

Vers un théorème de la limite centrale dans l'espace de Wasserstein ?

Martial Agueh^a, Guillaume Carlier^b

^aUniversity of Victoria, Victoria, BC, PO Box 3060 STN CSC Victoria, BC, V8W 3R4, CANADA

^bUniversité Paris-Dauphine, PSL Research University, CNRS, CEREMADE, 75016, Paris, France and INRIA, Centre de Paris, équipe MOKAPLAN

Résumé

Les barycentres dans l'espace de Wasserstein constituent une manière naturelle d'interpoler entre plusieurs mesures de probabilité, utile dans différents domaines appliqués comme le traitement d'images ou l'apprentissage statistique. Nous conjecturons que ces barycentres obéissent à un théorème de la limite centrale que nous démontrons dans quelques cas (très) particuliers.

Abstract

Towards a central limit theorem in the Wasserstein space? The notion of Wasserstein barycenters is a natural way to interpolate between several probability measures, useful in various applied settings like image processing or machine learning. We conjecture that such barycenters obey a central limit theorem which we prove in some (very) particular cases.

Abridged English version

The 2-Wasserstein space (on \mathbb{R}^d), $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ is by definition the space of Borel probability measures on \mathbb{R}^d having finite second moments and endowed with the distance W_2

$$W_2^2(\mu, \nu) := \inf \left\{ \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |x - y|^2 d\gamma(x, y), \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\}, \forall (\mu, \nu) \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)^2 \quad (1)$$

where $\Pi(\mu, \nu)$ denotes the set of transport plans between μ and ν i.e. the set of probability measures on $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ having μ and ν as marginals. Given an integer N , ν_1, \dots, ν_N elements of $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ and positive

Email addresses: agueh@math.uvic.ca (Martial Agueh), carlier@ceremade.dauphine.fr (Guillaume Carlier).

weights $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_N) \in \mathbb{R}_+^N$ with $\sum_{i=1}^N \lambda_i = 1$, a Wasserstein barycenter of the measures ν_i with weights λ_i is a minimizer of

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

Wasserstein barycenters were introduced in a previous work [1], where it was observed that:

- the minimizer is unique (existence is obvious) as soon as one of the measures ν_i does not give mass to small sets (i.e. Borel sets of Hausdorff dimension at most $d - 1$), in this case, we may call this minimizer *the* Wasserstein barycenter of the measures ν_i with weights λ_i ,
- if for some $p \in (1, +\infty)$, *all* the measures ν_i are L^p (with respect to the Lebesgue measure) then so is their barycenter (this follows from a displacement convexity type argument in the spirit of McCann's seminal work [11]), this also holds for the limit case $p = 1$ and for $p = \infty$, it is enough that one of the measures ν_i is L^∞ .

Wasserstein barycenters found various applications in statistics, image processing and machine learning and there are fast solvers to compute them, see Cuturi [5] and Benamou et al. [2]. The concept of Wasserstein barycenter has been significantly extended by Bigot and Klein [4], Le Gouic and Loubes [10] to the case of a quite general Borel probability measure m on $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d), W_2)$ and by Kim and Pass [9] to the Riemannian setting. A Wasserstein barycenter is then a minimizer of the Wasserstein variance functional:

$$J_m(\mu) := \int_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} W_2^2(\nu, \mu) dm(\nu). \quad (3)$$

Existence of a barycenter can easily be established by the direct method of the calculus of variations (see [10]) as soon as

$$\int_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} \int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 d\nu(x) dm(\nu) < +\infty. \quad (4)$$

Uniqueness also holds provided that m gives a strictly positive mass to the set of measures which vanish on small sets. We shall always make these assumptions and then define unambiguously:

$$\text{bar}(m) := \text{argmin}_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} J_m. \quad (5)$$

If in addition, for some $p \in (1, \infty)$, m is supported by $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d) \cap L^p(\mathbb{R}^d)$ and

$$\int_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} \|\nu\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}^p dm(\nu) < +\infty \quad (6)$$

the same convexity argument as in [1] gives that $\text{bar}(m) \in L^p(\mathbb{R}^d)$. Of course (2) is a special case of (3) corresponding to a discrete m : $m = \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta_{\nu_i}$, and if one of the measures ν_i vanishes on small sets the barycenter of this discrete measure will be denoted as:

$$\text{bar}(\nu_1, \lambda_1, \dots, \nu_N, \lambda_N) = \text{bar}\left(\sum_{i=1}^N \lambda_i \delta_{\nu_i}\right) := \text{argmin}_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} \sum_{i=1}^N \lambda_i W_2^2(\nu_i, \cdot). \quad (7)$$

Following Bigot and Klein [4], we are interested in the asymptotic behavior of *empirical* Wasserstein barycenters. More precisely, let us consider m a Borel probability measure m on $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ such that for some $p \in (1, \infty)$ and some $C > 0$

$$\int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 d\nu(x) + \int_{\mathbb{R}^d} \nu(x)^p dx \leq C \text{ for } m\text{-a.e. } \nu. \quad (8)$$

Considering an i.i.d. sample of (random) probability measures $\hat{\nu}_1, \dots, \hat{\nu}_n$ drawn according to the probability measure m on $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$, the empirical Wasserstein barycenter of this sample is the random (a.s. well-defined since m gives full mass to measures which vanish on small sets) measure

$$\hat{\mu}_n := \text{bar}\left(\hat{\nu}_1, \frac{1}{n}, \dots, \hat{\nu}_n, \frac{1}{n}\right). \quad (9)$$

In the compactly supported case, Bigot and Klein [4] proved a law of large number, extended to a general setting by Le Gouic and Loubes [10], for the empirical barycenter:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) \rightarrow 0 \text{ a.s., where } \bar{\mu} := \text{bar}(m). \quad (10)$$

Since, thanks to (8) both $\bar{\mu} := \text{bar}(m)$ and $\hat{\mu}_n$ have L^p densities, there exists a unique optimal transport map for W_2 between the true barycenter $\bar{\mu}$ and the empirical barycenter $\hat{\mu}_n$ we denote by $\hat{T}_n := T_{\bar{\mu} \rightarrow \hat{\mu}_n}$ this map which may be viewed as an $L^2(\bar{\mu}, \mathbb{R}^d)$ -valued random variable. Since $W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) = \|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2$, thanks to (8) and a simple convexity argument (see [1]), one has $W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) \leq 2C$. Thanks to (10) and Lebesgue's dominated convergence theorem, we thus have

$$\|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2 \rightarrow 0 \text{ a.s. and } \mathbb{E}\left(\|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2\right) \rightarrow 0. \quad (11)$$

It is natural then to investigate whether one can go one step further in the convergence of empirical Wasserstein barycenters through some central limit theorem. The law of large numbers of Bigot and Klein gives that \hat{T}_n converges a.s. to the identity map, we believe that an L^2 estimate in $O(1/\sqrt{n})$ and asymptotic normality seem reasonable to conjecture for a wide class of measures m . Proving such a CLT even in the case of a discrete m seems a delicate issue, actually related to the regularity of solutions of an obstacle problem for a system of Monge-Ampère equations. Let us mention that a related question concerning the asymptotic distribution of the scalar quantity $\sqrt{n}W_2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu})$ and its use for statistical tests purposes has been considered in the recent works [6] and [7].

By definition, we will say that the Wasserstein CLT holds whenever $\sqrt{n}(\hat{T}_n - \text{id})$ converges in distribution (in the separable Hilbert space $L^2(\bar{\mu}, \mathbb{R}^d)$) to a centered gaussian $\mathcal{N}(0, \Sigma)$ for a certain positive self-adjoint operator Σ of trace class on $L^2(\bar{\mu}, \mathbb{R}^d)$. The following gives a positive answer in a few (very) particular cases:

Theorem 1 *The Wasserstein CLT holds in the following cases:*

- (i) $m = (1 - \lambda)\delta_{\nu_0} + \lambda\delta_{\nu_1}$ with $\lambda \in (0, 1)$, ν_0, ν_1 in $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ and ν_0 vanishing on small sets,
- (ii) $d = 1$, m satisfies (19) and gives full mass to the set of non-atomic measures,
- (iii) $m = \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta_{\nu_i}$ with each ν_i a non degenerate Gaussian on \mathbb{R}^d .

1. Introduction

L'espace de Wasserstein (sur \mathbb{R}^d), $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ est par définition l'ensemble des mesures de probabilité sur \mathbb{R}^d , de second moment fini, muni de la métrique W_2 définie par le problème de transport optimal quadratique :

$$W_2^2(\mu, \nu) := \inf \left\{ \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |x - y|^2 d\gamma(x, y), \gamma \in \Pi(\mu, \nu) \right\}, \forall (\mu, \nu) \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)^2 \quad (12)$$

où $\Pi(\mu, \nu)$ est l'ensemble des plans de transport entre μ et ν c'est-à-dire l'ensemble des mesures de probabilité sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ ayant μ et ν comme marginales (nous renvoyons aux livres de Villani [13] et Santambrogio [12] pour une présentation de la théorie du transport optimal). Soit N un entier plus grand que 1, ν_1, \dots, ν_N des éléments $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ et $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_N) \in \mathbb{R}_+^N$ des poids positifs normalisés par $\sum_{i=1}^N \lambda_i = 1$, un barycentre dans l'espace de Wasserstein des mesures ν_i avec les poids λ_i est un minimiseur de

$$J_\lambda(\mu) := \sum_{i=1}^N \lambda_i W_2^2(\nu_i, \mu). \quad (13)$$

Cette notion a été introduite dans notre travail précédent [1], dans lequel nous avons observé que :

- le minimiseur est unique (l'existence est quant à elle évidente) dès lors que l'une des mesures ν_i ne charge pas les ensembles *petits* (i.e. les Boréliens de dimension de Hausdorff au plus $d - 1$), dans ce cas, on appelle ce minimiseur *le* barycentre dans l'espace de Wasserstein des mesures ν_i avec les poids λ_i ,
- Si toutes les mesures ν_i sont dans L^p (par rapport à la mesure de Lebesgue) pour un certain $p \in (1, +\infty)$, alors il en est de même de leur barycentre (ceci découle d'un argument de type convexité par déplacement dans l'esprit du travail pionnier de McCann [11]), c'est encore valable pour le cas limite $p = 1$ et pour $p = \infty$, il suffit que l'une des mesures ν_i (pour laquelle le poids $\lambda_i > 0$ évidemment) soit dans L^∞ .

Indiquons quelques questions naturelles de régularité/stabilité dont la réponse n'est pas connue (même dans le cas un peu plus simple du tore plat) : 1) le barycentre dépend-il de manière Lipschitzienne (pour W_2) des poids λ_i ? 2) le barycentre a-t-il une densité régulière (par exemple $C^{k,\alpha}$) si c'est le cas des mesures de départ ν_i ... Les barycentres dans l'espace de Wasserstein sont relativement populaires dans différents contextes applicatifs comme le traitement d'images ou l'apprentissage statistique et peuvent se calculer numériquement efficacement voir Cuturi [5] et Benamou et al. [2].

Dans cette note, nous conjecturons que lorsque les mesures ν_i sont des mesures tirées aléatoirement et de manière i.i.d. selon une certaine loi de probabilité m sur $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ vérifiant des conditions adéquates, alors l'écart entre le *vrai* barycentre de la mesure m (voir paragraphe suivant) et le barycentre empirique obéit à un théorème de la limite centrale. Cela est un raffinement qui nous semble naturel d'un résultat de type loi des grands nombres de Bigot et Klein [4]. Nous précisons un peu les définitions dans le paragraphe suivant et établirons le théorème de la limite centrale au paragraphe 3 dans quelques cas très particuliers.

2. Barycentre empirique et vrai barycentre

La notion de barycentre dans l'espace de Wasserstein a été étendue de manière significative au cas d'une mesure Borélienne m sur \mathcal{P}_2 assez générale par Bigot and Klein [4], Le Gouic et Loubes [10] dans le cas de $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d), W_2)$ et par Kim et Pass [9] dans le cas de l'espace de Wasserstein sur une variété Riemannienne. Un barycentre Wasserstein de m est alors un minimiseur de la fonctionnelle de variance :

$$J_m(\mu) := \int_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} W_2^2(\nu, \mu) dm(\nu). \quad (14)$$

L'existence d'un tel barycentre s'obtient aisément par la méthode directe du calcul des variations (voir notamment [10]) lorsque

$$\int_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} \int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 d\nu(x) dm(\nu) < +\infty. \quad (15)$$

L'unicité est quant à elle assurée dès que m donne une mesure positive aux mesures qui ne chargent pas les ensembles petits. Sous ces hypothèses on peut donc définir sans ambiguïté

$$\text{bar}(m) := \text{argmin}_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} J_m. \quad (16)$$

Si en plus, pour un $p \in (1, \infty)$, m est portée par $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d) \cap L^p(\mathbb{R}^d)$ et

$$\int_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} \|\nu\|_{L^p(\mathbb{R}^d)}^p dm(\nu) < +\infty \quad (17)$$

le même argument de convexité que dans [1] permet de déduire que $\text{bar}(m) \in L^p(\mathbb{R}^d)$. Evidemment (13) est un cas particulier de (14) correspondant à la mesure discrète $m = \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta_{\nu_i}$, et si l'une des mesures ν_i (avec un poids strictement positif) ne charge pas les ensembles petits on note alors :

$$\text{bar}(\nu_1, \lambda_1, \dots, \nu_N, \lambda_N) = \text{bar}\left(\sum_{i=1}^N \lambda_i \delta_{\nu_i}\right) := \text{argmin}_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)} \sum_{i=1}^N \lambda_i W_2^2(\nu_i, \cdot). \quad (18)$$

Suivant Bigot et Klein [4], nous nous intéressons au comportement asymptotique des barycentres de Wasserstein *empiriques*. Plus précisément, considérons m une mesure de probabilité Borélienne sur $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ telle qu'il existe $C > 0$ tel que

$$\int_{\mathbb{R}^d} |x|^2 d\nu(x) \leq C \text{ pour } m\text{-preque tout } \nu, \quad (19)$$

et $p \in (1, \infty)$ tel que

$$\int_{\mathbb{R}^d} \nu(x)^p dx \leq C \text{ pour } m\text{-preque tout } \nu. \quad (20)$$

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

$$\hat{\mu}_n := \text{bar}\left(\hat{\nu}_1, \frac{1}{n}, \dots, \hat{\nu}_n, \frac{1}{n}\right). \quad (21)$$

Bigot et Klein [4] ont établi, dans un cadre à support compact, une loi des grands nombres, étendue par Le Gouic et Loubes [10] à des cas beaucoup plus généraux, pour le barycentre Wasserstein empirique :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) \rightarrow 0 \text{ p.s., avec } \bar{\mu} := \text{bar}(m). \quad (22)$$

Comme, grâce à (20) à la fois $\bar{\mu} := \text{bar}(m)$ et $\hat{\mu}_n$ sont L^p , il existe un unique transport optimal (voir [3], [13], [12]) pour W_2 entre le vrai barycentre $\bar{\mu}$ et le barycentre empirique $\hat{\mu}_n$, notons $\hat{T}_n := T_{\bar{\mu} \rightarrow \hat{\mu}_n}$ ce transport optimal que l'on doit comprendre comme une variable aléatoire prenant ses valeurs dans

l'espace de Hilbert séparable $L^2(\bar{\mu}, \mathbb{R}^d)$. On a $W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) = \|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2$, avec (19) et un argument simple de convexité (voir [1]), on a $W_2^2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu}) \leq 2C$, de sorte qu'avec (22) et le théorème de convergence dominée de Lebesgue, on a

$$\|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2 \rightarrow 0 \text{ p.s. et } \mathbb{E}\left(\|\hat{T}_n - \text{id}\|_{L^2(\bar{\mu})}^2\right) \rightarrow 0. \quad (23)$$

Il est alors naturel de chercher à aller un ordre plus loin dans la convergence au travers d'un théorème de la limite centrale. La loi des grands nombres de Bigot et Klein énonce que \hat{T}_n converge p.s. et en moyenne quadratique vers l'identité dans $L^2(\bar{\mu})$, il semble raisonnable de conjecturer une vitesse de convergence en $O(1/\sqrt{n})$ et une normalité asymptotique de $\sqrt{n}(\hat{T}_n - \text{id})$ au moins pour certaines classes de mesures m . Une stratégie naturelle consiste à essayer de dériver les conditions d'optimalité par rapport à la mesure pour appliquer un théorème d'inversion locale. Cela semble néanmoins délicat, même dans le cas d'une mesure m discrète car la condition d'optimalité caractérisant le barycentre prend la forme d'un problème d'obstacle pour un système d'équations de Monge-Ampère, l'aspect frontière libre du problème compliquant significativement l'analyse... Mentionnons une question reliée qui a fait l'objet de travaux récents en statistiques [6], [7] et qui concerne l'identification de la distribution asymptotique de la quantité $\sqrt{n}W_2(\hat{\mu}_n, \bar{\mu})$ afin de construire des test d'hypothèse ou d'adéquation.

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

3. Quelques cas de validité du TLC Wasserstein

Théorème 3.1 *Le TLC dans l'espace de Wasserstein est satisfait dans les cas suivants :*

- (i) *lorsque m est une loi de Bernoulli, $m = (1 - \lambda)\delta_{\nu_0} + \lambda\delta_{\nu_1}$ avec $\lambda \in (0, 1)$, ν_0, ν_1 dans $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$ et ν_0 ne chargeant pas les ensembles petits,*
- (ii) *lorsque $d = 1$ et que m est portée par les mesures non-atomiques et vérifie (19),*
- (iii) *lorsque $m = \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta_{\nu_i}$ où chaque ν_i est une gaussienne non dégénérée.*

Démonstration

(i) Pour deux mesures, ν_0 et ν_1 comme dans l'énoncé, la notion de barycentre est étroitement liée à celle de géodésique ou interpolante de McCann entre ν_0 et ν_1 , le transport optimal de Brenier $T_{\nu_0 \rightarrow \nu_1}$ entre ν_0 et ν_1 dérive d'un potentiel convexe ϕ (dont le gradient est défini de manière unique ν_0 -presque partout), $T_{\nu_0 \rightarrow \nu_1} = \nabla \phi$, pour $t \in [0, 1]$, le barycentre de $(1 - t)\delta_{\nu_0} + t\delta_{\nu_1}$ coïncide avec l'interpolation de McCann (voir [11], [1]) :

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

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

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

En particulier le transport optimal \hat{T}_n entre $\text{bar}(m) = \nu(\lambda)$ et le barycentre empirique $\hat{\mu}_n = \nu(\hat{\lambda}_n)$ (ici $\hat{\lambda}_n$ désigne la fréquence empirique d'apparition de ν_1 dans l'échantillon $\hat{\nu}_1, \dots, \hat{\nu}_n$) satisfait

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

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

(ii) En dimension 1, le barycentre d'une mesure m portée par les mesures non-atomiques est non-atomique et donné par la formule explicite (voir par exemple [1])

$$\text{bar}(m) := \left(\int_{\mathcal{P}_2(\mathbb{R})} T_{\rho \rightarrow \nu} dm(\nu) \right)_{\#} \rho, \quad (24)$$

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

$$\hat{T}_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n T_{\text{bar}(m) \rightarrow \hat{\nu}_i} \quad (25)$$

et comme les variables aléatoires à valeurs dans $L^2(\text{bar}(m))$, $T_{\text{bar}(m) \rightarrow \hat{\nu}_i}$ sont i.i.d. et de carré intégrable par (19), le TLC usuel dans les espaces de Hilbert séparables (voir [8]) permet de conclure.

(iii) Sans perte de généralité, nous supposons que les ν_i sont des gaussiennes centrées et notons $S_i = K_i^2$ leur matrice de variance covariance (K_i et S_i appartiennent à \mathcal{S}_d^{++} le cône des matrices $d \times d$ symétriques, définies positives, on note par ailleurs \mathcal{S}_d l'espace des matrices symétriques et \mathcal{S}_d^+ le cône des matrices $d \times d$ symétriques, semi-définies positives). Le point important ici est que si $\alpha \in \Delta_N := \{(\alpha_1, \dots, \alpha_N) \in \mathbb{R}_+^N ; \sum_{i=1}^N \alpha_i = 1\}$ alors $\nu(\alpha) := \text{bar}(\sum_{i=1}^N \alpha_i \delta_{\nu_i})$ est elle même une gaussienne centrée dont la matrice de variance-covariance $S(\alpha)$ est l'unique racine dans \mathcal{S}_d^{++} de l'équation matricielle (cf. [1]) :

$$I = \sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi_i(S) \text{ où } \Phi_i(S) := K_i(K_i S K_i)^{-\frac{1}{2}} K_i. \quad (26)$$

En vertu du lemme 3.2 ci-dessous, l'application $\alpha \in \Delta_N \mapsto S(\alpha) \in \mathcal{S}_d^{++}$ est C^∞ . Le vrai barycentre $\text{bar}(\nu_1, \lambda_1, \dots, \nu_N, \lambda_N)$ est la mesure gaussienne centrée de variance-covariance $S(\lambda)$ tandis que le barycentre empirique $\hat{\mu}_n$ est la mesure gaussienne centrée de variance-covariance $S(\hat{\lambda}_n)$ où $\hat{\lambda}_n$ est le vecteur des fréquences empiriques :

$$(\hat{\lambda}_n)_i = \frac{1}{n} \#\{j = 1, \dots, n : \hat{\nu}_j = \nu_i\}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (27)$$

Le TLC implique que $\sqrt{n}(\hat{\lambda}_n - \lambda)$ converge en loi vers $\mathcal{N}(0, \sigma)$ ($\sigma_{ij} := \lambda_i \delta_{ij} - \lambda_i \lambda_j$). Il est bien connu que le transport optimal entre les gaussiennes centrées de variance covariance $S(\lambda)$ et $S(\hat{\lambda})$ est linéaire et explicitement donné en fonction de $\hat{\lambda}$ par

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

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

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

de sorte que

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

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

■

Nous avons utilisé ci-dessus le résultat suivant

Lemme 3.2 *L'application $\alpha \in \Delta_N \mapsto S(\alpha) \in \mathcal{S}_d^{++}$ définie implicitement par l'équation (26) est de classe C^∞ .*

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

$$-K_i^{-1}S^{-1}\theta S^{-1}K_i^{-1} = (K_iSK_i)^{-\frac{1}{2}}K_i^{-1}L_iK_i^{-1} + K_i^{-1}L_iK_i^{-1}(K_iSK_i)^{-\frac{1}{2}}. \quad (28)$$

Définissant

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

il est commode de réécrire (28) sous la forme plus concise

$$-\tilde{S}_i^{-1}\tilde{\theta}_i\tilde{S}_i^{-1} = \tilde{S}_i^{-\frac{1}{2}}\tilde{L}_i + \tilde{L}_i\tilde{S}_i^{-\frac{1}{2}}. \quad (29)$$

Supposons que $\theta \in \mathcal{S}_d$ soit dans le noyau de $\sum_{i=1}^N \alpha_i \Phi'_i(S)$ i.e. $\sum_{i=1}^N \alpha_i L_i = 0$, il vient donc avec (29) et quelques manipulations élémentaires

$$0 = \sum_{i=1}^N \alpha_i \text{Tr}(L_i\theta) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \text{Tr}(\tilde{L}_i\tilde{\theta}_i) = -2 \sum_{i=1}^N \alpha_i \text{Tr}(\tilde{S}_i^{\frac{1}{2}}\tilde{L}_i\tilde{S}_i^{\frac{1}{2}}\tilde{L}_i\tilde{S}_i^{\frac{1}{2}}) \quad (30)$$

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

■

Note :

Cette note a été rédigée après la disparition soudaine du premier auteur, Martial Agueh, le second auteur tient à la dédier à sa mémoire.

Références

- [1] M. Agueh, G. Carlier, Barycenters in the Wasserstein space, *SIAM J. Math. Anal.* 43 (2011), no. 2, 904-924.
- [2] J.-D. Benamou, G. Carlier, M. Cuturi, L. Nenna, G. Peyré, Iterative Bregman projections for regularized transportation problems, *SIAM J. Sci. Comput.*, 37(2) (2015), 1111-1138.
- [3] Y. Brenier, Polar Factorization and Monotone. Rearrangement of Vector-Valued Functions, *Communications on pure and applied mathematics* 44 (4) (1991), 375-417.

- [4] J. Bigot, T. Klein, Characterization of barycenters in the Wasserstein space by averaging optimal transport maps, preprint 2012, <https://arxiv.org/abs/1212.2562>.
- [5] M. Cuturi, A. Doucet, Fast computation of Wasserstein barycenters, Proceedings of the 31st International Conference on Machine Learning (ICML-14) (2014), 685-693.
- [6] E. Del Barrio, H. Lescornel, J.-M. Loubes. A statistical analysis of a deformation model with Wasserstein barycenters : estimation procedure and goodness of fit test, preprint 2015, <https://arxiv.org/abs/1508.06465>.
- [7] J. Ebert, V. Spokoiny, A. Suvorikova, Construction of non-asymptotic confidence sets in 2-Wasserstein space, preprint 2017, <https://arxiv.org/abs/1703.03658>.
- [8] E. Giné, J.-R. Leòn, On the central limit theorem in Hilbert space, *Stochastica* 4(1) (1980), 43–71.
- [9] Y.-H. Kim, B. Pass, Wasserstein Barycenters over Riemannian manifolds, *Adv. Math.* 307 (2017) 640-683.
- [10] T. Le Gouic, J.-M. Loubes, Existence and consistency of Wasserstein barycenters, *Probab. Theory Relat. Fields* (2016), 1-17.
- [11] R.-J. McCann, A convexity principle for interacting gases, *Adv. Math.* 128 (1997), 153-179.
- [12] F. Santambrogio, *Optimal Transport for Applied Mathematicians*, Birkhäuser, 2015.
- [13] C. Villani, *Topics in optimal transportation*, Graduate Series in Mathematics, American Mathematical Society, 2003.