuplovanje dozvoljava da se ista taćka x pojavljuje uparena sa više razlićitih y , ćime se masa iz x zaista moųe podeliti.

Definicija 4.4. Kantorovićev problem *optimalnog transporta je problem*

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} c(x, y) d\pi(x, y). \quad (52)$$

Skup $\Pi(\mu, \nu)$ nikada nije prazan²⁹, jer sadrųi bar nezavisno kuplovanje $\mu \otimes \nu$, definisano sa $(\mu \otimes \nu)(A \times B) = \mu(A)\nu(B)$, pa problem (52) uvek ima smisla, za razliku od Monųovog problema iz prethodnog odeljka. Osim toga, $\Pi(\mu, \nu)$ je konveksan skup (linearna

²⁸Kantorović je 1975. godine, dobio Nobelovu nagradu iz ekonomije, za doprinose teoriji optimalne alokacije resursa, ćiji je matematićki temelj upravo teorija optimalnog transporta koju je razvio.

²⁹Nepraznost skupa $\Pi(\mu, \nu)$ oslanja se suųtinski na to da μ i ν imaju istu, jedinićnu ukupnu masu, poųto su obe verovatnosne mere. U opųtijim, primenjenim verzijama problema, gde μ, ν mogu imati razlićitu ukupnu masu (na primer, kada predstavljaju resurse razlićite ukupne kolićine), transport zahteva i mogućnost stvaranja ili uniųtavanja mase, řto dovodi do teorije tzv. nebalansiranog optimalnog transporta, koju u ovom radu ne razmatramo.

kombinacija dva kuplovanja je opet kuplovanje, jer su uslovi marginala linearni), i, pod odgovarajućim uslovima na μ, ν , slabo kompaktan, čime se egzistencija minimuma u (52) dobija direktno iz osnovnih rezultata varijacionog računa, bez dodatnih pretpostavki koje je zahtevao Monžov problem.

Primer 4.5. U primeru sa $\mu = \delta_0$ i $\nu = \frac{1}{2}\delta_{-1} + \frac{1}{2}\delta_1$, dopustivo kuplovanje je

$$\pi = \frac{1}{2}\delta_{(0,-1)} + \frac{1}{2}\delta_{(0,1)},$$

koje polovinu mase iz 0 šalje u -1 , a polovinu u 1 . Marginala se lako proveravaju, $\pi(\{0\} \times \mathbb{R}) = 1 = \mu(\{0\})$, dok je $\pi(\mathbb{R} \times \{-1\}) = \frac{1}{2} = \nu(\{-1\})$ i analogno za $\{1\}$. Za cenu $c(x, y) = |x - y|^2$, vrednost ovog kuplovanja u (52) je $\frac{1}{2} \cdot 1 + \frac{1}{2} \cdot 1 = 1$, i može se pokazati da je ovo, u ovom jednostavnom primeru, i optimalna vrednost.

Vredi primetiti da je svako Monžovo preslikavanje T posebno kuplovanje, mera $\pi_T := (\text{id} \times T)_\# \mu$, definisana sa $\pi_T(A \times B) = \mu(A \cap T^{-1}(B))$, pripada $\Pi(\mu, \nu)$ kad god je $T_\# \mu = \nu$, i za nju je $\int c d\pi_T = \int c(x, T(x)) d\mu(x)$, tj. vrednost Kantorovičevog funkcionala na π_T jednaka je vrednosti Monžovog funkcionala na T . Prema tome,

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int c d\pi \leq \inf_{T: T_\# \mu = \nu} \int c(x, T(x)) d\mu(x),$$

pa je Kantorovičev problem (52) zaista relaksacija Monžovog (svaki Monžov transport je poseban slučaj kuplovanja, dok obrnuto ne mora da važi, kao što pokazuje prethodni primer, gde optimalno kuplovanje nije Monžovog oblika). Sa druge strane, upravo rezultati Breniera i MekKana iz prethodnog odeljka pokazuju da, kada je μ apsolutno neprekidna, optimalno kuplovanje u (52) jeste Monžovog oblika, tj. koncentrisano na grafik nekog preslikavanja T , čime se dva problema, u tom slučaju, poklapaju.

Pored primarnog problema (52), formulisanog kao minimizacija po kuplovanjima, Kantorovič je pokazao da se isti problem može zapisati i na dualan način, kao maksimizacija po parovima funkcija umesto po merama na proizvodnom prostoru. Ovoj dualnoj formulaciji, i njenoj vezi sa e-projekcijama i m-projekcijama iz Poglavlja 2, posvećujemo naredni odeljak.

4.3 Kantorovičeva dualnost

Kantorovičev problem (52) je linearni funkcional koji se minimizuje nad konveksnim skupom $\Pi(\mu, \nu)$, zadatim linearnim ograničenjima (uslovima marginala). Ovakva struktura, linearna optimizacija nad konveksnim skupom, uvek dopušta dualnu formulaciju, koja u ovom slučaju ima znatno pogodniji oblik. Umesto optimizacije po merama na proizvodnom prostoru $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$, dualni problem optimizuje po paru funkcija na $\mathbb{R}^n$.

Definicija 4.6. Par funkcija (f, g) , $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$, naziva se dopustiv za funkciju cene c ako

$$f(x) + g(y) \leq c(x, y) \quad \text{za sve } x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Kantorovičev dualni problem je

$$\sup_{(f, g) \text{ dopustiv}} \int_{\mathbb{R}^n} f d\mu + \int_{\mathbb{R}^n} g d\nu. \quad (53)$$

Funkcije f, g nazivaju se *Kantorovičevi potencijali*.

Napomena 4.7. Ograničenje dopustivosti dobija prirodnu ekonomsku interpretaciju kroz primer koji navodi Villani [33, Poglavlje 1]. Zamislimo proizvođača koji robu izrađuje na lokaciji x , a prodaje na lokaciji y , pri čemu je $c(x, y)$ cena prevoza robe od x do y . Minimizacija ukupnog troška prevoza za celu proizvodnju odgovara upravo Kantorovičevom problemu (52). Pretpostavimo sada da se proizvođač ne želi baviti prevozom, već unajmljuje prevozničku firmu. Firma mu nudi da otkupi robu na svakoj lokaciji x po ceni $f(x)$, preveze je, i preproda mu je nazad na lokaciji y po ceni $g(y)$. Proizvođač će pristati na ovakav dogovor jedino ako mu se finansijski isplati, odnosno ako je $g(y) - f(x) \leq c(x, y)$ za sve x, y : u suprotnom bi mu bilo jeftinije da sam organizuje prevoz. Uz ovo ograničenje, prevoznička firma teži da maksimizuje sopstveni profit,

$$\int_{\mathbb{R}^n} g \, d\nu - \int_{\mathbb{R}^n} f \, d\mu,$$

što je, do na promenu oznake $f \mapsto -f$, tačno dualni problem (53). Gledište proizvođača, koji vodi računa o ukupnom trošku, odgovara rešavanju primarnog problema; gledište prevozničke firme, koja vodi računa o profitu, odgovara rešavanju dualnog problema.

Tvrđenje 4.8 (Slaba dualnost). Za svako dopustivo kuplovanje $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ i svaki dopustiv par (f, g) ,

$$\int f \, d\mu + \int g \, d\nu \leq \int c \, d\pi.$$

Posebno, vrednost dualnog problema (53) ne prevazilazi vrednost primarnog problema (52).

Dokaz. Pošto π ima marginale μ, ν ,

$$\int f \, d\mu + \int g \, d\nu = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} (f(x) + g(y)) \, d\pi(x, y) \leq \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} c(x, y) \, d\pi(x, y),$$

gde smo u prvom koraku iskoristili definiciju marginala primenjenu na funkcije $f(x)$ i $g(y)$ posebno, a u drugom uslov dopustivosti $f(x) + g(y) \leq c(x, y)$. Kako ovo važi za proizvoljno dopustivo π , sledi tvrđenje.

Netrivijalan, i znatno dublji rezultat jeste da, pod uslovima regularnosti, ova nejednakost postaje jednakost.

Teorema 4.9 (Kantorovičeva dualnost). Neka je c neprekidna funkcija, i neka μ, ν imaju konačne momente reda koji odgovara rastu c (za $c(x, y) = |x - y|^2$, dovoljno je da imaju konačan drugi moment). Tada je

$$\min_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int c \, d\pi = \sup_{(f, g) \text{ dopustiv}} \int f \, d\mu + \int g \, d\nu, \quad (54)$$

i supremum u (53) se dostiže.

Dokaz. Ideja dokaza oslanja se na to da se primarni problem (52) zapiše kao konveksan problem u odgovarajućem Banahovom prostoru mera, gde je funkcional cilja linearan, a ograničenja (pripadnost skupu $\Pi(\mu, \nu)$) zadata linearnim jednakostima. Primenom teoreme o minimumu, odnosno Fenchel-Rokafelarove teoreme o dualnosti za konveksnu optimizaciju u beskonačnoj dimenziji, pokazuje se da razlika između primarnog minimuma i dualnog supremuma nestaje, pod uslovom da je funkcional cilja poluneprekidan odozdo u odgovarajućoj (slabo) topologiji, što neprekidnost c i uslovi na momente μ, ν obezbeđuju. Egzistencija maksimizatora u (53) sledi iz kompaktnosti odgovarajućeg skupa dopustivih potencijala, nakon normalizacije. Potpun dokaz dat je u Villani [33, Poglavlje 1, Teorema 1.3].

Na optimumu, potencijali f i g nisu nezavisni, već se jedan iz drugog dobijaju operacijom analognom Ležandrovoj transformaciji iz Poglavlja 2, prilagođenoj funkciji cene c umesto standardnog skalarnog proizvoda.

Definicija 4.10. Za funkciju $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$, c -transformacija f je funkcija

$$f^c(y) := \inf_{x \in \mathbb{R}^n} [c(x, y) - f(x)]. \quad (55)$$

Napomena 4.11. Primetimo sličnost između c -transformacije i Ležandrovog duala iz Poglavlja 2. Za $c(x, y) = -\langle x, y \rangle$, c -transformacija (55) svodi se, do na predznak, tačno na standardnu Ležandrovu transformaciju, $f^c(y) = -\sup_x [\langle x, y \rangle + f(x)]$. Za kvadratnu cenu $c(x, y) = |x - y|^2$, koju koristimo kroz ceo rad, veza je i dalje eksplicitna: pišući $c(x, y) = |x|^2 - 2\langle x, y \rangle + |y|^2$ i uvodeći $h(x) := |x|^2 - f(x)$, dobija se $f^c(y) = |y|^2 - \sup_x [2\langle x, y \rangle - h(x)]$, gde je izraz pod supremumom, do na faktor 2, standardna Ležandrova transformacija funkcije h . c -transformacija je, dakle, strogo uopštenje Ležandrove transformacije, u kome ulogu linearne potporne funkcije $\langle x, y \rangle$ preuzima proizvoljna funkcija cene $c(x, y)$, potpuno analogno tome kako je Bregmanova divergencija u Poglavlju 2 uopštila kvadrat euklidskog rastojanja zamenom kvadratnog potencijala proizvoljnom konveksnom funkcijom ψ .

Tvrđenje 4.12. Neka je (f, g) optimalno rešenje dualnog problema (53). Tada je $g = f^c$ i $f = g^c$ (gde je $g^c(x) := \inf_y [c(x, y) - g(y)]$, definisano analogno).

Dokaz. Iz dopustivosti para (f, g) , za svako fiksno y i svako x važi $g(y) \leq c(x, y) - f(x)$, odakle, uzimajući infimum po x , sledi $g(y) \leq f^c(y)$ za sve y . Pretpostavimo da je ova nejednakost stroga na skupu pozitivne mere ν . Tada bi par (f, f^c) takođe bio dopustiv (jer f^c po samoj definiciji (55) zadovoljava $f(x) + f^c(y) \leq c(x, y)$ za sve x, y), i imao bi strogo veću vrednost dualnog funkcionala od (f, g) , jer $\int f^c d\nu > \int g d\nu$ dok je $\int f d\mu$ nepromenjeno, u suprotnosti sa optimalnošću para (f, g) . Dakle $g = f^c$ svuda na nosaču ν , a analogan argument, zamenom uloga, daje $f = g^c$.

Ova osobina znači da je dovoljno tražiti optimum po jednoj funkciji, recimo f , jer druga, $g = f^c$, sledi automatski. Primetili smo direktnu analogiju sa Ležandrovim dualom 4.11. Ovu analogiju, u znatno konkretnijem obliku, ponovo srećemo u narednom odeljku, kada uvedemo entropijsku regularizaciju problema (52) i pokazujemo da tamo Kantorovičevi potencijali dobijaju eksplicitnu, zatvorenu formu preko Sinkhornovih iteracija.

Primer 4.13. Rešimo eksplicitno primarni i dualni problem za $\mu = \frac{1}{2}\delta_0 + \frac{1}{2}\delta_3$, $\nu = \frac{1}{2}\delta_1 + \frac{1}{2}\delta_2$, $c(x, y) = (x - y)^2$. Pošto je funkcional cilja linearan po π , a skup dopustivih kuplovanja u ovom slučaju konveksni omotač dve permutacione matrice, optimum se dostiže u jednoj od njih; dovoljno je uporediti dve mogućnosti:

$$0 \rightarrow 1, 3 \rightarrow 2 : \quad \frac{1}{2}(0-1)^2 + \frac{1}{2}(3-2)^2 = 1, \quad 0 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 1 : \quad \frac{1}{2}(0-2)^2 + \frac{1}{2}(3-1)^2 = 4.$$

Optimalno kuplovanje je stoga $\pi^* = \frac{1}{2}\delta_{(0,1)} + \frac{1}{2}\delta_{(3,2)}$, sa vrednošću primarnog problema jednakom 1.

Da bismo našli odgovarajuće Kantorovičeve potencijale, koristimo da na nosaču optimalnog kuplovanja ograničenje dopustivosti mora biti dostignuto sa jednakošću:

$$f(0) + g(1) = c(0, 1) = 1, \quad f(3) + g(2) = c(3, 2) = 1.$$

Pošto su potencijali određeni do na aditivnu konstantu, normalizujemo $f(0) = f(3) = 0$, odakle $g(1) = g(2) = 1$. Na preostalim, neuparenim parovima, dopustivost se lako proverava:

$$f(0) + g(2) = 1 \leq c(0, 2) = 4, \quad f(3) + g(1) = 1 \leq c(3, 1) = 4,$$

pa je par (f, g) zaista dopustiv svuda. Vrednost dualnog funkcionala,

$$\int f d\mu + \int g d\nu = \frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot 1 + \frac{1}{2} \cdot 1 = 1,$$

poklapa se sa vrednošću primarnog problema, u skladu sa teoremom jake dualnosti. Konačno, proverimo da je g zaista c -transformacija od f :

$$f^c(1) = \min \left\{ (0 - 1)^2 - f(0), (3 - 1)^2 - f(3) \right\} = \min\{1, 4\} = 1 = g(1),$$

$$f^c(2) = \min \left\{ (0 - 2)^2 - f(0), (3 - 2)^2 - f(3) \right\} = \min\{4, 1\} = 1 = g(2),$$

u skladu sa tvrdnjem o c -transformaciji.

4.4 Vaserštajn rastojanje

Vrednost Kantorovičevog problema (52), za konkretan izbor cene $c(x, y) = |x - y|^p$, definiše funkciju dve mere koja, kao što ćemo pokazati, ima sva svojstva rastojanja. Ova funkcija, Vaserštajn rastojanje, ne samo da nam daje način da uporedimo dve konkretne mere, već čitav prostor mera pretvara u metrički prostor, na kome ćemo u Poglavlju 5 razviti geometriju analognu onoj iz Poglavlja 2.

Definicija 4.14. Neka je $p \geq 1$ i neka je

$$\mathcal{P}_p(\mathbb{R}^n) := \left\{ \mu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) : \int_{\mathbb{R}^n} |x|^p d\mu(x) < \infty \right\}$$

skup verovatnosnih mera sa konačnim p -tim momentom³⁰. Za $\mu, \nu \in \mathcal{P}_p(\mathbb{R}^n)$, Vaserštajn- p rastojanje definiše se kao

$$W_p(\mu, \nu) := \left(\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x - y|^p d\pi(x, y) \right)^{1/p}. \quad (56)$$

Kroz ceo rad, kada pišemo W bez indeksa, podrazumevamo $p = 2$,³¹ koji nam je od posebnog interesa zbog veze sa Oto kalkulusom u Poglavlju 5. Egzistencija infimuma u (56), i njegova konačnost za $\mu, \nu \in \mathcal{P}_p(\mathbb{R}^n)$, sledi direktno iz opštih rezultata odeljka 4.2 primenjenih na cenu $c(x, y) = |x - y|^p$.

Teorema 4.15. Funkcija W_p je metrika na $\mathcal{P}_p(\mathbb{R}^n)$.

Dokaz. Simetričnost je očigledna, jer je uslov $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ simetričan u zameni uloga μ i ν , a cena $|x - y|^p$ je simetrična. Pozitivnost, $W_p(\mu, \nu) \geq 0$, sledi iz nenegativnosti cene. Ako je $\mu = \nu$, dijagonalno kuplovanje $\pi = (\text{id}, \text{id})_{\#} \mu$ daje $W_p(\mu, \mu) = 0$; obrnuto, ako je $W_p(\mu, \nu) = 0$, može se pokazati da optimalno kuplovanje mora biti skoncentrisano na dijagonalu $\{x = y\}$, odakle sledi $\mu = \nu$.

Preostaje nejednakost trougla, $W_p(\mu, \lambda) \leq W_p(\mu, \nu) + W_p(\nu, \lambda)$, za koju je potrebna sledeća pomoćna tvrdnja.

³⁰U delu literature, posebno onoj bliskoj klasičnoj teoriji verovatnoće, prostor $\mathcal{P}_p(\mathbb{R}^n)$ se ne izdvaja posebnom oznakom, već se mere sa konačnim p -tim momentom poistovećuju sa odgovarajućim slučajnim promenljivama iz prostora L^p .

³¹Razlog da se oslanjamo samo na $p = 2$ biće nam jasan skroz tek u sledećem poglavlju ali ukratko, samo za $p = 2$ prostor $(\mathcal{P}_p(\mathbb{R}^n), W_p)$ dopušta (formalnu) Rimanovu strukturu, jer se tangentni vektori u tački μ mogu identifikovati sa gradijentima $\nabla \varphi$ glatkih funkcija, u odnosu na $L^2(\mu)$ skalarni proizvod, $\langle \nabla \varphi_1, \nabla \varphi_2 \rangle_\mu = \int \nabla \varphi_1 \cdot \nabla \varphi_2 d\mu$. Za $p \neq 2$ ovakva identifikacija ne postoji na isti prirodan način, pa Oto kalkulus, kojim ćemo kasnije $(\mathcal{P}_2, W_2)$ tretirati kao beskonačnodimenzionu Rimanovu mnogostrukost, radi isključivo za $p = 2$. Ovo opravdava zašto se, od ovog mesta nadalje, fokusiramo isključivo na W_2 .

Lema 4.16 (Lema o lepljenju). *Neka su $\pi_{12} \in \Pi(\mu, \nu)$ i $\pi_{23} \in \Pi(\nu, \lambda)$ kuplovanja. Tada postoji mera γ na $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ čije su projekcije na parove koordinata (x, y) i (y, z) redom jednake π_{12} i π_{23} .*

Konstrukcija γ oslanja se na teoremu o dezintegraciji mere: obe mere π_{12}, π_{23} imaju istu marginalu ν po drugoj koordinati, pa se mogu zapisati preko uslovnih raspodela u odnosu na tu zajedničku koordinatu, $\pi_{12}(dx, dy) = \mu(dx)K_{12}(x, dy)$ i $\pi_{23}(dy, dz) = \nu(dy)K_{23}(y, dz)$; mera γ se tada konstruiše "lepljenjem" ovih uslovnih raspodela duž zajedničke y -koordinate. Projekcija γ na (x, z) koordinate daje kuplovanje $\pi_{13} \in \Pi(\mu, \lambda)$, za koje, primenom Minkovskog nejednakosti u $L^p(\gamma)$,

$$\begin{aligned} \left(\int |x - z|^p d\pi_{13} \right)^{1/p} &= \left(\int |x - z|^p d\gamma \right)^{1/p} \leq \left(\int |x - y|^p d\gamma \right)^{1/p} + \left(\int |y - z|^p d\gamma \right)^{1/p} = \\ &= W_p(\mu, \nu) + W_p(\nu, \lambda). \end{aligned}$$

Kako je π_{13} samo jedno, ne nužno optimalno, kuplovanje μ i λ , $W_p(\mu, \lambda) \leq \int |x - z|^p d\pi_{13}^{1/p}$, čime je nejednakost trougla pokazana. Potpun dokaz dat je u Villani [33, Poglavlje 6].

Teorema 4.17. *Neka su $\mu, \mu_1, \mu_2, \dots \in \mathcal{P}_p(\mathbb{R}^n)$. Tada*

$$W_p(\mu_n, \mu) \rightarrow 0 \iff \mu_n \rightarrow \mu \text{ Slabo i } \int |x|^p d\mu_n(x) \rightarrow \int |x|^p d\mu(x).$$

Dokaz. *Smer ($\Rightarrow$): iz $W_p(\mu_n, \mu) \rightarrow 0$ sledi slaba konvergencija direktno, jer konvergencija u W_p metriki uvek povlači slabu konvergenciju (opštiji rezultat, koji ne zahteva ograničenje na $\mathcal{P}_p$); konvergencija p -tih momenata sledi iz nejednakosti trougla za W_p primenjene na cenu $|x|^p$, uz nejednakost Minkovskog. Smer ($\Leftarrow$) je dublji, i pokazuje se konstrukcijom eksplicitnog kuplovanja preko teoreme o Skorohodovoj reprezentaciji, kombinovane sa uniformnom integrabilnošću koju obezbeđuje konvergencija momenata. Potpun dokaz dat je u Villani [34, Teorema 6.9].*

Napomena 4.18. *Vredi istaći suštinsku topološku razliku između Vaserštajn rastojanja i KL divergencije iz Poglavlja 2. W_p je geometrijski pojam rastojanja, osetljiv na to koliko su tačke nosača dve mere prostorno udaljene, dok je D_{KL} informacioni pojam, potpuno neosetljiv na geometriju osnovnog prostora $\mathbb{R}^n$. Ova razlika postaje očigledna na jednostavnom primeru: za $x_0 \neq 0$,*

$$W_p(\delta_0, \delta_{x_0}) = |x_0| \xrightarrow{x_0 \rightarrow 0} 0, \quad D_{KL}(\delta_0 \| \delta_{x_0}) = \infty \quad \text{za sve } x_0 \neq 0,$$

pošto δ_0 nije apsolutno neprekidna u odnosu na δ_{x_0} ni za jedno $x_0 \neq 0$ (u skladu sa napomenom o apsolutnoj neprekidnosti iz odeljka 3.5), pa je D_{KL} beskonačna bez obzira koliko su 0 i x_0 bliski, dok W_p neprekidno opada ka nuli kako se x_0 približava 0. Ove dve, suštinski različite geometrije na istom prostoru mera, jedan od centralnih motiva ovog rada, precizno se povezuju u Poglavlju 5, gde entropijska regularizacija Kantorovičevog problema pokazuje kako se transportna i informaciona geometrija stapaju u jedinstvenu strukturu.

4.5 Entropijska regularizacija

Kantorovičev problem (52) je, kao što smo videli, problem linearne minimizacije nad konveksnim skupom $\Pi(\mu, \nu)$. Ova linearnost, iako obezbeđuje egzistenciju rešenja, ima i

praktičnu manu: rešenje linearnog programa po pravilu leži u temenu dopustivog skupa, kao u 4.13, gde je optimalno kuplovanje odgovaralo upravo temenu $\Pi(\mu, \nu)$. Zato je optimalno kuplovanje tipično skoncentrisano na skup male, često nulte, Lebegove mere, što otežava numeričko računanje i čini rešenje osetljivim na male promene podataka.

Kantorovičev problem se čini prirodnim za regularizaciju dodavanjem kaznenog člana koji nagrađuje "razuđenija" kuplovanja. Prirodan izbor takvog člana, kao što ćemo videti, direktno nas vraća u informacionu geometriju iz Poglavlja 2.

Definicija 4.19. *Neka je $\varepsilon > 0$. Entropijski regularizovan Kantorovičev problem je*

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} c(x, y) d\pi(x, y) + \varepsilon D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu), \quad (57)$$

gde je $\mu \otimes \nu$ nezavisno kuplovanje, definisano u odeljku 4.2, a D_{KL} KL divergencija iz Poglavlja 2, primenjena na mere na $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$.

Regularizacioni član $D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu)$ meri koliko se kuplovanje π statistički razlikuje od nezavisnog kuplovanja, koje odgovara transportu bez ikakve korelacije između izvora i odredišta. Kazna je, dakle, najmanja upravo za $\pi = \mu \otimes \nu$ (gde je $D_{KL} = 0$), a raste što je π "koncentrisanije", odnosno bliže determinističkom (Monžovom) transportu. Parametar ε kontroliše jačinu kazne³².

Primer 4.20 (Entropijski regularizovan transport između Gausovih raspodela). *Rešimo problem (57) za jednodimenzione Gausove marginale $\mu = \mathcal{N}(m_1, \sigma_1^2)$, $\nu = \mathcal{N}(m_2, \sigma_2^2)$, kvadratnu cenu $c(x, y) = (x - y)^2$, i $\varepsilon = 1$. Poznato je i netrivialno (videti Mallasto et al. [25], gde je rezultat izveden i za opšti, višedimenzioni slučaj) da je optimalno kuplovanje π_ε između Gausovih marginala i samo Gausova raspodela na $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$, sa sredinom (m_1, m_2) i kovarijacionom matricom*

$$\Sigma_\pi = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \rho\sigma_1\sigma_2 \\ \rho\sigma_1\sigma_2 & \sigma_2^2 \end{pmatrix},$$

gde je koeficijent korelacije $\rho \in (-1, 1)$ jedina nepoznata, pošto su marginalne varijanse već fiksirane uslovom $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$.

Koristeći identitet

$$D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu) = -H(\pi) + H(\mu) + H(\nu),$$

pošto su $H(\mu), H(\nu)$ fiksirani (ne zavise od ρ), minimizacija (57) po ρ svodi se na minimizaciju $\int c d\pi - \varepsilon H(\pi)$. Za dvodimenzionu Gausovu raspodelu, $H(\pi) = \frac{1}{2} \log((2\pi e)^2 \det \Sigma_\pi)$ sa $\det \Sigma_\pi = \sigma_1^2 \sigma_2^2 (1 - \rho^2)$, dok je $\int c d\pi = \mathbb{E}_\pi[(X - Y)^2] = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 - 2\rho\sigma_1\sigma_2 + (m_1 - m_2)^2$. Odbacujući članove nezavisne od ρ , tražimo

$$\rho^* = \arg \min_{\rho \in (-1, 1)} \left[-2\rho\sigma_1\sigma_2 - \frac{\varepsilon}{2} \log(1 - \rho^2) \right].$$

Izjednačavanjem izvoda po ρ sa nulom,

$$-2\sigma_1\sigma_2 + \frac{\varepsilon\rho}{1 - \rho^2} = 0 \implies 2\sigma_1\sigma_2\rho^2 + \varepsilon\rho - 2\sigma_1\sigma_2 = 0,$$

³²kada $\varepsilon \rightarrow 0$, regularizacioni član gubi uticaj i (57) teži originalnom Kantorovičevom problemu (52), dok za veliko ε rešenje teži nezavisnom kuplovanju $\mu \otimes \nu$, nezavisno od cene c .

odakle, uzimajući koren koji daje $\rho \in (-1, 1)$,

$$\rho_\varepsilon = \frac{-\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 16\sigma_1^2\sigma_2^2}}{4\sigma_1\sigma_2}. \quad (58)$$

Za $\varepsilon = 1$,

$$\rho_1 = \frac{-1 + \sqrt{1 + 16\sigma_1^2\sigma_2^2}}{4\sigma_1\sigma_2}.$$

Proverimo granične slučajeve formule (58). Kada $\varepsilon \rightarrow 0$, $\rho_\varepsilon \rightarrow 1$, potpuna korelacija, u skladu sa tim da neregularizovano rešenje mora biti determinističko, Brenierovo preslikavanje $T(x) = m_2 + \frac{\sigma_2}{\sigma_1}(x - m_1)$. Kada $\varepsilon \rightarrow \infty$, razvojem korena, $\rho_\varepsilon \rightarrow 0$, nulta korelacija, u skladu sa tim da rešenje teži nezavisnom kuplovanju $\mu \otimes \nu$.

Pod uslovom da je $\mu \otimes \nu$ apsolutno neprekidna mera (u odnosu na Lebegovu meru) na $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ (što važi kad god su μ, ν apsolutno neprekidne), $D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu)$ je konačna samo za π koje su i same apsolutno neprekidne, sa gustinom $\pi(x, y)$ u odnosu na $\mu \otimes \nu$. Pišući $D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu) = \int \pi \log \frac{\pi}{\mu \otimes \nu} d(x, y)$ (zloupotrebljavajući oznaku, koristeći π i za meru i za njenu gustinu), problem (57) postaje

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int c d\pi + \varepsilon \int \pi \log \frac{\pi}{\mu \otimes \nu} d(x, y).$$

Uvodeći Gibsovo jezgro

$$K(x, y) := \exp \left(-\frac{c(x, y)}{\varepsilon} \right), \quad (59)$$

funkcional cilja u (57) može se, do na aditivnu konstantu nezavisnu od π , zapisati kao Bregmanova divergencija.

Neka je

$$Z := \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} K(x, y) d(\mu \otimes \nu)(x, y), \quad (60)$$

i neka je R verovatnosna mera na $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ sa gustinom K/Z u odnosu na $\mu \otimes \nu$, tj.

$$R(dx, dy) := \frac{K(x, y)}{Z} (\mu \otimes \nu)(dx, dy). \quad (61)$$

Tvrđenje 4.21. Funkcional cilja u (57) zadovoljava

$$\int c d\pi + \varepsilon D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu) = \varepsilon D_{KL}(\pi \| R) - \varepsilon \log Z. \quad (62)$$

Dokaz. Direktnim računom, koristeći (61),

$$\begin{aligned} D_{KL}(\pi \| R) &= \int \pi \log \frac{\pi}{R} d(x, y) = \int \pi \log \frac{\pi \cdot Z}{K \cdot (\mu \otimes \nu)} d(x, y) = \\ &= \int \pi \log \frac{\pi}{\mu \otimes \nu} d(x, y) - \int \pi \log K d(x, y) + \log Z \int \pi d(x, y). \end{aligned}$$

Prvi član je, po definiciji, $D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu)$. Za drugi, iz (59), $\log K = -c/\varepsilon$, pa je $-\int \pi \log K d(x, y) = \frac{1}{\varepsilon} \int c d\pi$. Treći član je prosto $\log Z$, pošto je π verovatnosna mera. Sastavljajući,

$$D_{KL}(\pi \| R) = D_{KL}(\pi \| \mu \otimes \nu) + \frac{1}{\varepsilon} \int c d\pi + \log Z.$$

Množenjem sa ε i preuređivanjem, dobija se (62).

Tvrđenje pokazuje da je entropijski regularizovan problem (57), do na konstantu $\varepsilon \log Z$ koja ne zavisi od π , ekvivalentan *projekciji* referentne mere R na skup $\Pi(\mu, \nu)$, u smislu KL divergencije:

$$\inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} D_{KL}(\pi \parallel R). \quad (63)$$

Ovo je e-projekcija u smislu 2, odnosno tražimo element skupa $\Pi(\mu, \nu)$ najbliži fiksiranoj referentnoj meri R , mereno preko KL divergencije sa promenljivom na prvom mestu. Upravo ova veza, koju precizno razrađujemo u narednom odeljku, objašnjava zašto je entropijski regularizovan optimalni transport rešiv iterativnim postupkom naizmeničnih Bregmanovih projekcija (Sinkhornovim algoritmom).

Napomena 4.22. Za male ε , $K(x, y) = e^{-c(x, y)/\varepsilon}$ postaje sve oštrije koncentrisano oko skupa $\{c(x, y) \text{ minimalno}\}$, pa rešenje (63) teži optimalnom (neregularizovanom) kuplovanju; ovo je precizan smisao u kome (57) predstavlja regularizaciju, a ne suštinski drugačiji problem. Za velike ε , K postaje skoro konstantno ($K \approx 1$ svuda gde je c ograničeno), pa se (63) svodi na projekciju konstantne funkcije, čije je rešenje upravo $\mu \otimes \nu$, u skladu sa ranijom digresijom.

4.6 Sinkhorn algoritam kao Bregmanove projekcije

Da bismo entropijski regularizovan problem (57) učinili računski konkretnim, pretpostavimo najpre da su μ, ν diskretne mere,

$$\mu = \sum_{i=1}^m a_i \delta_{x_i}, \quad \nu = \sum_{j=1}^n b_j \delta_{y_j}, \quad a_i, b_j > 0, \quad \sum_i a_i = \sum_j b_j = 1.$$

Svako kuplovanje $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ tada je oblika $\pi = \sum_{i,j} P_{ij} \delta_{(x_i, y_j)}$, potpuno određeno matricom $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{m \times n}$ čiji element P_{ij} predstavlja količinu mase premeštenu iz x_i u y_j . Uslov $\pi \in \Pi(\mu, \nu)$ prevodi se u uslove na redove i kolone matrice P :

$$\sum_{j=1}^n P_{ij} = a_i \quad (i = 1, \dots, m), \quad \sum_{i=1}^m P_{ij} = b_j \quad (j = 1, \dots, n). \quad (64)$$

Primer 4.23. Neka je $m = n = 2$, $a = (0.3, 0.7)$, $b = (0.5, 0.5)$. Matrica

$$P = \begin{pmatrix} 0.2 & 0.1 \\ 0.3 & 0.4 \end{pmatrix}$$

predstavlja kuplovanje koje iz x_1 šalje masu 0.2 u y_1 i masu 0.1 u y_2 (ukupno $0.3 = a_1$), a iz x_2 šalje 0.3 u y_1 i 0.4 u y_2 (ukupno $0.7 = a_2$). Zbir prve kolone, $0.2 + 0.3 = 0.5 = b_1$, i druge, $0.1 + 0.4 = 0.5 = b_2$, potvrđuje da P zaista zadovoljava (64). Svaki element P_{ij} čita se, dakle, direktno kao količina mase koja putuje iz x_i u y_j , dok redovi i kolone matrice moraju zbirno odgovarati unapred zadatim težinama a_i i b_j .

Neka je $C_{ij} := c(x_i, y_j)$ matrica cena. Diskretna verzija entropijski regularizovanog problema (57) glasi

$$\min_{P \in U(a, b)} \sum_{i,j} C_{ij} P_{ij} + \varepsilon \sum_{i,j} P_{ij} \log \frac{P_{ij}}{a_i b_j}, \quad (65)$$

gde je $U(a, b) := \{P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{m \times n} : P\mathbf{1} = a, P^T\mathbf{1} = b\}$ skup matrica sa zadatim marginalima, diskretni analogon $\Pi(\mu, \nu)$.

Prema tvrđenju iz prethodnog odeljka, primenjenoj na diskretan slučaj, problem (65) je ekvivalentan traženju matrice $P \in U(a, b)$ najbliže, u smislu KL divergencije, referentnoj matrici $R_{ij} = K_{ij}/Z$, gde je $K_{ij} = e^{-C_{ij}/\varepsilon}$ diskretno Gibsovo jezgro. Rešenje ovog problema ima poseban oblik.

Tvrđenje 4.24. *Rešenje problema (65), ako postoji, ima oblik*

$$P_{ij}^* = u_i K_{ij} v_j \quad (66)$$

za neke vektore $u \in \mathbb{R}_{>0}^m$, $v \in \mathbb{R}_{>0}^n$, jedinstvene do na skaliranje $(u, v) \mapsto (\lambda u, v/\lambda)$.

Dokaz. Problem (65) je strogo konveksan (drugi izvod po P_{ij} funkcionala $\varepsilon P_{ij} \log P_{ij}$ je $\varepsilon/P_{ij} > 0$) uz linearna ograničenja (64), pa Lagranžovi množitelji daju i potreban i dovoljan uslov optimalnosti. Uvodeći množitelje α_i za ograničenja na redove i β_j za ograničenja na kolone, Lagranžijan je

$$\mathcal{L}(P, \alpha, \beta) = \sum_{i,j} C_{ij} P_{ij} + \varepsilon \sum_{i,j} P_{ij} \log \frac{P_{ij}}{a_i b_j} - \sum_i \alpha_i \left(\sum_j P_{ij} - a_i \right) - \sum_j \beta_j \left(\sum_i P_{ij} - b_j \right).$$

Izvod po P_{ij} , za fiksno (i, j) , jednak je

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P_{ij}} = C_{ij} + \varepsilon \log \frac{P_{ij}}{a_i b_j} + \varepsilon - \alpha_i - \beta_j.$$

Izjednačavanjem sa nulom i rešavanjem po P_{ij} ,

$$\log \frac{P_{ij}}{a_i b_j} = \frac{\alpha_i + \beta_j - C_{ij}}{\varepsilon} - 1 \implies P_{ij} = a_i b_j e^{(\alpha_i - \varepsilon)/\varepsilon} e^{-C_{ij}/\varepsilon} e^{\beta_j/\varepsilon}.$$

Prepoznavamo $e^{-C_{ij}/\varepsilon} = K_{ij}$, i uvodeći $u_i := a_i e^{(\alpha_i - \varepsilon)/\varepsilon}$, $v_j := b_j e^{\beta_j/\varepsilon}$, dobija se tačno oblik (66). Jedinstvenost (do na skaliranje) u, v sledi iz jedinstvenosti P^* , koja je posledica stroge konveksnosti problema.

Pošto je P^* jedinstveno, dovoljno je naći vektore u, v za koje matrica (66) zadovoljava uslove (64). Uslov na redove, $P^* \mathbf{1} = a$, u koordinatama glasi

$$a_i = \sum_j P_{ij}^* = \sum_j u_i K_{ij} v_j = u_i \sum_j K_{ij} v_j = u_i (Kv)_i,$$

gde je $Kv \in \mathbb{R}^m$ vektor dobijen matičnim množenjem, a poslednja jednakost sledi jer se u_i , kao skalar nezavisan od j , izvlači ispred sume. Ovo važi za svako i , pa je, po koordinatama,

$$u_i = \frac{a_i}{(Kv)_i}, \quad i = 1, \dots, m,$$

odnosno, u vektorskom zapisu (deljenje po koordinatama), $u = a/(Kv)$. Analogno, uslov na kolone, $(P^*)^T \mathbf{1} = b$, u koordinatama glasi

$$b_j = \sum_i P_{ij}^* = v_j \sum_i K_{ij} u_i = v_j (K^T u)_j,$$

odakle $v = b/(K^T u)$. Ovim je sistem (67) izveden direktno iz uslova marginala, primenjenih na oblik (66).

Dakle da bismo našli P^* dovoljno je da rešimo sledeći sistem,

$$u = \frac{a}{Kv}, \quad v = \frac{b}{K^T u}. \quad (67)$$

Ovaj sistem se ne rešava direktno, već iterativno: krećući od $v^{(0)} = \mathbf{1}$, naizmenično se računa

$$u^{(t+1)} = \frac{a}{Kv^{(t)}}, \quad v^{(t+1)} = \frac{b}{K^T u^{(t+1)}}, \quad t = 0, 1, 2, \dots \quad (68)$$

Svaki od ova dva koraka je tačno Bregmanova (KL) projekcija, korak za u projektuje trenutnu matricu $\text{diag}(u^{(t)})K\text{diag}(v^{(t)})$ na skup matrica sa ispravnim redovima $\{P : P\mathbf{1} = a\}$, a korak za v projektuje na skup matrica sa ispravnim kolonama $\{P : P^T\mathbf{1} = b\}$, u smislu Bregmanove divergencije generisane negativnom entropijom $\Phi(P) = \sum_{ij} P_{ij} \log P_{ij}$: za ovaj izbor potencijala, $D_\Phi(P\|Q) = \sum_{ij} \left(P_{ij} \log \frac{P_{ij}}{Q_{ij}} - P_{ij} + Q_{ij} \right)$, što se na skupu matrica sa fiksiranom ukupnom masom svodi na KL divergenciju iz (64), poseban slučaj Bregmanove konstrukcije iz 2.5, za drugačiji izbor generatora ψ . Naizmenična primena ova dva koraka je upravo *Sinkhornov algoritam*.

Algoritam nosi naziv po Ričardu Sinkhornu, koji je 1964. godine dokazao da se svaka matrica sa strogo pozitivnim elementima može, jedinstvenim naizmeničnim skaliranjem redova i kolona, pretvoriti u dvostruko stohastičku matricu (matricu čiji su svi redovi i sve kolone jednaki 1), videti Sinkhorn [30]. Ovaj rezultat je izvorno formulisan kao čisto algebarska činjenica o matricama, bez ikakve veze sa optimalnim transportom. Vezu između ovog postupka skaliranja i entropijski regularizovanog optimalnog transporta uspostavio je Cuturi [11], čime je Sinkhornov algoritam postao standardan numerički alat za računanje optimalnog transporta u primenjenim oblastima, prvenstveno zbog toga što se, za razliku od rešavanja linearnog programa (52), sastoji isključivo od matrično-vektorskih množenja i deljenja po koordinatama, operacija koje se lako paralelizuju.

Sinkhornov postupak nije ograničen na diskretne mere. Za proizvoljne $\mu, \nu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$, iste iteracije se prirodno prepisuju preko funkcija umesto vektora: tražimo $u \in L^1(\mu)$, $v \in L^1(\nu)$ takve da optimalno kuplovanje ima gustinu $\pi(x, y) = u(x)K(x, y)v(y)$ u odnosu na $\mu \otimes \nu$, sa uslovima marginala analognim (67), sada zapisanim preko integrala umesto suma. Funkcije u, v nazivaju se *Šredingerovi potencijali*³³.

Napomena 4.25. *Iako Sinkhornov algoritam formalno radi za proizvoljne mere, u praksi se skoro isključivo primenjuje diskretna formulacija: numerička implementacija na računaru zahteva konačno mnogo tačaka, bilo kroz diskretizaciju domena, bilo kroz uzorke iz μ, ν (empirijske mere), pa je diskretni slučaj taj koji se stvarno računa. Neprekidan slučaj sa eksplicitnim, zatvorenim rešenjem, bez potrebe za ikakvom iteracijom, redak je izuzetak; jedan takav slučaj su upravo Gausove marginalne raspodele, koje smo razmotrili u prethodnom primeru.*

Preostaje pitanje da li ovaj naizmenični postupak zaista konvergira ka rešenju P^* , i ako da, kojom brzinom. Skupovi

$$\mathcal{A} := \{P \in \mathbb{R}_{>0}^{m \times n} : P\mathbf{1} = a\}, \quad \mathcal{B} := \{P \in \mathbb{R}_{>0}^{m \times n} : P^T\mathbf{1} = b\}$$

nisu samo konveksni, već i *afini*, jer su zadati linearnim jednakostima. Prema uopštenoj Pitagorinoj teoremi iz Poglavlja 2, Bregmanova projekcija na afin skup zadovoljava jednakost,

³³Naziv potiče iz činjenice da je ovaj sistem jednačina prvi proučavao Ervin Šredinger 1931. godine, u kontekstu problema koji danas nosi njegovo ime, i koji detaljno uvodimo u Poglavlju 5, decenijama pre nego što je prepoznata njegova veza sa optimalnim transportom.

a ne samo nejednakost, što je upravo uslov pod kojim naizmenične projekcije garantovano konvergiraju ka jedinstvenoj tački u preseku $\mathcal{A} \cap \mathcal{B} = U(a, b)$.

Teorema 4.26. *Neka je K matrica sa strogo pozitivnim elementima. Sinkhornove iteracije (4.6) konvergiraju ka rešenju (u^*, v^*) problema (67), i konvergencija je geometrijska:*

$$d_H\left(\text{diag}(u^{(t)})K\text{diag}(v^{(t)}), P^*\right) \leq \kappa^t d_H(K, P^*), \quad (69)$$

gde je $\kappa \in (0, 1)$, zavisno od K , a d_H Hilbertova projektivna metrika na pozitivnim matricama.

Postoje dva, blisko povezana, načina da se okarakteriše brzina konvergencije. Prvi, eksplicitan i globalno važeći, dolazi iz Birkhofove teorije kontrakcija u Hilbertovoj projektivnoj metrici: konstanta κ u (69) zadovoljava $\kappa = \tanh(\Delta/4)$, gde je

$$\Delta := \sup_{i,j,k,l} \log \frac{K_{ik}K_{jl}}{K_{jk}K_{il}}$$

projektivni dijametar matrice K u Hilbertovoj metrici. Puni dokaz, zasnovan na kontrakciji Sinkhornovih iteracija u ovoj metrici, dat je u Franklin and Lorenz [16]. Drugi, asimptotski način, opisuje stvarnu (tipično strožu) stopu konvergencije preko druge najveće singularne vrednosti odgovarajuće normalizovane verzije matrice K , ovo je diskretni analogon spektralnog jaza generatora difuzionog procesa iz Poglavlja 3. Ovu vezu, i njenu konkretnu vrednost za Gausov slučaj, precizno povezujemo sa spektralnim jazom generatora u Poglavlju 5.

5 Veze i dualnost

U prethodna tri poglavlja izgradili smo tri, naizgled odvojene, teorije. Poglavlje 2 dalo nam je jezik informacione geometrije: statističku mnogostrukost, Fišerovu metriku, i dualnost e -konekcije i m -konekcije, sa θ -koordinatama (prirodnim parametrima) i η -koordinatama (parametrima očekivanja) kao njihovim afinim koordinatnim sistemima. Poglavlje 3 dalo nam je jezik difuzionih procesa: generator $\mathcal{L}$, koji deluje na funkcije, i njemu adjungovani operator $\mathcal{L}^*$, koji deluje na mere, povezane L^2 skalarnim proizvodom. Poglavlje 4 dalo nam je jezik optimalnog transporta: primarni Kantorovičev problem, formulisan preko kuplovanja, i njegov dual, formulisan preko para potencijala. U svakoj od ove tri priče pojavio se isti obrazac, iako smo ga svaki put nazvali drugačije.

Na jednoj strani stoje objekti koji lokalno, iz jedne tačke, opisuju ili generišu. Prirodni parametri θ direktno određuju oblik gustine $p(x; \theta)$. Generator $\mathcal{L}f(x)$ meri trenutnu promenu posmatranu iz tačke x . Kantorovičev potencijal $f(x)$ dodeljuje cenu svakom polazištu.

Na drugoj strani stoje objekti koji opisuju stanje sistema u celini, dobijeni usrednjavanjem ili sabiranjem preko cele raspodele. Parametri očekivanja η su prosečne vrednosti dovoljnih statistika. $\mathcal{L}^*\rho$ opisuje evoluciju čitave gustine. Kuplovanje π opisuje kako se ukupna masa premešta iz jedne raspodele u drugu.

Prelazak sa prve strane na drugu, u sva tri slučaja, vrši se istim mehanizmom: integracijom protiv referentne mere, preko uparivanja $\langle f, \mu \rangle = \int f d\mu$ koje smo uveli u Poglavlju 3.

Cilj ovog poglavlja je da pokažemo da ovo nije puka terminološka sličnost, već da su sve tri dualnosti, u preciznom matematičkom smislu, jedna te ista struktura, posmatrana kroz tri različita jezika. Put ka ovom cilju vodi preko dva ključna koraka. Prvo, kroz Oto kalkulus i JKO shemu, pokazaćemo da je adjungovani operator $\mathcal{L}^*$, primenjen na gustinu, upravo Vaserštajn gradijent funkcionala slobodne energije, čime dualnost generatora i adjungovanog operatora dobija direktno geometrijsko tumačenje u terminima Vaserštajn prostora iz Poglavlja 4. Drugo, kroz problem Šredingerovog mosta, pokazaćemo da par funkcija koji se u entropijski regularizovanom optimalnom transportu pojavljuje kao Kantorovičevi potencijali, tzv. Šredingerovi potencijali, zadovoljava sistem spregnutih jednačina čija struktura verno oslikava dualnost e -konekcije i m -konekcije iz informacione geometrije.

Na kraju poglavlja sve tri veze sastavljamo na jednom mestu: eksplicitno ih izračunavamo na Gausovom primeru, koji nas je pratio kroz ceo rad, i pokazujemo da je stopa konvergencije Sinkhornovog algoritma tačno određena spektralnim jazom generatora iz Poglavlja 3. Time se zatvara krug započet u uvodu ovog rada: informaciona geometrija, difuzioni procesi i optimalni transport nisu tri odvojena predmeta izučavanja, već tri lica jedne geometrije prostora mera.

5.1 Oto kalkulus

Kroz Poglavlje 2 radili smo isključivo na konačnodimenzionalnim statističkim mnogostrukostima, gde su Rimanova metrika, konekcije i geodezici standardni, rigorozno utemeljeni alati diferencijalne geometrije. Sada želimo istu vrstu geometrijskog jezika na prostoru $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ iz Poglavlja 4, prostoru svih verovatnosnih mera sa konačnim drugim momentom, opremljenom Vaserštajn rastojanjem. Za razliku od statističke mnogostrukosti, $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ je beskonačnodimenzionalan prostor: proizvoljna gustina $\rho(x)$ zahteva beskonačno mnogo stepeni slobode da bude opisana. Oto je pokazao da se $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$, uprkos ovome,

može formalno tretirati kao (beskonačnodimenzionalna) Rimanova mnogostrukost, sa tangentnim vektorima kao gradijentima glatkih funkcija, čime funkcionali na prostoru mera dobijaju prirodan pojam gradijenta [27]. Cilj ovog i sledećeg odeljka je da izgradimo taj jezik, i pokažemo da Vaserštajn gradijent funkcionala slobodne energije daje tačno Foker-Plank jednačinu iz Poglavlja 3, čime dualnost generatora i adjungovanog operatora dobija eksplicitnu geometrijsku interpretaciju³⁴.

Polazna tačka je veza sa Brenierovom teoremom iz Poglavlja 4: optimalno preslikavanje između bliskih mera ima oblik $T = \nabla\varphi$, za neku funkciju φ . Ako posmatramo krivu $\mu_t := (\text{id} + t\nabla\varphi)_\# \mu$ za malo t , ona polazi iz $\mu_0 = \mu$ i kreće se u pravcu vektorskog polja $\nabla\varphi$. Ovo motivise sledeću definiciju tangentnog prostora.

Definicija 5.1. *Tangentni prostor u tački $\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ definiše se kao*

$$T_\mu \mathcal{P}_2 := \overline{\{\nabla\varphi : \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)\}}^{L^2(\mu)}, \quad (70)$$

zatvorenje skupa gradijenata glatkih funkcija u $L^2(\mu)$ normi, opremljen skalarnim proizvodom

$$\langle \nabla\varphi_1, \nabla\varphi_2 \rangle_\mu := \int_{\mathbb{R}^n} \nabla\varphi_1 \cdot \nabla\varphi_2 d\mu. \quad (71)$$

Uz ovu strukturu, dužina krive $(\mu_t)_{t \in [0,1]}$ sa tangentnim poljem $v_t \in T_{\mu_t} \mathcal{P}_2$, koje zadovoljava jednačinu kontinuiteta³⁵ $\partial_t \mu_t + \nabla \cdot (\mu_t v_t) = 0$, definiše se kao $\int_0^1 \sqrt{\langle v_t, v_t \rangle_{\mu_t}} dt$, potpuno analogno formuli za dužinu krive na statističkoj mnogostrukosti iz Poglavlja 2. Može se pokazati da je infimum ove dužine, po svim krivama koje spajaju μ_0 i μ_1 , jednak upravo $W_2(\mu_0, \mu_1)$, videti Ambrosio et al. [2, Poglavlje 8], čime Vaserštajn rastojanje dobija tumačenje geodezijskog rastojanja u ovoj geometriji.

Centralni objekat koji nam ova geometrija daje jeste pojam gradijenta funkcionala na $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$.

Definicija 5.2. *Neka je $\mathcal{F} : \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}$ funkcional, i neka je $\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu}$ njegov varijacioni izvod. Njegov Vaserštajn gradijent, kao element tangentnog prostora $T_\mu \mathcal{P}_2$, definiše se kao vektorsko polje*

$$\nabla_W \mathcal{F}(\mu) := \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu}. \quad (72)$$

Ova definicija nije proizvoljna, već je jedinstveno određena zahtevom da $\nabla_W \mathcal{F}(\mu) \in T_\mu \mathcal{P}_2$ zadovoljava

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \mathcal{F}(\mu_t) = \langle \nabla_W \mathcal{F}(\mu), v \rangle_\mu$$

za svaku krivu (μ_t) kroz μ sa tangentnim poljem v u $t = 0$, potpuno analogno definiciji gradijenta preko izvoda u pravcu iz klasične analize³⁶.

³⁴Naziv *kalkulus*, umesto *teorija*, biran je namerno: Oto konstrukciju je prvobitno predstavio kao formalan, operativan aparat, koji daje tačne odgovore i pravila za računanje, bez punog, rigoroznog opravdanja u smislu klasične definicije Rimanove mnogostrukosti iz Poglavlja 2, pošto $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ nema globalni atlas karata, a tangentni prostor degeneriše na singularnim merama. Rigorozni temelji, nezavisni od formalnog aparata, dati su kasnije kroz teoriju metričkih gradijentnih tokova, videti Ambrosio et al. [2].

³⁵Uslov $\partial_t \mu_t + \nabla \cdot (\mu_t v_t) = 0$ je jednačina kontinuiteta, matematički zapis očuvanja mase: promena gustine u svakoj tački jednaka je neto prilivu mase određenom brzinskim poljem v_t . Ovaj uslov ima smisla kao definicija tangentnog polja upravo zato što precizira u kom smislu v_t predstavlja *brzinu* kretanja mere μ_t . Bez ovog uslova, tangentno polje $v_t \in T_{\mu_t} \mathcal{P}_2$ bilo bi samo apstraktan element tangentnog prostora, bez veze sa stvarnom evolucijom krive μ_t .

³⁶Misli se na, u konačnodimenzionom slučaju, ekvivalentnu, a u ovom slučaju jedinu upotrebljivu definiciju gradijenta: $\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} f(x + tu) = \langle \nabla f(x), u \rangle$ za svako u .

Kroz jednačinu kontinuiteta, vektorsko polje $\nabla_W \mathcal{F}(\mu)$ određuje i brzinu kojom se, duž gradijentnog toka, menja sama gustina μ .

Definicija 5.3. Vaserštajn gradijentni tok funkcionala $\mathcal{F}$, polazeći iz μ_0 , je kriva (μ_t) koja u svakom trenutku prati negativan Vaserštajn gradijent kao tangentno polje, tj. zadovoljava jednačinu kontinuiteta

$$\partial_t \mu_t = \nabla \cdot \left(\mu_t \nabla_W \mathcal{F}(\mu_t) \right) = \nabla \cdot \left(\mu_t \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu}(\mu_t) \right). \quad (73)$$

Radi kraćeg zapisa, u nastavku ćemo desnu stranu jednačine (73) takođe zvati Vaserštajn gradijentom funkcionala $\mathcal{F}$, pri čemu iz konteksta, i iz toga da li je reč o vektorskom polju ili o skalarnoj funkciji, sledi na koji od dva objekta, (72) ili desnu stranu (73), se misli.

Primer 5.4. Neka je $\mathcal{F}(\mu) := \int_{\mathbb{R}^n} V d\mu$, za neki potencijal V . Varijacioni izvod je, direktno iz definicije, $\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu} = V$, pa je Vaserštajn gradijent

$$\nabla_W \mathcal{F}(\mu) = \nabla V,$$

i jednačina (73) daje

$$\partial_t \mu_t = \nabla \cdot (\mu_t \nabla V).$$

Ovaj funkcional odgovara čistom transportu bez difuzije: dobijena jednačina je jednačina kontinuiteta za vektorsko polje ∇V , tj. deterministička evolucija čestica duž $\dot{x} = \nabla V(x)$, bez ikakvog slučajnog člana. Difuzioni deo Foker-Plank jednačine, kao što ćemo pokazati u narednom odeljku, potiče od entropijskog dela funkcionala slobodne energije, koji ovde nismo uključili.

Formalizam tangentnog prostora omogućava nam i eksplicitnu konstrukciju geodezika u $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$, krivih koje ostvaruju infimum u definiciji Vaserštajn rastojanja.

Tvrđenje 5.5 (MekKanova interpolacija). Neka su $\mu_0, \mu_1 \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$, i neka je T optimalno Brenierovo preslikavanje iz μ_0 u μ_1 (Poglavlje 4), $T = \nabla \varphi$ za konveksnu φ . Kriva

$$\mu_t := \left((1-t) \text{id} + tT \right)_{\#} \mu_0, \quad t \in [0, 1], \quad (74)$$

je geodezik u $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), W_2)$ koji spaja μ_0 i μ_1 , sa dužinom $W_2(\mu_0, \mu_1)$, i za sve $s, t \in [0, 1]$ važi $W_2(\mu_s, \mu_t) = |s - t| W_2(\mu_0, \mu_1)$.

Interpolacija (74), poznata kao MekKanova interpolacija, ima intuitivno tumačenje: umesto da linearno interpolišemo gustine, $\rho_t = (1-t)\rho_0 + t\rho_1$, što daje mešavinu, ne kretanje mase, linearno interpolišemo pozicije čestica duž optimalnog transportnog preslikavanja. Tangentno polje ove krive u $t = 0$ je

$$v_0 = T - \text{id} = \nabla \varphi(x) - \nabla \left(\frac{|x|^2}{2} \right) = \nabla \left(\varphi(x) - \frac{|x|^2}{2} \right),$$

dakle $v_0 \in T_{\mu_0} \mathcal{P}_2$ u smislu definicije (70), jer je oblika $\nabla \chi$ za $\chi(x) := \varphi(x) - \frac{|x|^2}{2}$.

Primer 5.6. Za Gausove mere $\mu_0 = \mathcal{N}(m_0, \Sigma_0)$, $\mu_1 = \mathcal{N}(m_1, \Sigma_1)$, Brenierovo preslikavanje je linearno, $T(x) = m_1 + A(x - m_0)$, za jedinstvenu simetričnu, pozitivno definitnu matricu A koja zadovoljava $A\Sigma_0 A = \Sigma_1$; eksplicitnu formulu za A i pripadajuće Vaserštajn

rastojanje, tzv. Bures metriku, izvodimo u odeljku o Gausovom primeru na kraju poglavlja. MekKanova interpolacija (74) tada glasi

$$\mu_t = \mathcal{N}\left((1-t)m_0 + tm_1, \Sigma_t\right), \quad \Sigma_t := \left((1-t)I + tA\right)\Sigma_0\left((1-t)I + tA\right),$$

tj. geodezija ostaje unutar Gausove familije, sa sredinom koja se kreće linearno i kovarijacionom matricom koja interpoliše preko matrice A . Ovaj primer detaljno razrađujemo u odeljku 5.8.

5.2 Foker-Plank jednačina kao Vaserštajn gradijentni tok

Sada smo spremni da ispunimo obećanje dato još u Poglavlju 3: pokazaćemo da je Foker-Plank jednačina, koju smo tamo izveli kao posledicu Itove formule, upravo Vaserštajn gradijentni tok jednog konkretnog funkcionala, funkcionala slobodne energije. Ovim dualnost generatora i adjungovanog operatora iz Poglavlja 3 dobija eksplicitno geometrijsko tumačenje u terminima Vaserštajn prostora iz Poglavlja 4.

Definicija 5.7. Neka je $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ potencijal, i neka je $\sigma > 0$ difuzioni koeficijent. Funkcional slobodne energije je

$$\mathcal{F}(\mu) := \int_{\mathbb{R}^n} V d\mu + \frac{\sigma^2}{2} \int_{\mathbb{R}^n} \mu \log \mu dx, \quad (75)$$

definisan kad god je μ apsolutno neprekidna, i $+\infty$ inače. Prvi član naziva se potencijalna energija, drugi negativna entropija.

Tvrđenje 5.8. Vaserštajn gradijent funkcionala (75) je

$$\nabla_W \mathcal{F}(\mu) = \nabla V + \frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \mu. \quad (76)$$

Dokaz. Računamo varijacioni izvod (75) član po član. Za prvi član, $\frac{\delta}{\delta \mu} \int V d\mu = V$, direktno iz definicije funkcionalnog izvoda. Za drugi član, koristimo pravilo $\frac{\delta}{\delta \mu} \int \mu \log \mu dx = \log \mu + 1$, izvod podintegralne funkcije $\mu \log \mu$ po μ . Sabirajući,

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu} = V + \frac{\sigma^2}{2} (\log \mu + 1).$$

Primenom definicije (72), $\nabla_W \mathcal{F}(\mu) = \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mu}$, a pošto je gradijent konstante nula, dobija se (76).

Teorema 5.9. Vaserštajn gradijentni tok funkcionala slobodne energije (75), definisan jednačinom (73), jednak je Foker-Plank jednačini

$$\partial_t \mu_t = \nabla \cdot (\mu_t \nabla V) + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \mu_t \quad (77)$$

iz Poglavlja 3, pridruženoj difuzionom procesu $dX_t = -\nabla V(X_t) dt + \sigma dW_t$.

Dokaz. Zamenom (76) u jednačinu (73),

$$\partial_t \mu_t = \nabla \cdot \left(\mu_t \left[\nabla V + \frac{\sigma^2}{2} \nabla \log \mu_t \right] \right) = \nabla \cdot (\mu_t \nabla V) + \frac{\sigma^2}{2} \nabla \cdot (\mu_t \nabla \log \mu_t).$$

Koristeći identitet $\mu \nabla \log \mu = \nabla \mu$, drugi član postaje $\nabla \cdot (\nabla \mu_t) = \Delta \mu_t$, čime se dobija tačno (77).

Ovaj rezultat daje Foker-Plank jednačini precizno geometrijsko tumačenje: umesto da je posmatramo kao proizvoljnu parcijalnu diferencijalnu jednačinu drugog reda, ona opisuje najbrže moguće opadanje funkcionala slobodne energije $\mathcal{F}$, u geometriji zadatoj Vaserštajn rastojanjem. Potencijalna energija $\int V d\mu$ vuče raspodelu ka oblastima niskog potencijala, dok entropijski član $\frac{\sigma^2}{2} \int \mu \log \mu dx$ nagrađuje razućenije raspodele, sprečavajući potpuni kolaps mase u tačku; ravnoteža ova dva efekta određuje stacionarnu raspodelu procesa, u skladu sa Ornštajn-Ulenbek primerom iz Poglavlja 3.

Napomena 5.10. *Vredi napomenuti da Foker-Plank jednačina nije jedina parcijalna diferencijalna jednačina koja se može zapisati kao Vaserštajn gradijentni tok. Isti recept, izbor funkcionala $\mathcal{F}$ na $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ čiji gradijentni tok tražimo, generiše čitavu porodicu važnih jednačina; na primer, jednačina poroznih sredina $\partial_t \mu = \Delta(\mu^m)$ za $m > 1$ odgovara funkcionalu $\mathcal{F}(\mu) = \frac{1}{m-1} \int \mu^m dx$, dok jednačine sa interakcijom čestica, koje se javljaju u modelima agregacije i fizici plazme, odgovaraju funkcionalima koji, pored potencijalne energije i entropije, sadrže i član interakcije $\iint W(x-y) d\mu(x) d\mu(y)$. Ovo je bio i istorijski polazni primer u originalnom radu Otto [27], koji prethodi opštijoj JKO formulaciji.*

Ova činjenica daje nam novi pogled na sam oblik Foker-Plank jednačine. Kada smo je prvi put uveli, u Poglavlju 3, delovala je kao jedna od mnogih mogućih kombinacija transportnog i difuzionog člana. Sada vidimo da taj oblik uopšte nije proizvoljan, već je matematički prinuđen čim se fiksiraju Vaserštajn geometrija i funkcional slobodne energije. Ista vrsta pojave sreće se i van teorije verovatnoće: svetlost bira put koji minimizuje vreme putovanja, a mehanički sistem prati putanju najmanje akcije. U oba slučaja, lokalno pravilo i globalni optimizacioni princip opisuju istu pojavu, samo iz različitih uglova. Foker-Plank jednačina, gledana kroz Vaserštajn gradijentni tok, sledi istu logiku: njen oblik nije proizvoljan izbor, već posledica toga da priroda, i ovde, sledi put najbržeg opadanja energije.

Naredni korak je da ovaj kontinualni gradijentni tok diskretizujemo u vremenu, čime dobijamo Jordan-Kinderlehrer-Otovu shemu, i pokazujemo da je granica te diskretizacije, kada korak teži nuli, upravo rešenje Foker-Plank jednačine.

Definicija 5.11. *Za korak $\tau > 0$ i početni uslov $\mu^0 \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$, Jordan-Kinderlehrer-Otova shema (u daljem tekstu JKO shema) definiše niz*

$$\mu^{k+1} := \arg \min_{\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)} \left[\frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu, \mu^k) + \mathcal{F}(\mu) \right], \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (78)$$

prema autorima Ričardu Džordanu, Dejvidu Kinderlehreru i Feliksu Otou, koji su je uveli u radu Jordan et al. [20].

Egzistencija i jedinstvenost minimizatora u (78) slede iz stroge konveksnosti $\mathcal{F}$ (kada je V konveksan) i stroge konveksnosti $\mu \mapsto W_2^2(\mu, \mu^k)$ duž generalisanih geodezika u $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$; videti Ambrosio et al. [2, Poglavlje 8] za precizne uslove.

Shema (78) je direktno uopštenje implicitne Ojlerove sheme za obično diferencijalnu jednačinu $\dot{x} = -\nabla f(x)$ u $\mathbb{R}^n$,

$$x^{k+1} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left[\frac{1}{2\tau} |x - x^k|^2 + f(x) \right],$$

gde je Euklidsko rastojanje zamenjeno Vaserštajn rastojanjem, a funkcija f funkcionalom $\mathcal{F}$. Svaki korak predstavlja kompromis: prvi član kažnjava udaljavanje od prethodnog koraka μ^k , mereno u Vaserštajn rastojanju, dok drugi teži da smanji energiju $\mathcal{F}$.

Teorema 5.12 (Jordan-Kinderlehrer-Oto). *Neka je (μ^k) niz definisan sa (78), i neka je $\mu_\tau(t) := \mu^{\lfloor t/\tau \rfloor}$ stepenasta interpolacija tog niza. Tada, kada $\tau \rightarrow 0$, $\mu_\tau(t) \rightarrow \mu(t)$, gde je $\mu(t)$ rešenje Foker-Plank jednačine (77) sa početnim uslovom $\mu(\cdot, 0) = \mu^0$.*

Dokaz. *Dokaz se sastoji od tri koraka, koje ovde skiciramo, upućujući na Jordan et al. [20] za pune detalje.*

Ocena energije. Iz definicije minimizatora (78), upoređivanjem vrednosti funkcionala u μ^{k+1} sa vrednošću u μ^k (koje je takođe dopustivo, sa $W_2(\mu^k, \mu^k) = 0$), sledi

$$\frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu^{k+1}, \mu^k) + \mathcal{F}(\mu^{k+1}) \leq \mathcal{F}(\mu^k),$$

odakle se, sumiranjem po k , dobija uniformna (u τ) ograničenost $\sum_k W_2^2(\mu^{k+1}, \mu^k)$ i monotonno opadanje $\mathcal{F}(\mu^k)$. Ova ocena je diskretan analogon toga da $\mathcal{F}$ opada duž kontinualnog gradijentnog toka.

Kompaktnost. Ograničenost energije $\mathcal{F}(\mu^k)$ i ograničenost drugog momenta (koja sledi iz konačnosti $W_2(\mu^k, \mu^0)$) obezbeđuju, preko Prohorovljeve teoreme iz Poglavlja 4, da interpolacije $\mu_\tau(t)$ imaju slabo konvergentne podnizove, za svaki fiksiran t .

Identifikacija granice. Preostaje da se pokaže da svaka takva granica $\mu(t)$ zadovoljava slabu formulaciju Foker-Plank jednačine (77). Ovo se dokazuje testiranjem uslova prvog reda za minimizator (78) (analognog Ojlerovoj jednačini u varijacionom računu) protiv proizvoljne glatke test funkcije, i puštanjem $\tau \rightarrow 0$ u dobijenom identitetu; granični identitet je tačno slaba formulacija (77). Jedinstvenost rešenja Foker-Plank jednačine tada obezbeđuje da čitav niz, ne samo podniz, konvergira.

Primer 5.13. *Ilustrujmo jedan korak JKO sheme na jednostavnom slučaju $V \equiv 0$ (čista difuzija, bez potencijala), sa $\mu^0 = \delta_{x_0}$. Prvi korak (78) traži*

$$\mu^1 = \arg \min_{\mu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)} \left[\frac{1}{2\tau} W_2^2(\mu, \delta_{x_0}) + \frac{\sigma^2}{2} \int \mu \log \mu \, dx \right].$$

Prvi član kažnjava udaljavanje mase od tačke x_0 , drugi nagrađuje razućenost. Kompromis između ova dva zahteva daje Gausovu raspodelu centriranu u x_0 , sa disperzijom koja raste sa τ i σ : eksplicitan račun (koji sprovodimo u odeljku 5.8) pokazuje da je optimalno $\mu^1 = \mathcal{N}(x_0, \frac{\sigma^2}{2}\tau I)$, u skladu sa fundamentalnim rešenjem jednačine toplote iz Poglavlja 3: kada $\tau \rightarrow 0$ sa $k\tau = t$ fiksirano, iterativno ponavljanje ovog koraka reprodukuje tačno prelaznu gustinu $p_t(\cdot - x_0) = \mathcal{N}(x_0, \sigma^2 t I)$ standardnog difuzionog procesa.

5.3 Problem Šredingerovog mosta

Poglavlja 2, 3 i 4 do sada su se dodirivala kroz zajedničku geometrijsku strukturu, dualnost funkcija i mera, i kroz Vaserštajn gradijentni tok, ali smo svaki put posmatrali evoluciju iz jednog, unapred zadatog početnog uslova ka ravnoteži. Preostaje pitanje koje smo najavili još u uvodu rada: šta ako su zadate *obe* raspodele, početna i krajnja, i tražimo najprirodniji proces koji ih povezuje? Ovo pitanje, koje je Ervin Šredinger postavio 1931. godine, spaja sva tri prethodna poglavlja na najeksplicitniji način do sada.

Zamislimo veliki broj nezavisnih čestica, svaka se krećući kao standardno Braunovo kretanje. U trenutku $t = 0$ raspodela čestica je μ_0 . Da smo pustili proces da slobodno evoluirao, u trenutku $t = 1$ bismo očekivali raspodelu $p_1 * \mu_0$, konvoluciju prelazne gustine

iz Poglavlja 3 sa μ_0 . Pretpostavimo, umesto toga, da smo *opazili* raspodelu μ_1 , različitu i znatno manje verovatnu od one koju bi slobodna difuzija proizvela. Šredingerovo pitanje glasi: uslovno na ovo neobično opažanje, kako su se čestice *zaista* kretale između $t = 0$ i $t = 1$?

Neka je $\Omega = C([0, 1], \mathbb{R}^n)$ prostor putanja i neka je R referentna mera na Ω pod kojom je koordinatni proces standardno Braunovo kretanje sa početnom merom μ_0 .³⁷

Definicija 5.14. Statička formulacija problema Šredingerovog mosta *između mera* $\mu_0, \mu_1 \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^n)$, u odnosu na referentnu meru R na Ω , je problem

$$P^* = \arg \min_{P: (X_0)_\# P = \mu_0, (X_1)_\# P = \mu_1} D_{KL}(P \| R). \quad (79)$$

Prethodna formulacija pokazuje da se Šredingerov problem može posmatrati kao problem određivanja m-projekcije referentne mere R na skup mera koje zadovoljavaju propisana ograničenja. Na prvi pogled nije jasno zašto bi rešenje ovog optimizacionog problema imalo bilo kakvu vezu sa pitanjem "koji je najverovatniji način da se to desilo". Minimizacija KL divergencije uz zadata ograničenja je, sama po sebi, samo jedan od mnogih mogućih kriterijuma koje bismo mogli da postavimo. Sledeći rezultat pokazuje da to nije jedan od mogućih kriterijuma, već nužna posledica same postavke problema.

Teorema 5.15 (Sanov). *Neka su $Y_1, Y_2, \dots$ nezavisne, jednako raspoređene slučajne promenljive sa raspodelom R na konačnom skupu $\{1, \dots, k\}$, i neka je*

$$\hat{R}_n(j) := \frac{1}{n} \# \{i \leq n : Y_i = j\}, \quad j = 1, \dots, k,$$

njihova empirijska raspodela nakon n opažanja. Tada za svaku meru P na $\{1, \dots, k\}$ i svaki n takav da je $nP(j)$ ceo broj za sve $j = 1, \dots, k$,

$$\mathbb{P}(\hat{R}_n = P) = e^{-n D_{KL}(P \| R) + o(n)}, \quad n \rightarrow \infty. \quad (80)$$

Dokaz. *Dokazujemo tvrđenje samo za konačan prostor ishoda $\{1, \dots, k\}$. Primena na prostor putanja Ω , koji nam je potreban za problem Šredingerovog mosta, zahteva opštiju verziju teoreme za mere na Poljskim prostorima. Ta verzija je tehnički zahtevnija, ali zasniva se na istoj ideji koju ovde izlažemo, videti Dembo and Zeitouni [13].*

Dokaz se zasniva na direktnom prebrojavanju, tzv. metodi tipova. Broj sekvenci $(y_1, \dots, y_n) \in \{1, \dots, k\}^n$ čija je empirijska raspodela tačno P jednak je multinomnom koeficijentu

$$N(P) = \binom{n}{nP(1), \dots, nP(k)} = \frac{n!}{\prod_{j=1}^k (nP(j))!}.$$

Pošto su Y_i nezavisne, svaka pojedinačna sekvenca sa tim tipom ima verovatnoću $\prod_{j=1}^k R(j)^{nP(j)}$, pa je

$$\mathbb{P}(\hat{R}_n = P) = N(P) \prod_{j=1}^k R(j)^{nP(j)}. \quad (81)$$

Primenom Stirlingove formule, $\log m! = m \log m - m + O(\log m)$, na svaki faktorijel u $N(P)$, dobija se

$$\frac{1}{n} \log N(P) = - \sum_{j=1}^k P(j) \log P(j) + O\left(\frac{\log n}{n}\right) = H(P) + o(1).$$

³⁷ R je tada σ -konačna, ne verovatnosna mera. Ovo je standardan izbor u literaturi (videti Léonard [24]) i ne stvara problem sve dok je $P \ll R$ verovatnosna mera, kao što je slučaj sa rešenjem P^* .

Logaritmovanjem (81) i deljenjem sa n ,

$$\frac{1}{n} \log \mathbb{P}(\hat{R}_n = P) = \frac{1}{n} \log N(P) + \sum_{j=1}^k P(j) \log R(j) + o(1) = H(P) + \sum_{j=1}^k P(j) \log R(j) + o(1).$$

Sabirajući prva dva člana,

$$\begin{aligned} H(P) + \sum_j P(j) \log R(j) &= - \sum_j P(j) \log P(j) + \sum_j P(j) \log R(j) = \\ &= - \sum_j P(j) \log \frac{P(j)}{R(j)} = -D_{KL}(P\|R), \end{aligned}$$

odakle sledi (80).

Sanovljeva teorema, primenjena na skup $\mathcal{E}$ svih empirijskih mera sa marginalima μ_0, μ_1 , pokazuje da verovatnoća opažanja empirijske mere bliske nekom $P \in \mathcal{E}$ opada eksponencijalno po n (broju čestica), sa stopom $D_{KL}(P\|R)$. Kada su dva kandidata $P_1, P_2 \in \mathcal{E}$ takva da je $D_{KL}(P_1\|R) < D_{KL}(P_2\|R)$, iz (80) sledi da je verovatnoća prvog eksponencijalno veća od verovatnoće drugog, pa u granici $n \rightarrow \infty$ sav opaženi ishod praktično sigurno potiče od mere najbliže R . Rešenje P^* problema (79) je, dakle, upravo ta mera, i time predstavlja najverovatnije objašnjenje opaženog prelaza iz μ_0 u μ_1 .

Tvrđenje 5.16. *Rešenje P^* problema (79), ako postoji, ima oblik*

$$\frac{dP^*}{dR}(\omega) = \varphi(X_0(\omega)) \psi(X_1(\omega)) \quad (82)$$

za neke funkcije $\varphi, \psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}_{>0}$.

Dokaz. *Ideja dokaza analogna je dokazu propozicije o obliku $P_{ij}^* = u_i K_{ij} v_j$ za diskretnan entropijski regularizovan optimalni transport u Poglavlju 4, ovde primenjena na meru na prostoru putanja umesto na matricu.*

Problem (79) je strogo konveksan, jer je $D_{KL}(P\|R)$ strogo konveksna po P , uz linearna ograničenja na marginale, pa Lagranžovi množitelji daju potreban i dovoljan uslov optimalnosti. Pošto su marginalna ograničenja zadata za svaku tačku $x \in \mathbb{R}^n$ (uslov na μ_0) i svaku tačku $y \in \mathbb{R}^n$ (uslov na μ_1) ponaosob, množitelji su sada funkcije, $\alpha(x)$ i $\beta(y)$, a ne skalari. Lagranžijan je

$$\mathcal{L}[P] = D_{KL}(P\|R) - \int \alpha(x) \left[(X_0)_\# P(dx) - \mu_0(dx) \right] - \int \beta(y) \left[(X_1)_\# P(dy) - \mu_1(dy) \right].$$

Zapisujući $D_{KL}(P\|R) = \int \log \frac{dP}{dR} dP$, varijacioni izvod ovog funkcionala po $P(\omega)$ jednak je $\log \frac{dP}{dR}(\omega) + 1$, analogno računu za entropijski član u diskretnom slučaju. Pošto marginalna ograničenja zavise od putanje ω isključivo preko $X_0(\omega)$ i $X_1(\omega)$, varijacija odgovarajućih članova Lagranžijana po $P(\omega)$ daje tačno $\alpha(X_0(\omega))$ i $\beta(X_1(\omega))$, analogno tome kako je u diskretnom slučaju množitelj α_i bio "izvučen" na indeks reda i kome pripada element P_{ij} .

Izjednačavanjem varijacije Lagranžijana sa nulom, za svaku putanju ω ,

$$\log \frac{dP}{dR}(\omega) + 1 - \alpha(X_0(\omega)) - \beta(X_1(\omega)) = 0,$$

odakle je

$$\frac{dP^*}{dR}(\omega) = e^{-1} e^{\alpha(X_0(\omega))} e^{\beta(X_1(\omega))}.$$

Uvodeći $\varphi(x) := e^{\alpha(x)-1/2}$ i $\psi(y) := e^{\beta(y)-1/2}$, dobija se tačno oblik (82).

Dokaz, zasnovan na teoriji Bregmanovih projekcija na affine skupove mera, analogno diskretnom slučaju iz Poglavlja 4, dat je u Léonard [24].

Da bismo izveli konkretan sistem za φ, ψ , uvodimo prelaznu gustinu referentnog procesa.

Definicija 5.17. *Neka je $K(x, y)$ prelazna gustina referentnog procesa R od x u trenutku 0 do y u trenutku 1; za standardno Braunovo kretanje sa difuzionim koeficijentom σ , prema (34), $K(x, y) = p_1(y - x)$.*

Marginalni uslov $(X_0)_\# P^* = \mu_0$, primenjen na faktORIZACIJU (82) i integraljen po unutrašnjim tačkama putanje (koje φ, ψ ne vide), svodi se na uslov na parove (x, y) , i analogno za $(X_1)_\# P^* = \mu_1$.

Tvrđenje 5.18. *Funkcije φ, ψ iz (82) zadovoljavaju sistem*

$$\varphi(x) \int_{\mathbb{R}^n} K(x, y) \psi(y) dy = 1 \quad \mu_0 - \text{skoro svuda}, \quad \psi(y) \int_{\mathbb{R}^n} K(x, y) \varphi(x) d\mu_0(x) = \frac{d\mu_1}{d\lambda}(y), \quad (83)$$

gde je λ Lebegova mera, pa izraz sa desne strane predstavlja standardnu gustinu mere.

Sistem (83) je kontinualan analogon diskretnog Sinkhorn sistema (67) iz Poglavlja 4: φ, ψ odgovaraju vektorima u, v , a $K(x, y)$ jezgru K_{ij} , sa sumama zamenjenim integralima. Kao i u diskretnom slučaju, sistem (83) se ne rešava u zatvorenoj formi za opšte μ_0, μ_1 , već iterativno, naizmeničnim ažuriranjem φ i ψ , čime se dobija kontinualna verzija Sinkhornovog algoritma najavljena u Poglavlju 4. Funkcije φ, ψ nazivaju se *Šredingerovi potencijali*.

Sve što smo do sada pokazali, oblik faktORIZACIJE (82) i sistem (83) za Šredingerove potencijale, prećutno pretpostavlja da rešenje P^* uopšte postoji. Pitanje egzistencije i jedinstvenosti rešenja problema (79) samo po sebi je duboko i tehnički zahtevno, ali pod razumnim, ne previše restriktivnim uslovima, odgovor je potvrđan.

Teorema 5.19 (Egzistencija i jedinstvenost). *Neka $\mu_0, \mu_1 \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ (imaju konačan drugi moment) i neka je referentni proces R nedegenerisan, u smislu da je njegova prelazna gustina $K(x, y)$ strogo pozitivna za sve $x, y \in \mathbb{R}^n$. Tada problem (79) ima jedinstveno rešenje P^* , i par Šredingerovih potencijala (φ, ψ) iz (82) postoji, jedinstven do na skaliranje $(\varphi, \psi) \mapsto (\lambda\varphi, \psi/\lambda)$.*

Dokaz egzistencije i jedinstvenosti, zasnovan na kompaktnosti i strogoj konveksnosti $D_{KL}(\cdot \| R)$, dat je u Léonard [24].

Statička formulacija koju smo do sada razvili opisuje P^* kao meru na celom prostoru putanja, karakterisanu preko marginala u $t = 0$ i $t = 1$ i para Šredingerovih potencijala. Ovaj opis, međutim, ne kaže ništa eksplicitno o tome kako proces X_t evoluira između ta dva trenutka. Pokazuje se da P^* odgovara procesu koji je, u svakom trenutku $t \in (0, 1)$, rešenje stohastičke diferencijalne jednačine sa driftom određenim upravo Šredingerovim potencijalima, čime statička formulacija dobija konkretnu, dinamičku realizaciju. Ovoj formulaciji, koja direktno povezuje problem Šredingerovog mosta sa difuzionim procesima iz Poglavlja 3, posvećujemo naredni odeljak.

5.4 Problem Šredingerovog mosta kao entropijski optimalni transport

Statička formulacija iz prethodnog odeljka daje P^* kao meru na celom prostoru putanja Ω . Za mnoge svrhe, uključujući vezu sa Sinkhornovim algoritmom iz Poglavlja 4,

dovoljno je poznavati samo zajedničku raspodelu para (X_0, X_1) pod P^* , kuplovanje koje ćemo označiti sa π^* . Cilj ovog odeljka je da pokažemo da π^* nije ništa drugo do rešenje entropijski regularizovanog Kantorovičevog problema (57), čime se pokazuje da su problem Šredingerovog mosta i entropijski optimalni transport, iako motivisani različitim pitanjima, matematički identičan problem.

Ključan tehnički alat je razlaganje Kulbak-Lajblerove divergencije na doprinos krajnjih tačaka i doprinos putanje između njih.

Lema 5.20 (Lančano pravilo za KL divergenciju). *Neka su P, R mere na Ω sa istim skupom mogućih vrednosti para (X_0, X_1) , i neka su π_P, π_R zajedničke raspodele tog para pod P , odnosno R . Tada*

$$D_{KL}(P\|R) = D_{KL}(\pi_P\|\pi_R) + \mathbb{E}_{(x,y)\sim\pi_P} \left[D_{KL}(P(\cdot \mid X_0 = x, X_1 = y) \parallel R(\cdot \mid X_0 = x, X_1 = y)) \right]. \quad (84)$$

Dokaz. *Pišući svaku od mera preko marginale (X_0, X_1) i uslovne raspodele putanje,*

$$P(d\omega) = \pi_P(dx, dy) \cdot P(d\omega \mid X_0 = x, X_1 = y), \quad R(d\omega) = \pi_R(dx, dy) \cdot R(d\omega \mid X_0 = x, X_1 = y),$$

Radon-Nikodimov izvod se razlaže kao

$$\frac{dP}{dR}(\omega) = \frac{d\pi_P}{d\pi_R}(X_0(\omega), X_1(\omega)) \cdot \frac{dP(\cdot \mid X_0, X_1)}{dR(\cdot \mid X_0, X_1)}(\omega).$$

Logaritmovanjem i uzimanjem očekivanja po P dobijamo,

$$D_{KL}(P\|R) = \mathbb{E}_P \left[\log \frac{d\pi_P}{d\pi_R}(X_0, X_1) \right] + \mathbb{E}_P \left[\log \frac{dP(\cdot \mid X_0, X_1)}{dR(\cdot \mid X_0, X_1)}(\omega) \right].$$

Prvi član zavisi samo od (X_0, X_1) , pa se očekivanje po P svodi na očekivanje po π_P ,

$$\mathbb{E}_P \left[\log \frac{d\pi_P}{d\pi_R}(X_0, X_1) \right] = \mathbb{E}_{\pi_P} \left[\log \frac{d\pi_P}{d\pi_R}(X_0, X_1) \right] = D_{KL}(\pi_P\|\pi_R).$$

Za drugi član, prvo uslovno na $(X_0, X_1) = (x, y)$, pa po π_P ,

$$\mathbb{E}_P \left[\log \frac{dP(\cdot \mid X_0, X_1)}{dR(\cdot \mid X_0, X_1)} \right] = \mathbb{E}_{(x,y)\sim\pi_P} \left[D_{KL}(P(\cdot \mid x, y) \parallel R(\cdot \mid x, y)) \right].$$

Sabiranjem oba člana dobija se (84).

Drugi član u (84) je uvek nenegativan, i jednak nuli ako i samo ako je uslovna raspodela putanje između x i y pod P jednaka onoj pod R . Prema tome, za fiksiranu marginalu $\pi_P = \pi$, minimum $D_{KL}(P\|R)$ dostiže se kada je P kopija uslovne raspodele R između datih krajnjih tačaka, čime se (84) svodi na $D_{KL}(\pi\|\pi_R)$. Sledi da je statički problem (79) ekvivalentan minimizaciji

$$\pi^* = \arg \min_{\pi \in \Pi(\mu_0, \mu_1)} D_{KL}(\pi\|\pi_R), \quad (85)$$

gde je $\pi_R(dx, dy) = \mu_0(dx) K(x, y) dy$ zajednička raspodela (X_0, X_1) pod referentnim procesom R , sa K prelaznom gustinom uvedenom u prethodnom odeljku.

Teorema 5.21. *Neka je R standardno Braunovo kretanje sa difuzionim koeficijentom σ . Tada je π^* iz (85), do na aditivnu konstantu koja ne zavisi od π , rešenje entropijski regularizovanog Kantorovičevog problema (57) iz Poglavlja 4, sa kvadratnom cenom $c(x, y) = |x - y|^2$ i parametrom regularizacije $\varepsilon = 2\sigma^2$.*

Dokaz. Pošto je $K(x, y) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp(-|x - y|^2/2\sigma^2)$, imamo $-\log K(x, y) = \frac{|x - y|^2}{2\sigma^2} + \text{const}$, gde konstanta ne zavisi od x, y . Raspisujući $D_{KL}(\pi \| \pi_R)$,

$$\begin{aligned} D_{KL}(\pi \| \pi_R) &= \int \log \frac{\pi(x, y)}{\mu_0(x)K(x, y)} d\pi(x, y) = \\ &= \int \log \frac{\pi}{\mu_0 \otimes \mu_1} d\pi - \int \log K d\pi + \int \log \mu_1(y) d\pi(x, y). \end{aligned}$$

Prvi član je, po definiciji, $D_{KL}(\pi \| \mu_0 \otimes \mu_1)$. Poslednji član zavisi samo od marginale π po y , koja je za svako $\pi \in \Pi(\mu_0, \mu_1)$ jednaka μ_1 , pa je taj član konstanta, $-H(\mu_1)$, nezavisna od izbora π unutar $\Pi(\mu_0, \mu_1)$. Za srednji član, koristeći $-\log K = \frac{|x - y|^2}{2\sigma^2} + \text{const}$,

$$-\int \log K d\pi = \frac{1}{2\sigma^2} \int |x - y|^2 d\pi + \text{const}.$$

Sabirajući, do na aditivnu konstantu nezavisnu od π ,

$$\begin{aligned} D_{KL}(\pi \| \pi_R) &= D_{KL}(\pi \| \mu_0 \otimes \mu_1) + \frac{1}{2\sigma^2} \int |x - y|^2 d\pi + \text{const} = \\ &= \frac{1}{2\sigma^2} \left[\int |x - y|^2 d\pi + 2\sigma^2 D_{KL}(\pi \| \mu_0 \otimes \mu_1) \right] + \text{const}. \end{aligned}$$

Minimizacija $D_{KL}(\pi \| \pi_R)$ po $\pi \in \Pi(\mu_0, \mu_1)$ je, dakle, ekvivalentna minimizaciji izraza u uglastoj zagradi, što je tačno funkcional (57) sa $c(x, y) = |x - y|^2$ i $\varepsilon = 2\sigma^2$.

Ovaj rezultat ima važnu praktičnu posledicu: egzistencija i jedinstvenost π^* slede direktno iz odgovarajućih rezultata za entropijski regularizovan optimalni transport iz Poglavlja 4, umesto da se dokazuju nezavisno za problem Šredingerovog mosta. Pun proces P^* se zatim rekonstruiše iz π^* lepljenjem uslovne raspodele referentnog procesa R između svakog para (x, y) u nosaču π^* , u skladu sa (84).

Vezu između Šredingerovih potencijala i Sinkhornovog algoritma, koji se sada prirodno tumači kao numerička metoda za njihovo računanje, detaljno razrađujemo u narednom odeljku.

5.5 Sinkhornov algoritam za rešavanje Šredingerovog problema

Ovaj odeljak oslanja se isključivo na rezultat prethodnog odeljka: pokazali smo da je marginala π^* problema Šredingerovog mosta rešenje entropijski regularizovanog Kantorovičevog problema, sa referentnim kernelom K jednakim prelaznoj gustini Braunovog kretanja. Ovde tu vezu pretvaramo u konkretan, primenljiv algoritam.

Vredi primetiti da se ovim zatvara paralela sa JKO shemom iz odeljka 5.2. Obe konstrukcije diskretizuju kontinualnu strukturu vezanu za difuziju, ali na različit način: JKO shema diskretizuje *vreme* duž Vaserštajn gradijentnog toka, korak po korak približavajući se ravnotežnoj raspodeli, dok Sinkhornove iteracije diskretizuju *postupak nalaženja* rešenja statičkog problema, korak po korak približavajući se paru Šredingerovih potencijala. U oba

slučaja, difuzija ulazi u igru preko istog objekta, prelazne gustine K , samo iskorišćenog u dva različita algoritamska konteksta.

Ranije smo već pominjali iterativan postupak za "traženje" Šredingerovih potencijala, a sad ćemo da ga konkretizujemo korak po korak. Sistem (83) rešavamo istim postupkom kao diskretni Sinkhorn sistem (67) iz Poglavlja 4: krećući od $\psi^{(0)} \equiv 1$, naizmenično računamo

$$\varphi^{(t+1)}(x) = \frac{1}{\int K(x, y) \psi^{(t)}(y) dy}, \quad \psi^{(t+1)}(y) = \frac{d\mu_1/d\lambda(y)}{\int K(x, y) \varphi^{(t+1)}(x) d\mu_0(x)}. \quad (86)$$

Svaki korak je Bregmanova projekcija, na skup mera sa ispravnom prvom, odnosno drugom marginalom, potpuno analogno diskretnom slučaju, pa konvergencija sledi iz istog argumenta preko uopštene Pitagorine teoreme iz Poglavlja 2.

Kada su μ_0, μ_1 diskretne mere, $\mu_0 = \sum_i a_i \delta_{x_i}$, $\mu_1 = \sum_j b_j \delta_{y_j}$, iteracije (86) svode se tačno na matični Sinkhorn algoritam iz Poglavlja 4, sa jezgrom $K_{ij} = K(x_i, y_j)$ prelazne gustine, umesto proizvoljne cenovne matrice.

Primer 5.22. Neka je μ_0 raspodela mase $a = (0.2, 0.5, 0.3)$ u tačkama $x = (-1, 0, 2)$, a μ_1 raspodela mase $b = (0.3, 0.3, 0.4)$ u tačkama $y = (-0.5, 1, 1.5)$. Za referentni proces uzimamo standardno Braunovo kretanje sa $\sigma = 1$, pa je $K_{ij} = \exp(-(x_i - y_j)^2/2)$,

$$K = \begin{pmatrix} 0.8825 & 0.1353 & 0.0439 \\ 0.8825 & 0.6065 & 0.3247 \\ 0.0439 & 0.6065 & 0.8825 \end{pmatrix}.$$

Nakon pedeset iteracija (86) (u diskretnom, vektorskom obliku), vektori konvergiraju ka

$$u \approx (0.276, 0.299, 0.140), \quad v \approx (0.584, 0.988, 1.718),$$

i optimalno kuplovanje $\pi^* = \text{diag}(u) K \text{diag}(v)$ iznosi

$$\pi^* \approx \begin{pmatrix} 0.142 & 0.037 & 0.021 \\ 0.154 & 0.179 & 0.167 \\ 0.004 & 0.084 & 0.212 \end{pmatrix}.$$

Sume redova ove matrice iznose $(0.2, 0.5, 0.3) = a$, a sume kolona $(0.3, 0.3, 0.4) = b$, u skladu sa (64). Primetimo da je najveća masa transportovana duž dijagonalnih, geometrijski bliskih parova (npr. $\pi_{22}^* = 0.179$, iz $x_2 = 0$ u $y_2 = 1$), dok su daleki parovi (npr. $x_1 = -1$ u $y_3 = 1.5$) gotovo zanemarljivi, u skladu sa intuicijom da referentna difuzija favorizuje kratka rastojanja.

Primer 5.23. Ilustrujemo iteracije (86) numerički, na jednodimenzionim Gausovim marginalama $\mu_0 = \mathcal{N}(0, 1)$, $\mu_1 = \mathcal{N}(3, 1.5^2)$, za referentni proces sa $\sigma = 1$. Diskretizujemo obe raspodele na fine mreže od 200 tačaka, izračunamo Gibsovo jezgro $K(x, y) = \exp(-(x - y)^2/2\sigma^2)$ na tim mrežama, i primenimo iteracije (86) u odgovarajućem, diskretizovanom (vektorskom) obliku. Nakon 2000 iteracija, marginale optimalnog kuplovanja π^* poklapaju se sa μ_0, μ_1 do na grešku reda 10^{-17} , a njegova korelacija iznosi

$$\rho_{\text{num}} \approx 0.7208.$$

Prema teoremi iz prethodnog odeljka, π^* je rešenje entropijski regularizovanog Kantorovičevog problema sa $\varepsilon = 2\sigma^2 = 2$, čija korelacija, prema formuli (58) izvedenoj u odeljku o entropijskoj regularizaciji,

$$\rho_\varepsilon = \frac{-\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 16\sigma_1^2\sigma_2^2}}{4\sigma_1\sigma_2},$$

za $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = 1.5, \varepsilon = 2$ daje

$$\rho_{analitika} = \frac{-2 + \sqrt{4 + 36}}{6} = \frac{-2 + \sqrt{40}}{6} \approx 0.7208.$$

Numerički i analitički rezultat poklapaju se na pet decimala, čime se nezavisno potvrđuje i identitet iz prethodnog odeljka, i tačnost eksplicitne formule za entropijski regularizovan transport između Gausovih raspodela izvedene ranije u radu.

Ova teorija koju smo u radu obrađivali ima brojne primene i van matematike, a jedna od najznačajnijih primena problema Šredingerovog mosta u poslednjoj deceniji dolazi iz biologije razvoja ćelija, konkretno iz analize podataka jednoćelijskog sekvenciranja RNK (*single-cell RNA sequencing*). Ova tehnologija omogućava merenje genske ekspresije³⁸ pojedinačnih ćelija, čime se svaka ćelija predstavlja kao tačka u prostoru visoke dimenzije, tipično nekoliko hiljada koordinata, po jedna za svaki gen.

Osnovni eksperimentalni problem je sledeći: merenje genske ekspresije je destruktivno, ćelija se uništava u procesu merenja, pa je nemoguće pratiti istu ćeliju kroz vreme. Umesto toga, istraživač raspolaže nezavisnim uzorcima ćelija u različitim vremenskim trenucima, na primer μ_0 kao raspodelu ćelija embriona u ranoj fazi razvoja, i μ_1 kao raspodelu ćelija nešto kasnije, nakon što su se neke od njih diferencirale u različite ćelijske tipove. Pitanje koje biolozi postavljaju, koje su ćelije iz μ_0 dale poreklo kojim ćelijama iz μ_1 , i kojim putem u prostoru genske ekspresije su prošle, formalno je identično Šredingerovom problemu mosta: tražimo najverovatniji stohastički proces koji povezuje dva opažena preseka populacije.

Referentni proces R u ovom kontekstu modeluje pretpostavku o tome kako se genska ekspresija menja usled slučajnih bioloških fluktuacija, u odsustvu bilo kakvog dodatnog znanja, tipično standardno Braunovo kretanje u prostoru genske ekspresije, eventualno sa dodatim poznatim driftom koji opisuje rast i deobu ćelija³⁹. Rešenje π^* tada daje, za svaku ćeliju iz μ_1 , verovatnosnu raspodelu njenih mogućih "predaka" u μ_0 , dok puna dinamička formulacija, koju uvodimo u narednom odeljku, daje čitave, potencijalne putanje kroz prostor genske ekspresije, uključujući i prolazna, prelazna stanja koja nikada nisu direktno izmerena.

Metoda poznata pod imenom *Waddington-OT*, koja direktno primenjuje Sinkhornove iteracije (86) na velike skupove jednoćelijskih podataka, iskorišćena je za rekonstrukciju putanja diferencijacije matičnih ćelija, identifikaciju prekursora određenih tipova tkiva, i predviđanje efekata genetičkih intervencija na razvoj embriona [29]. Iako se prostor genske ekspresije, za razliku od naših jednostavnih primera, sastoji od hiljada dimenzija sa desetinama hiljada ćelija po vremenskom preseku, isti matični Sinkhorn algoritam, primenjen na odgovarajuće diskretizovan (empirijske raspodele) problem, ostaje računski izvodljiv upravo zbog kvadratne, a ne pseudokubne, složenosti po iteraciji koju smo pomenuli u Poglavlju 4.

³⁸Genska ekspresija označava intenzitet sa kojim je pojedinačan gen aktivan u datoj ćeliji, meren preko količine glasnike RNK koja nastaje njegovim čitanjem. Iako svaka ćelija u organizmu nosi isti genetski kod, različite ćelije koriste ("ekspimiraju") različite delove tog koda u različitoj meri, u zavisnosti od svoje funkcije, pa vektor ekspresije svih posmatranih gena, tipično nekoliko hiljada, prirodno smešta svaku ćeliju u tačku visokodimenzionog prostora $\mathbb{R}^n$.

³⁹Standardni optimalni transport, koji smo koristili kroz ceo rad, pretpostavlja da je ukupna masa očuvana, μ_0 i μ_1 su obe verovatnosne mere. Ćelijske populacije, međutim, rastu i izumiru tokom razvoja, pa autori koriste tzv. *nebalansirani* optimalni transport, uopštenje koje dozvoljava da se deo mase "stvori" ili "uništi" tokom transporta, uz dodatnu kaznu za takve promene mase.

5.6 Problem Šredingerovog mosta kao stohastička diferencijalna jednačina

Statička formulacija problema Šredingerovog mosta opisuje P^* preko njegovih marginala u $t = 0$ i $t = 1$, ali ne kaže ništa eksplicitno o tome kako proces X_t evoluirá između ta dva trenutka. Cilj ovog odeljka je da pokažemo da X_t , pod merom P^* , jeste rešenje stohastičke diferencijalne jednačine, sa driftom određenim Šredingerovim potencijalima, čime problem Šredingerovog mosta dobija dinamičku, konstruktivnu formulaciju, direktno povezanu sa difuzionim procesima iz Poglavlja 3.

Ključan tehnički korak je proširenje Šredingerovih potencijala φ, ψ , definisanih u $t = 0$ i $t = 1$, na funkcije svih vremenskih trenutaka $t \in [0, 1]$.

Definicija 5.24. *Neka je R referentni proces sa generatorom $\mathcal{L}$ i njemu adjungovanim operatorom $\mathcal{L}^*$ iz Poglavlja 3, i neka je $K_{0,t}(x, y)$ prelazna gustina R od trenutka 0 do trenutka t . Vremenski zavisni Šredingerovi potencijali su*

$$\varphi_t(y) := \int_{\mathbb{R}^n} \varphi(x) K_{0,t}(x, y) dx, \quad \psi_t(x) := \mathbb{E}_R[\psi(X_1) \mid X_t = x], \quad (87)$$

gde su φ, ψ potencijali iz (82).

Ova dva potencijala evoluiraju po dualnim jednačinama, u skladu sa dualnošću generatora i adjungovanog operatora iz Poglavlja 3: ψ_t , kao uslovno očekivanje, zadovoljava Kolmogorovljevú jednačinu unazad, sa terminalnim uslovom u $t = 1$,

$$\partial_t \psi_t + \mathcal{L} \psi_t = 0, \quad \psi_1 = \psi, \quad (88)$$

dok φ_t , zadovoljava Foker-Plank tip jednačine, sa adjungovanim operatorom $\mathcal{L}^*$ i početnim uslovom u $t = 0$,

$$\partial_t \varphi_t = \mathcal{L}^* \varphi_t, \quad \varphi_0 = \varphi. \quad (89)$$

Pre nego što predemo na samu stohastičku diferencijalnu jednačinu, izdvajamo jedan rezultat (bez dokaza) koji ćemo koristiti dvaput: jednom odmah, u dokazu dela teoreme koja sledi, i ponovo kasnije, u Gausovom primeru, gde će nam dati eksplicitnu, zatvorenu formu za ρ_t bez potrebe da rešavamo Foker-Plank jednačinu direktno.

Lema 5.25. *Gustina ρ_t raspodele X_t pod P^* zadovoljava*

$$\rho_t(x) \propto \varphi_t(x) \psi_t(x), \quad t \in [0, 1], \quad (90)$$

gde konstanta proporcionalnosti ne zavisi od x .

Napomena 5.26. *Definicija potencijala ψ_t preko uslovnog očekivanja nije proizvoljna: ona istovremeno obezbeđuje da se ψ_t poklapa sa originalnim potencijalom u terminalnoj tački, $\psi_1 = \psi$, i da je proces $\psi_t(X_t)$ martingal pod R , prema zakonu iteriranog očekivanja. Upravo ovo drugo svojstvo omogućava prepoznavanje Girsanovljevog eksponencijalnog martingala u dokazu koji sledi. Potencijal φ_t , definisan preko propagiranja kroz adjungovani operator, zadovoljava analogan uslov $\varphi_0 = \varphi$, ali nije martingal pod R posmatran u istom smeru vremena (može se lako pokazati da je $\varphi_{1-t}(\bar{X}_t)$ martingal, odnosno da je φ martingal u obrnutom vremenu). Njegova uloga u konstrukciji backward jednačine (92) zahteva formalnu obrnutost procesa u vremenu, na koju se kratko osvrćemo u nastavku.*

Teorema 5.27. *Neka je R standardno Braunovo kretanje sa difuzionim koeficijentom σ . Pod merom P^* , proces X_t je rešenje stohastičke diferencijalne jednačine*

$$dX_t = \sigma^2 \nabla \log \psi_t(X_t) dt + \sigma dW_t^*, \quad X_0 \sim \mu_0, \quad (91)$$

gde je W_t^* standardno Braunovo kretanje pod P^* . Posmatran u obrnutom vremenu, $\overleftarrow{X}_s := X_{1-s}$, proces zadovoljava

$$d\overleftarrow{X}_s = \sigma^2 \nabla \log \varphi_{1-s}(\overleftarrow{X}_s) ds + \sigma d\overleftarrow{W}_s, \quad \overleftarrow{X}_0 \sim \mu_1, \quad (92)$$

gde je $\overleftarrow{W}_s$ standardno Braunovo kretanje u odnosu na filtraciju vremenski obrnutog procesa.

Dokaz. *Dokazujemo (91). Primenimo Itovu formulu na proces $\psi_t(X_t)$, gde X_t evoluira pod referentnim procesom R , $dX_t = \sigma dW_t$:*

$$d\psi_t(X_t) = \left[\partial_t \psi_t(X_t) + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \psi_t(X_t) \right] dt + \sigma \nabla \psi_t(X_t) \cdot dW_t.$$

Izraz u uglastoj zagradi je $\partial_t \psi_t + \mathcal{L} \psi_t$, koji je, prema (88), identički nula. Sledi

$$d\psi_t(X_t) = \sigma \nabla \psi_t(X_t) \cdot dW_t,$$

odnosno $\psi_t(X_t)$ je, pod R , lokalni martingal. Definišimo

$$M_t := \frac{\psi_t(X_t)}{\psi_0(X_0)}, \quad M_0 = 1.$$

Iz prethodnog identiteta,

$$dM_t = \frac{d\psi_t(X_t)}{\psi_0(X_0)} = M_t \cdot \sigma \nabla \log \psi_t(X_t) \cdot dW_t,$$

što je Girsanovljev eksponencijalni martingal iz Poglavlja 3, sa $u_t = \sigma \nabla \log \psi_t(X_t)$. Prema Girsanovljevoj teoremi, pod merom $\tilde{P}$ definisanom sa $d\tilde{P}/dR|_{\mathcal{F}_t} = M_t$, proces

$$W_t^* := W_t - \int_0^t \sigma \nabla \log \psi_s(X_s) ds$$

je standardno Braunovo kretanje. Iz $dX_t = \sigma dW_t = \sigma dW_t^* + \sigma^2 \nabla \log \psi_t(X_t) dt$ sledi (91), pod merom $\tilde{P}$. Pošto je $M_0 = 1$ identički, promena mere ne utiče na raspodelu X_0 , koja ostaje μ_0 . Preostaje da se pokaže da je $\tilde{P} = P^*$, što zahteva proveru da X_1 pod $\tilde{P}$ ima raspodelu μ_1 . Ova provera koristi drugi potencijal φ kroz sistem (83), i detaljno je izvedena u Léonard [24].

Jednačina (92) ne sledi istim argumentom, pošto $\varphi_t(X_t)$, kao što smo приметили, nije martingal pod R u originalnom vremenu. Umesto toga, dokaz zahteva formalno obrtanje procesa u vremenu: pokazuje se da, ako X_t zadovoljava (91) sa gustinom ρ_t u trenutku t , proces $\overleftarrow{X}_s := X_{1-s}$ zadovoljava SDE sa driftom $\sigma^2 \nabla \log \varphi_{1-s}(\overleftarrow{X}_s) + \sigma^2 \nabla \log \rho_{1-s}(\overleftarrow{X}_s)$, u odnosu na Braunovo kretanje obrnute filtracije. Koristeći da je $\rho_t \propto \varphi_t \psi_t$ (90), ovaj drift se svodi na $\sigma^2 \nabla \log \varphi_{1-s}(\overleftarrow{X}_s)$, čime se dobija (92). Potpun dokaz vremenskog obrtanja difuzionih procesa dat je u Anderson [3], Haussmann and Pardoux [17].

Jednačine (91) i (92) nazivaju se "napred-nazad sistem" problema Šredingerovog mosta: "napred" jednačina, sa driftom $\sigma^2 \nabla \log \psi_t$, opisuje evoluciju iz poznatog μ_0 ka nepoznatom stanju u $t = 1$, dok "nazad" jednačina, sa driftom $-\sigma^2 \nabla \log \varphi_t$, opisuje istu putanju posmatranu iz suprotnog smera, iz poznatog μ_1 unazad. Ova dva opisa nisu nezavisna, već predstavljaju istu meru P^* , gledanu iz dva smera vremena, potpuno analogno onome kako φ i ψ opisuju isti proces P^* gledan sa dve strane, μ_0 i μ_1 .

Gustina ρ_t raspodele X_t pod P^* zadovoljava, prema Poglavlju 3, Foker-Plank jednačinu pridruženu procesu (91),

$$\partial_t \rho_t = -\nabla \cdot (\sigma^2 \rho_t \nabla \log \psi_t) + \frac{\sigma^2}{2} \Delta \rho_t.$$

Proces (91) je, dakle, običan difuzioni proces u smislu Poglavlja 3, sa driftom $\sigma^2 \nabla \log \psi_t$ koji zavisi od vremena, konstruisanim upravo tako da gustina ρ_t pogodi terminalni uslov $\rho_1 = \mu_1$.

Napomena 5.28. *Drift $\sigma^2 \nabla \log \psi_t(X_t)$ u (91) strukturno je istog oblika kao tzv. score funkcija koja se uči u modernim difuzionim generativnim modelima, gradijent logaritma gustine po prostornoj promenljivoj $\nabla_x \log \rho_t(x)$. Vredi naglasiti da ovo nije isti objekat kao skor funkcija iz informacione geometrije u Poglavlju 2, koja je izvod log-verodostojnosti po parametru θ , a ne po prostornoj promenljivoj, oba pojma dele isto ime iz istorijskih razloga i opštu formu $\nabla \log(\cdot)$, ali deluju na različitim promenljivima i u različitim kontekstima. Širi značaj ove veze sa difuzionim generativnim modelima komentarišemo u zaključku rada.*

5.7 Spektralni jaz i brzina konvergencije

Kroz ceo rad koristili smo iterativne postupke koji konvergiraju ka tačnom rešenju tek u granici beskonačno mnogo koraka: konvergenciju difuzionog procesa ka stacionarnoj raspodeli, i Sinkhornove iteracije iz Poglavlja 4 i odeljka 5.5. Pitanje brzine te konvergencije, koliko je koraka zaista potrebno da bismo se približili rešenju na zadatu tačnost, jednako je važno kao i sama činjenica da konvergencija postoji.

Pre nego što pređemo na novi rezultat ovog odeljka, sumiramo na jednom mestu ono što smo o brzini konvergencije difuzionih procesa već izveli u Poglavlju 3, jer nam je to potrebno u nastavku. Za samoadjungovan generator $\mathcal{L}$ na $L^2(\pi)$, sa diskretnim spektrom $0 = \lambda_0 > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$, spektralni jaz je

$$\text{gap} := \lambda_0 - \lambda_1 = -\lambda_1 > 0$$

(definicija (39)). Ova veličina kontroliše dve nejednakosti. Poenkareova nejednakost (40), koja kaže da za $f \in L^2(\pi)$ sa $\mathbb{E}_\pi[f] = 0$,

$$D_\pi(f) \leq \frac{1}{\text{gap}} \mathcal{E}(f, f),$$

gde je $\mathcal{E}$ Dirihleova forma. Logaritamska Soboljevljeva nejednakost (41), koja kaže da postoji konstanta $C > 0$ takva da za svaku raspodelu ρ ,

$$D_{KL}(\rho \parallel \pi) \leq \frac{C}{2} I(\rho),$$

gde je $I(\rho)$ relativna Fišerova informacija (37). Kombinujući ovu nejednakost sa identitetom disipacije entropije (38), $\frac{d}{dt} D_{KL}(\rho_t \parallel \pi) = -I(\rho_t)$, dobija se eksponencijalna konvergencija

$$D_{KL}(\rho_t \parallel \pi) \leq e^{-2t/C} D_{KL}(\rho_0 \parallel \pi).$$

Za opštu meru π , konstanta C nije nužno jednaka $1/\text{gap}$, već zavisi i od dodatnih svojstava π , tzv. Bakri-Emerijevog uslova zakrivljenosti. Za Gausovu stacionarnu raspodelu, međutim, ova dva broja se poklapaju: u odeljku o Ornštajn-Ulenbek procesu pokazali smo, preko eksplisitnog spektra generatora izračunatog uz pomoć Hermitovih polinoma (48), da je $\text{gap} = \theta$, formula (49), odakle $C = 1/\theta$ i

$$D_{KL}(\rho_t \parallel \pi) \leq e^{-2\theta t} D_{KL}(\rho_0 \parallel \pi),$$

formula (50). Ovim je pitanje brzine konvergencije difuzionog procesa ka ravnoteži u potpunosti odgovoreno; preostaje da istu vrstu preciznosti postignemo za Sinkhornov algoritam. Setimo se opšte ocene brzine konvergencije Sinkhornovog algoritma iz Poglavlja 4: za kernel K sa strogo pozitivnim elementima, iteracije (67) konvergiraju geometrijski, sa stopom $\kappa = \tanh(\Delta/4)$, gde je Δ dijametar skupa $\log K_{ij}$ u Hilbertovoj projektivnoj metriki, formula (69). Ova ocena je opšta, ne koristi nikakvu specifičnu strukturu K osim pozitivnosti, i zato ne otkriva direktnu vezu sa spektralnim jazom generatora. U kontekstu problema Šredingerovog mosta, gde je K prelazna gustina difuzionog procesa, možemo dati precizniju, direktno geometrijsku ocenu.

Podsetimo se da je, prema (34), prelazna gustina standardnog Braunovog kretanja p_t upravo jezgro operatora $e^{t\mathcal{L}}$, gde je $\mathcal{L} = \frac{\sigma^2}{2}\Delta$ generator tog procesa: za svaku dovoljno regularnu f , $(e^{t\mathcal{L}}f)(x) = \int p_t(x-y)f(y)dy$. Kernel $K(x, y) = p_1(y-x)$ koji se pojavljuje u statičkoj formulaciji problema Šredingerovog mosta je, dakle, jezgro operatora $e^{\mathcal{L}}$, primenjenog na vremenski interval dužine 1.

Tvrđenje 5.29. *Neka je $\mathcal{L}$ generator referentnog procesa R , samoadjungovan na $L^2(\pi)$ za neku stacionarnu meru π , sa spektralnim jazom gap . Tada singularne vrednosti operatora $e^{\mathcal{L}}$, posmatranog kao integralni operator sa jezgrom K , opadaju eksponencijalno,*

$$\sigma_k(e^{\mathcal{L}}) = e^{\lambda_k}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (93)$$

gde su λ_k sopstvene vrednosti $\mathcal{L}$. Posebno, odnos druge i prve singularne vrednosti je

$$\frac{\sigma_1(e^{\mathcal{L}})}{\sigma_0(e^{\mathcal{L}})} = e^{\lambda_1 - \lambda_0} = e^{-\text{gap}}. \quad (94)$$

Dokaz. Pošto je $\mathcal{L}$ samoadjungovan, spektralna teorema daje ortonormiranu bazu sopstvenih funkcija $\{\varphi_k\}$ sa $\mathcal{L}\varphi_k = \lambda_k\varphi_k$. Operator $e^{\mathcal{L}}$, definisan funkcionalnim računom, ima iste sopstvene funkcije, sa sopstvenim vrednostima e^{λ_k} , što je (93); pošto je $e^{\mathcal{L}}$ samoadjungovan i pozitivan (jer je $\mathcal{L}$ nepozitivan), njegove sopstvene vrednosti se poklapaju sa singularnim vrednostima. Formula (94) sledi direktno, koristeći $\lambda_0 = 0$ i $\lambda_1 = -\text{gap}$.

Odnos (94) je upravo veličina koja, u standardnoj teoriji konvergencije Sinkhornovog algoritma, kontroliše dijametar Δ iz Hilbertove projektivne metrike: manji odnos σ_1/σ_0 , odnosno veći spektralni jaz (gap), znači da je K "koncentrisanije" oko svoje dominantne sopstvene funkcije, što direktno ubrzava konvergenciju naizmeničnih Bregmanovih projekcija. Preciznije, postoji konstanta $c > 0$, nezavisna od gap , takva da

$$\kappa \leq 1 - c \cdot \text{gap} + O(\text{gap}^2), \quad \text{gap} \rightarrow 0, \quad (95)$$

videti Franklin and Lorenz [16] za precizan oblik konstante c . Sinkhornove iteracije za problem Šredingerovog mosta, dakle, konvergiraju brže upravo za one referentne procese čija difuzija ima veći spektralni jaz, isti onaj koji kontroliše i brzinu konvergencije same difuzije ka ravnoteži.

Primer 5.30. Neka su μ_0, μ_1 uniformne raspodele na $[0, 1]$, diskretizovane na $n = 60$ tačaka, sa $\varepsilon = 0.8$. Birkhoffov dijametar kernela iznosi $\Delta = 2.5$, znatno manji nego u slučaju neograničenog Gausovog nosača, odakle

$$\kappa_{teorija} = \tanh(\Delta/4) = \tanh(0.625) \approx 0.555.$$

Ova vrednost daje konačnu, upotrebljivu garanciju: da bi greška marginala pala ispod 10^{-8} , teorija garantuje da je dovoljno najviše 16 iteracija, dok je stvarno, empirijski, dovoljno svega 3. Teorijska granica je, dakle, konzervativna, kao što i treba da bude garantovana gornja granica, ali za razliku od primera sa neograničenim nosačem, ovde ostaje informativna: red veličine broja potrebnih iteracija je ispravno predviđen, umesto da bude beskonačan ili astronomski veliki. Ključna razlika je ograničenost nosača: Birkhoffov dijametar raste sa rasponom vrednosti C_{ij}/ε preko celog domena, pa je kompaktan, ograničen nosač uslov pod kojim opšta teorija konvergencije Sinkhornovog algoritma daje praktično korisne rezultate.

Vredi, međutim, odmah napomenuti da ova veza, iako kvalitativno tačna, može u praksi biti kvantitativno beskorisna za kernele neograničenog nosača, kao što sledeći primeri pokazuju.

Primer 5.31. Za standardno Braunovo kretanje sa difuzionim koeficijentom σ , koje smo koristili kroz ceo rad kao referentni proces za problem Šredingerovog mosta, generator $\mathcal{L} = \frac{\sigma^2}{2}\Delta$ na celom $\mathbb{R}^n$ nema diskretan spektar niti stacionarnu raspodelu, pa se (94) ne primenjuje direktno. Ako, umesto toga, kao referentni proces uzmemo Ornštajn-Ulenbek proces sa parametrom θ (koji ima diskretan spektar i Gausovu stacionarnu raspodelu), spektralni jaz je $\text{gap} = \theta$, formula (49), pa (94) daje eksplicitan odnos singularnih vrednosti kernela $e^{-\theta}$. Ovaj primer pokazuje da izbor referentnog procesa u formulaciji problema Šredingerovog mosta nije samo modelirajuća pretpostavka, već direktno određuje i numeričku efikasnost Sinkhornovog algoritma koji se koristi za njegovo rešavanje.

Primer 5.32. Vratimo se na Gausov primer iz odeljka 5.5. Direktnim izračunavanjem Birkhoffovog kontrakcionog koeficijenta za diskretizovani kernel K na mreži koja pokriva ± 6 standardnih devijacija svake marginale, dobija se dijametar $\Delta \approx 210$, odakle $\kappa = \tanh(\Delta/4) \approx 1$: teorijska ocena (69) je, dakle, potpuno beskorisna, garantuje samo da konvergencija postoji, bez ikakve upotrebljive procene brzine. Uzrok je u tome što Birkhoffov koeficijent meri najgori mogući odnos $K_{ij}K_{kl}/(K_{il}K_{kj})$ preko svih parova tačaka na mreži, uključujući i one duboko u repovima Gausovih marginala, gde je K_{ij} zanemarljivo malo; ovakav najgori slučaj nikada se realno ne ostvaruje, pošto je gotovo sva masa marginalnih raspodela koncentrisana daleko od tih tačaka.

Empirijski izmerena stopa konvergencije, dobijena praćenjem greške marginala kroz iteracije, iznosi $\kappa_{emp} \approx 0.520$, i daje realan broj potrebnih iteracija: greška pada ispod 10^{-9} već nakon približno 25 iteracija, u odnosu na 2000 korišćenih u primeru 5.23 radi sigurnosti. Ovaj primer pokazuje suštinsko ograničenje opštih, garantovanih ocena konvergencije za kernele neograničenog nosača poput Gausovog: teorijska granica, iako matematički korektna, može biti proizvoljno labava, pa se u praksi brzina Sinkhornovog algoritma procenjuje empirijski, direktnim praćenjem greške marginala kroz iteracije, kao dopuna, ne zamena, teorijskim garancijama iz Poglavlja 4.

Razlika između ovih primera leži u ponašanju Birkhoffovog dijametara Δ za neograničen naspram ograničen nosač. Za kernel $K(x, y) = \exp(-(x - y)^2/\varepsilon)$, dijametar Δ raste, grubo

govoreći, kvadratno sa prečnikom domena na kome je kernel definisan, jer Birkhofov koeficijent uzima maksimum po svim parovima tačaka na mreži, uključujući proizvoljno udaljene tačke u repovima raspodele, gde je K_{ij} eksponencijalno mala. Za Gausove marginale, ovakvi ekstremni parovi tačaka teorijski postoje na celoj realnoj pravoj, i "kažnjavaju" Birkhofov dijametar, iako nose zanemarljivo malo mase pod μ_0, μ_1 i algoritam ih praktično nikada ne "oseti". Za marginale sa kompaktnim, ograničenim nosačem, ovakvi proizvoljno udaljeni parovi ne postoje, pa dijametar ostaje umeren i granica (69) ostaje upotrebljiva. Suštinski, teorijska granica je "najgori slučaj" garancija, važeća za svaki mogući izbor težina sa datim nosačem kernela, uključujući degenerisane slučajeve gde bi masa mogla biti skoncentrisana u ekstremnim, udaljenim tačkama. Za realne, koncentrisane raspodele poput Gausove, ova garancija je preterano pesimistična, jer ne koristi informaciju da je konkretan izbor μ_0, μ_1 znatno "blaži" od najgoreg mogućeg slučaja.

5.8 Gausov primer

Zaokružujemo rad eksplcitnim, zatvorenim računom na Gausovoj familiji, primeru koji nas je pratio kroz sva prethodna poglavlja. Za razliku od opšteg, višedimenzionog slučaja, ograničavamo se ovde na jednodimenzione Gausove marginale

$$\mu_0 = \mathcal{N}(m_0, s_0^2), \quad \mu_1 = \mathcal{N}(m_1, s_1^2),$$

jer se u ovom slučaju sve veličine koje smo uveli, Fišerova metrika, Vaserštajn rastojanje, entropijski optimalni transport i problem Šredingerovog mosta, izražavaju zatvorenom formom, bez potrebe za dodatnom aparaturom linearne algebre koju bi zahtevao višedimenzioni slučaj.

Za referentni proces problema Šredingerovog mosta uzimamo standardno Braunovo kretanje sa difuzionim koeficijentom σ , Ornštajn-Ulenbek proces uvodimo tek na kraju odeljka, isključivo u vezi sa spektralnim jazom, jer standardno Braunovo kretanje na celom $\mathbb{R}$, kao što smo napomenuli u Poglavlju 3, nema diskretan spektar niti stacionarnu raspodelu.

Krenimo od informacione geometrije. Prema formuli (14) iz Poglavlja 2, geodezijsko rastojanje između μ_0 i μ_1 u Fišerovoj metrici dato je zatvorenom formom preko hiperboličke geometrije Poenkareove poluravni, potpuno nezavisno od bilo kakvog transporta mase, mereno isključivo statističkom udaljenošću dve raspodele.

Vaserštajn geometrija daje drugačiju, geometrijsku meru rastojanja. Optimalno preslikavanje između dve jednodimenzione Gausove raspodele je linearno, $T(x) = m_1 + \frac{s_1}{s_0}(x - m_0)$, sa transportnim troškom $\int (x - T(x))^2 d\mu_0(x) = s_0^2 \left(\frac{s_1}{s_0} - 1 \right)^2 = (s_0 - s_1)^2$, odakle

$$W_2^2(\mu_0, \mu_1) = (m_0 - m_1)^2 + (s_0 - s_1)^2. \quad (96)$$

Za razliku od Fišerovog rastojanja, ova veličina meri koliko je "fizički daleko" potrebno premestiti masu, i, kao što smo videli u Poglavlju 4, ne poklapa se sa Fišerovim rastojanjem, iako oba mere razliku iste dve mera.

Treća perspektiva, entropijski regularizovan optimalni transport, spaja ova dva sveta. Prema formuli (58) iz Poglavlja 4, optimalno entropijski regularizovano kuplovanje μ_0 i μ_1 je samo Gausova raspodela (u ovom slučaju dvodimenziona) sa korelacijom

$$\rho_\varepsilon = \frac{-\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 16s_0^2s_1^2}}{4s_0s_1}. \quad (97)$$

Prema teoremi iz odeljka 5.4, marginala problema Šredingerovog mosta sa referentnim Braunovim kretanjem difuzionog koeficijenta σ jednaka je rešenju ovog istog problema, sa

$$\varepsilon = 2\sigma^2. \quad (98)$$

Upravo u ovoj vezi, formuli (98), spajaju se Poglavlje 4 i Poglavlje 5: entropijska regularizacija optimalnog transporta i problem Šredingerovog mosta nisu samo srodni, već su, za Gausove marginale, opisani istom, eksplicitnom formulom. Za $s_0 = 1, s_1 = 1.5, \sigma = 1$, ova formula daje $\rho_\varepsilon \approx 0.7208$, vrednost koju smo ranije, u odeljku 5.5, nezavisno potvrdili numeričkim Sinkhornovim iteracijama do na pet decimala.

Poslednji korak je da eksplicitno konstruišemo celu dinamiku mosta, bez direktnog rešavanja Foker-Plank jednačine. Neka je $c_0 := \rho_\varepsilon s_0 s_1$ kovarijansa optimalnog kuplovanja. Tražimo Gausov proces $\rho_t = \mathcal{N}(m_t, s_t^2)$, $t \in [0, 1]$, sa graničnim uslovima $\rho_0 = \mu_0$, $\rho_1 = \mu_1$.

Tvrđenje 5.33. *Marginala problema Šredingerovog mosta između μ_0 i μ_1 , sa referentnim Braunovim kretanjem difuzionog koeficijenta σ , data je sa $\rho_t = \mathcal{N}(m_t, s_t^2)$, gde je*

$$m_t = (1-t)m_0 + tm_1, \quad s_t^2 = (1-t)^2 s_0^2 + t^2 s_1^2 + 2t(1-t)c_0 + \sigma^2 t(1-t). \quad (99)$$

Dokaz. Prema dokazu teoreme iz odeljka 5.4, uslovna raspodela putanje P^* data krajnjim tačkama $(X_0, X_1) = (x, y)$ poklapa se sa uslovnom raspodelom referentnog procesa R , standardnog Braunovog kretanja, uslovljenog na iste krajnje tačke, tj. sa Braunovim mostom. Za Braunovo kretanje difuzionog koeficijenta σ , ovaj uslovni proces u trenutku t ima poznatu, Gausovu raspodelu,

$$X_t \mid (X_0, X_1) = (x, y) \sim \mathcal{N}\left((1-t)x + ty, \sigma^2 t(1-t)\right).$$

Marginalnu raspodelu ρ_t dobijamo mešanjem ovog uslovnog zakona preko zajedničke, statičke raspodele (X_0, X_1) , koja je, prema Poglavlju 4, sama Gausova, sa sredinama m_0, m_1 , disperzijama s_0^2, s_1^2 i kovarijansom $c_0 = \rho_\varepsilon s_0 s_1$. Pišući $X_t = (1-t)X_0 + tX_1 + \sigma\sqrt{t(1-t)}Z$, gde je $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$ nezavisno od (X_0, X_1) . X_t je kao linearna kombinacija nezavisnih Gausovih promenljivih, i sam Gausov, sa

$$m_t = \mathbb{E}[X_t] = (1-t)m_0 + tm_1,$$

$$s_t^2 = D(X_t) = (1-t)^2 s_0^2 + t^2 s_1^2 + 2t(1-t) \text{Cov}(X_0, X_1) + \sigma^2 t(1-t)$$

Odakle je,

$$s_t^2 = (1-t)^2 s_0^2 + t^2 s_1^2 + 2t(1-t)c_0 + \sigma^2 t(1-t),$$

čime je (99) pokazano. Za $t = 0$ i $t = 1$, član $\sigma^2 t(1-t)$ iščezava, i preostaju tačno $v_0 = s_0^2$, $v_1 = s_1^2$, u skladu sa graničnim uslovima. Primetimo da je doprinos same difuzije, $\sigma^2 t(1-t)$, simetrična, konkavna funkcija na $[0, 1]$, koja dostiže svoj maksimum $\sigma^2/4$ upravo u sredini intervala, $t = 1/2$: most je najviše "raširen" oko svoje centralne putanje tačno na pola puta između μ_0 i μ_1 , dok se pri krajevima difuzioni doprinos gasi, prinuđen graničnim uslovima da tačno pogodi μ_0 , odnosno μ_1 .

Formula (99) je izuzetno rečita: disperzija mosta u svakom trenutku sadrži tačno tri doprinosa, prvi od početne raspodele, drugi od krajnje raspodele, i treći, isključivo pozitivan, od same difuzije, koja dodatno "razmazuje" most nezavisno od toga koliko su μ_0 i μ_1 same razudene.

Preostaje da odredimo sam proces X_t , ne samo njegovu gustinu. Prema teoremi iz odeljka 5.6, X_t je rešenje SDE sa driftom $\sigma^2 \nabla \log \psi_t$. Pošto je ρ_t Gausova, prirodno tražimo linearan drift,

$$b_t(x) = A_t x + B_t. \quad (100)$$

Za linearnu SDE $dX_t = (A_t X_t + B_t) dt + \sigma dW_t$, standardan račun (primenom Itove formule na X_t i X_t^2) daje da momenti $m_t = \mathbb{E}[X_t]$, $s_t^2 = \text{D}(X_t)$ zadovoljavaju sistem običnih diferencijalnih jednačina

$$\frac{\partial m_t}{\partial t} = A_t m_t + B_t, \quad \frac{\partial s_t^2}{\partial t} = 2A_t s_t^2 + \sigma^2.$$

Rešavajući ovaj sistem po A_t, B_t , koristeći da su m_t, s_t^2 već poznati iz (99),

$$A_t = \frac{\frac{\partial s_t^2}{\partial t} - \sigma^2}{2s_t^2}, \quad B_t = (m_1 - m_0) - A_t m_t. \quad (101)$$

Za $s_0 = 1, s_1 = 1.5, m_0 = 0, m_1 = 3, \sigma = 1$, direktnim numeričkim proračunom, s_t^2 ostaje strogo pozitivno na celom $[0, 1]$ (od 1 do 2.25), pa je A_t dobro definisano svuda; simulacija SDE (100), 20000 nezavisnih putanja daje uzoračku sredinu i disperziju u $t = 0.5$ i $t = 1$ koje se poklapaju sa (99) do na statističku grešku Monte Karlo metode, čime je konstrukcija nezavisno numerički potvrđena.

Pošto je $b_t(x) = \sigma^2 \partial_x \log \psi_t(x)$, integracijom linearnog drifta (100) po x dobija se eksplicitan oblik Šredingerovog potencijala,

$$\psi_t(x) = C_t \exp \left(\frac{A_t}{2\sigma^2} x^2 + \frac{B_t}{\sigma^2} x \right), \quad (102)$$

za odgovarajuću normalizacionu konstantu C_t . Po formuli 90, $\rho_t \propto \varphi_t \psi_t$, drugi potencijal φ_t dobija se direktno kao količnik ρ_t / ψ_t , takođe Gausovog oblika u x , čime je cela dinamika problema Šredingerovog mosta, "napred" drifta, "nazad" drifta, i gustina u svakom trenutku, izražena zatvorenim formom, bez ijednog koraka numeričkog rešavanja parcijalne diferencijalne jednačine.

Konačno, vraćamo se pitanju brzine kojom se ovakav proces, posmatran kao deo veće difuzije, približava ravnoteži. U tu svrhu, umesto Braunovog kretanja, posmatramo Ornštajn-Ulenbek proces sa parametrom θ kao referentni proces, čiji smo spektar, spektralni jaz $\text{gap} = \theta$, i brzinu konvergencije $D_{KL}(\rho_t || \pi) \leq e^{-2\theta t} D_{KL}(\rho_0 || \pi)$ već izveli u Poglavlju 3, formule (48) i (50). Ista veličina, $\text{gap} = \theta$, prema odeljku 5.7, kontroliše i teorijsku ocenu brzine konvergencije Sinkhornovog algoritma primenjenog na entropijski regularizovan transport između istih Gausovih marginala. Na ovaj način, spektralni jaz jednog te istog generatora istovremeno određuje brzinu kojom difuzija zaboravlja svoj početni uslov, brzinu kojom Sinkhornove iteracije pronalaze Šredingerove potencijale, i, preko formule (97), samu geometriju entropijski optimalnog kuplovanja koje čitav most određuje. Time se, na jednom, potpuno eksplicitnom primeru, zatvara krug između informacione geometrije, teorije optimalnog transporta i difuzionih procesa, najavljen u uvodu ovog rada.

6 Zaključak

Krenuli smo od pitanja koje deluje jednostavno: kako meriti razliku između dve raspodele verovatnoće, i kako opisati prelazak iz jedne u drugu. Pokazali smo da na ovo pitanje postoje bar tri, naizgled nezavisna odgovora, informaciona geometrija, teorija difuzionih procesa i teorija optimalnog transporta, i da su ta tri odgovora, u preciznom matematičkom smislu, tri lica jedne iste geometrije na prostoru mera.

U Poglavlju 2 pokazali smo da statistička mnogostrukost Gausove familije, opremljena Fišerovom metrikom, nije proizvoljna konstrukcija, već izometrična hiperboličkoj ravni, i da dualne, e -konekcije i m -konekcije, zajedno sa Bregmanovim divergencijama i uopštenom Pitagorinom teoremom, čine geometrijski temelj na kome počiva sve što je usledilo. U Poglavlju 3 razvili smo istu vrstu dualnosti u kontekstu difuzionih procesa, generatora koji deluje na funkcije i njemu adjungovanog operatora koji deluje na mere, i pokazali da spektralni jaz generatora određuje brzinu kojom difuzija zaboravlja početni uslov i približava se ravnoteži. U Poglavlju 4 preformulisali smo Kantorovičev problem kroz entropijsku regularizaciju, pokazali da je rešenje uvek oblika naizmeničnih Bregmanovih projekcija, i da Sinkhorn algoritam, nastao šezdesetak godina pre nego što je povezan sa optimalnim transportom, rešava upravo taj problem.

Poglavlje 5 spojilo je sve tri niti. Oto kalkulus dao je Vaserštajn prostoru formalnu Rimanovu strukturu, u kojoj se Foker-Plank jednačina prepoznaje kao gradijentni tok funkcionala slobodne energije, čiji entropijski deo je direktno pozajmljen iz informacione geometrije. Problem Šredingerovog mosta, postavljen kao pitanje o najverovatnijem putu oblaka čestica, pokazao se matematički identičnim entropijski regularizovanom optimalnom transportu, a njegova dinamička formulacija dala je eksplicitnu vezu sa "napred-nazad" sistemom stohastičkih diferencijalnih jednačina. Na kraju, spektralni jaz istog generatora koji kontroliše konvergenciju difuzije pokazao se relevantnim i za brzinu konvergencije Sinkhornovog algoritma, a Gausov primer, praćen kroz ceo rad, dozvolio je da se sve ove veze, od Fišerove metrike do eksplicitnog drifta Šredingerovog mosta, izraze zatvorenom formom u jednoj, jedinstvenoj slici.

Veza koju smo razvili nije samo teorijska. U poslednjoj deceniji, entropijski regularizovan optimalni transport i problem Šredingerovog mosta postali su centralni alat u savremenom mašinskom učenju, konkretno u difuzionim generativnim modelima. Ovi modeli uče da generišu podatke, slike, tekst, zvuk, tako što postepeno dodaju šum podacima dok raspodela ne postane približno Gausova, a zatim treniraju neuronsku mrežu da tu difuziju obrne, koristeći upravo drift oblika $\nabla \log \rho_t$, strukturno identičan Šredingerovom potencijalu koji smo eksplicitno izračunali u odeljku 5.8, pogledati [12],[18],[31] za dublji kontekst. Ograničenje ovog pristupa, da referentni proces mora dovoljno dugo da evoluiru kako bi krajnja raspodela postala približno Gausova, direktno je prevaziđeno primenom problema Šredingerovog mosta: umesto da se oslanja na asimptotsko približavanje ravnoteži, most po konstrukciji spaja dve zadate raspodele u konačnom vremenu, čime se generativni proces čini brzim i preciznim [12]. Pored generativnog modelovanja, istu teoriju koristili smo, u odeljku 5.5, i za rekonstrukciju putanja razvoja ćelijskih populacija iz podataka jednoćelijskog sekvenciranja, primer koji pokazuje da veza između ove tri matematičke discipline prevazilazi granice same matematike.

Rad je pokazao da su informaciona geometrija, teorija optimalnog transporta i difuzioni procesi, uprkos različitim istorijskim korenima, statistici, ekonomiji i fizici, u suštini tri jezika za opisivanje istog, dubljeg principa: kretanje kroz prostor mera prirodno sledi geodezije i gradijentne tokove geometrije koju taj isti prostor nosi. Otvorena pitanja koja

iz ovog rada proizilaze uključuju uopštenje na višedimenzione, negausove marginale, gde entropijski optimalni transport i Šredingerov most više nemaju zatvorenu formu, kao i dublju analizu veze između spektralnog jaza i brzine konvergencije modernih algoritama zasnovanih na difuziji, oblast u kojoj matematička teorija razvijena u ovom radu tek počinje da se susreće sa praktičnim izazovima mašinskog učenja u visokim dimenzijama.

Literatura

- [1] Shun-ichi Amari. *Information Geometry and Its Applications*. Springer, Tokyo, 2016.
- [2] Luigi Ambrosio, Nicola Gigli, and Giuseppe Savaré. *Gradient Flows in Metric Spaces and in the Space of Probability Measures*. Lectures in Mathematics ETH Zürich. Birkhäuser, Basel, 2005.
- [3] Brian D. O. Anderson. Reverse-time diffusion equation models. *Stochastic Processes and their Applications*, 12(3):313–326, 1982.
- [4] James W. Anderson. *Hyperbolic Geometry*. Springer, London, 2 edition, 2005.
- [5] C. Atkinson and A. F. S. Mitchell. Rao’s distance measure. *Sankhyā: The Indian Journal of Statistics, Series A*, 43(3):345–365, 1981.
- [6] Nihat Ay, Jürgen Jost, Hồng Vân Lê, and Lorenz Schwachhöfer. *Information Geometry*, volume 64 of *Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete. 3. Folge*. Springer, Cham, 2017.
- [7] Dominique Bakry, Ivan Gentil, and Michel Ledoux. *Analysis and Geometry of Markov Diffusion Operators*, volume 348 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, Cham, 2014.
- [8] Yann Brenier. Décomposition polaire et réarrangement monotone des champs de vecteurs. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences, Série I*, 305:805–808, 1987.
- [9] Ariel Caticha. The basics of information geometry. *AIP Conference Proceedings*, 1641: 15–26, 2015.
- [10] Nikolai Nikolaevich Chentsov. Statistical decision rules and optimal inference. In *Translations of Mathematical Monographs*, volume 53. American Mathematical Society, Providence, RI, 1982.
- [11] Marco Cuturi. Sinkhorn distances: Lightspeed computation of optimal transport. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 26, pages 2294–2303, 2013.
- [12] Valentin De Bortoli, James Thornton, Jeremy Heng, and Arnaud Doucet. Diffusion schrödinger bridge with applications to score-based generative modeling. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 34, pages 17695–17709, 2021.
- [13] Amir Dembo and Ofer Zeitouni. *Large Deviations Techniques and Applications*. Springer, New York, 2 edition, 1998.
- [14] Manfredo P. do Carmo. *Riemannian Geometry*. Mathematics: Theory and Applications. Birkhäuser, Boston, 1992.
- [15] Andreas Eberle. *Introduction to Stochastic Analysis*. University of Bonn Lecture Notes, Bonn, 2015.
- [16] Joel Franklin and Jens Lorenz. On the scaling of multidimensional matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 114-115:717–735, 1989.

- [17] Ulrich G. Haussmann and Étienne Pardoux. Time reversal of diffusions. *The Annals of Probability*, 14(4):1188–1205, 1986.
- [18] Jonathan Ho, Ajay Jain, and Pieter Abbeel. Denoising diffusion probabilistic models. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 33, pages 6840–6851, 2020.
- [19] E. T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics. *Physical Review*, 106(4):620–630, 1957.
- [20] Richard Jordan, David Kinderlehrer, and Felix Otto. The variational formulation of the Fokker-Planck equation. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 29(1):1–17, 1998.
- [21] Leonid V. Kantorovich. On the translocation of masses. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 37(7-8):227–229, 1942.
- [22] Andrei Kolmogoroff. Über die analytischen methoden in der wahrscheinlichkeitsrechnung. *Mathematische Annalen*, 104(1):415–458, 1931.
- [23] John M. Lee. *Introduction to Smooth Manifolds*, volume 218 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer, New York, 2 edition, 2013.
- [24] Christian Léonard. A survey of the Schrödinger problem and some of its connections with optimal transport. *arXiv preprint*, 2013. arXiv:1308.0215.
- [25] Anton Mallasto, Augusto Gerolin, and Hà Quang Minh. Entropy-regularized 2-Wasserstein distance between Gaussian measures. *Information Geometry*, 5(1):289–323, 2022.
- [26] Robert J. McCann. Existence and uniqueness of monotone measure-preserving maps. *Duke Mathematical Journal*, 80(2):309–323, 1995.
- [27] Felix Otto. The geometry of dissipative evolution equations: the porous medium equation. *Communications in Partial Differential Equations*, 26(1-2):101–174, 2001.
- [28] Grigorios A. Pavliotis. *Stochastic Processes and Applications*, volume 60 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, New York, 2014.
- [29] Geoffrey Schiebinger, Jian Shu, Marcin Tabaka, Brian Cleary, Vidya Subramanian, Aryeh Solomon, Joshua Gould, Siyan Liu, Stacie Lin, Peter Berube, Lia Lee, Jenny Chen, Justin Brumbaugh, Philippe Rigollet, Konrad Hochedlinger, Rudolf Jaenisch, Aviv Regev, and Eric S. Lander. Optimal-transport analysis of single-cell gene expression identifies developmental trajectories in reprogramming. *Cell*, 176(4):928–943, 2019.
- [30] Richard Sinkhorn. A relationship between arbitrary positive matrices and doubly stochastic matrices. *The Annals of Mathematical Statistics*, 35(2):876–879, 1964.
- [31] Yang Song and Stefano Ermon. Generative modeling by estimating gradients of the data distribution. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 32, pages 11895–11907, 2019.

- [32] Daniel W. Stroock and S. R. Srinivasa Varadhan. *Multidimensional Diffusion Processes*, volume 233 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, Berlin, 1979.
- [33] Cédric Villani. *Topics in Optimal Transportation*, volume 58 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, Providence, 2003.
- [34] Cédric Villani. *Optimal Transport: Old and New*, volume 338 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer, Berlin, 2009.
- [35] Bernt Øksendal. *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications*. Universitext. Springer, Berlin, 6 edition, 2003.