はじめに

BGM：あなたが毎日直面している世界の憂鬱

このノートについて

このノートは応用数学勉強会 2023 における講演のあとに作ったレクチャーノートです．あなたが毎日直面している輸送の問題を解決する手助けになれば幸いです．また，誤植や議論の誤りを見つけた場合は，私 (asuka あっとまーく tmu.ac.jp) 宛にご連絡いただければ幸いです．

現在のファイルは **2025 年 2 月 22 日**版です．

参考書

たくさんあげるとキリがなくなるので，趣味と偏見に基づきごく一部を紹介いたします．

[1] C. Villani, *Topics in optimal transportation*, Graduate Studies in Mathematics, vol. 58, American Mathematical Society, Providence, RI, 2003.
∗ ユークリッド空間において最適輸送理論を考える場合におすすめです．

[2] C. Villani, *Optimal transport*, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 338, Springer-Verlag, Berlin, 2009. Old and new.
∗ より一般の枠組みで最適輸送理論を考える場合におすすめです．

[3] F. Santambrogio, *Optimal transport for applied mathematicians*, Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, vol. 87, Birkhäuser/Springer, Cham, 2015. Calculus of variations, PDEs, and modeling.
∗ 題目にあるように応用を考える場合におすすめです．

[4] 桑江一洋; 塩谷隆; 太田慎一; 高津飛鳥; 桑田和正, 最適輸送理論とリッチ曲率, 数学メモアール (第 8 巻), 日本数学会, 2017.
∗ 最後の著者の「桑」の字は本当は異字体です．

[5] 高津飛鳥, 未定, 朝倉書店.
∗ 宣伝です．現在，頑張って執筆しております．

目次

1. 最適輸送問題の定式化
2. 最適輸送問題の解に対する考察
3. 最適輸送計画と凸関数
4. 最適輸送問題の双対問題
5. 最適輸送写像の一意存在
6. 最適輸送理論が導く距離構造
7. 最適輸送問題の動的解釈
8. 関数の凸性
9. 関数不等式
10. 接空間と計量構造
11. 相対エントロピーの勾配
12. K-凸関数の勾配流

各節は 2 ページの説明+1 ページの復習+1 ページの問題からなります．問題の答えは掲載しませんが，参考文献の何処かには書いてあります．

ノートの大雑把な構成は,1 節から 6 節までが基礎的事項で，7 節が基礎事項の補足，8 節と 9 節が関数不等式，10 節から 12 節が勾配流についてです．7 節以降のトピックは独立に読むこともできると思います．9 節以降の議論は形式的に行なっていますが，正当化できます．

謝辞

応用数学勉強会における講演の機会を下さった世話人の芝浦工業大学の石渡哲哉先生と神戸大学の高坂良史先生に心からの感謝を申し上げます．そして勉強会に参加していただいた皆様もありがとうございました．皆様のおかげでとても楽しく講義ができました．

＊このファイルは小森靖さん・坂内健一さん作成のスタイルファイルを使用しています．

1. 最適輸送問題の定式化

記号

本稿では n, m は常に自然数であるとする．一般的な記号として，$|\cdot|$ と $\langle\cdot,\cdot\rangle$ はそれぞれユークリッドノルムとユークリッド内積を表す．そして $z \in \mathbb{R}^m$ および $r > 0$ に対し，

$$B_r(z) \coloneqq \{z' \in \mathbb{R}^m \mid |z - z'| < r\}$$

と定義する．さらに $C_b(\mathbb{R}^m)$ は $\mathbb{R}^m$ 上の有界な連続関数のなす集合とする．

また，

$$\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \coloneqq \left\{ f \in L^1(\mathbb{R}^n) \;\middle|\; \begin{array}{l} f \text{ はほとんど至るところ非負かつ} \\ \displaystyle\int_{\mathbb{R}^n} f(x)dx = 1 \text{ および } \int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 f(x)dx < \infty \end{array} \right\}$$

とおく．ここで $\mathcal{P}^{\mathrm{ac}}$ は元がルベーグ測度に関する確率密度関数であることを意味し，下付きの 2 は元の 2 次モーメントが有限であることを意味する．そして $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し，その台を

$$\mathrm{supp}(f) \coloneqq \left\{ x \in \mathbb{R}^n \;\middle|\; \text{任意の } r > 0 \text{ に対して } \int_{B_r(x)} f(x')dx' > 0 \right\}$$

と定義する．同様に，$\mathbb{R}^m$ 上のボレル確率測度 μ の台を

$$\mathrm{supp}(\mu) \coloneqq \left\{ z \in \mathbb{R}^m \;\middle|\; \text{任意の } r > 0 \text{ に対して} \mu(B_r(z)) > 0 \right\}$$

と定義する．

以下，$f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ とする．

定義 1.1.

- ボレル写像 $T\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ が任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$\int_{\mathbb{R}^n} h(y)g(y)dy = \int_{\mathbb{R}^n} h(T(x))f(x)dx$$

  をみたすとき，T は π は f から g への輸送写像である (または T は f を g に押し出す) といい，$T_\sharp f = g$ と書く．そして

$$\mathcal{T}(f, g) \coloneqq \{T\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n\colon \text{ボレル} \mid T \text{ は } f \text{ から } g \text{ への輸送写像}\}$$

  とおく．

- $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π が任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(x)d\pi(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n} h(x)f(x)dx, \qquad \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(y)d\pi(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n} h(y)g(y)dy$$

  をみたすとき，π は f から g への輸送計画 (またはカップリング) であるという．そして

$$\Pi(f, g) \coloneqq \{\pi\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \text{上のボレル確率測度} \mid \pi \text{ は } f \text{ から } g \text{ への輸送計画}\}$$

  とおく．

これらの定義に現れる試験関数 $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ は非負値ボレル関数に置き換えられる. その際, 両辺の値は $[0,\infty]$-値として一致する.

また, 輸送写像は輸送計画とみなすことができる.

補題 1.2. 各 $T \in \mathcal{T}(f,g)$ に対し, $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π^T を

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} H(x,y)\pi^T(x,y) := \int_{\mathbb{R}^n} H(x,T(x))f(x)dx \quad (H \in C_b(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n))$$

と定めれば, $\pi^T \in \Pi(f,g)$ である.

証明. 任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対し, $(x,y) \mapsto h(x), h(y)$ はともに $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上の有界な連続関数なので

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(x)d\pi^T(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n} h(x)f(x)dx,$$
$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(y)d\pi^T(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n} h(T(x))f(x)dx = \int_{\mathbb{R}^n} h(y)g(y)dy$$

が成り立つ. よって $\pi^T \in \Pi(f,g)$ であることが示された. □

問題

問題 1.3 (Monge の提案に準ずる問題)**.** 下限

$$\inf_{T\in\mathcal{T}(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} |x-T(x)|^2 f(x)dx$$

が有限であること, および下限を達成する $T \in \mathcal{T}(f,g)$ が存在することを示せ.

問題 1.4 (Kantorovich の提案に準ずる問題)**.** 下限

$$\inf_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)$$

が有限であること, および下限を達成する $\pi \in \Pi(f,g)$ が存在することを示せ.

補題 **??**から

$$\inf_{T\in\mathcal{T}(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} |x-T(x)|^2 f(x)dx \le \inf_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)$$

が従うが, 実際は等号になる. 本稿の前半では以下の定理の証明の概略を与えることが目的である.

定理 1.5. 問題 **??**における下限を達成する $T \in \mathcal{T}(f,g)$ と問題 **??**における下限を達成する $\pi \in \Pi(f,g)$ がそれぞれ一意的に存在し, さらに $\pi = \pi^T$ が成り立つ.

また, 恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ が定数の差を除いて一意的に存在し, $T = \nabla\varphi$ が $\mathrm{supp}(f)$ 上のほとんど至るところで成り立つ.

定理 **??**から

$$\inf_{\tilde{T}\in\mathcal{T}(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} |x-\tilde{T}(x)|^2 f(x)dx = \int_{\mathbb{R}^n} |x-T(x)|^2 f(x)dx$$
$$= \int_{\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi^T(x,y) \inf_{\tilde{\pi}\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\tilde{\pi}(x,y)$$

従う.

また, T の一意性は f に関するものである. すなわち $\tilde{T} \in \mathcal{T}(f,g)$ が下限を達成するならば, $\tilde{T} = T$ が $\mathrm{supp}(f)$ 上のほとんど至るところで成り立つ. 同様に, 下半連続な適正凸関数 $\tilde{\varphi}\colon \mathbb{R}^n \to [-\infty,\infty)$ に対し, $T = \nabla\tilde{\varphi}$ が $\mathrm{supp}(f)$ 上のほとんど至るところで成り立つならば, ある定数 λ が存在して $\tilde{\varphi} = \varphi + \lambda$ が $\mathrm{supp}(f)$ 上のほとんど至るところで成り立つ.

1. 最適輸送問題の定式化

BGM：時代〜トキ〜

次の 3 条件をみたす $f \in L^1(\mathbb{R}^n)$ がなす集合を $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と書く.

- f はほとんど至るところ非負;
- $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^n} f(x)dx = \underline{\hspace{4cm}}_{(1)}$;
- $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 f(x)dx < \infty$.

そして $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の台を $\underline{\hspace{4cm}}_{(2)}$ と書く.

以下, $C_b(\mathbb{R}^n)$ を $\mathbb{R}^n$ 上の $\underline{\hspace{4cm}}_{(3)}$ な関数がなす集合とする. そして $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を固定する.

次の条件をみたすボレル写像 $T \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ がなす集合を $\mathcal{T}(f,g)$ と書く.

- 任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$\int_{\mathbb{R}^n} h(y)g(y)dy = \int_{\mathbb{R}^n} \underline{\hspace{5cm}}_{(4)}.$$

すると Monge の提案に準ずる問題は, 下限

$$\inf_{T \in \mathcal{T}(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} |x - T(x)|^2 f(x)dx$$

の有限性および下限を達成する $T \in \mathcal{T}(f,g)$ の存在を示すことである.

次の条件をみたす $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π を $\Pi(f,g)$ と書く.

- 任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} h(x)d\pi(x,y) = \underline{\hspace{5cm}}_{(5)}, \qquad \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} h(y)d\pi(x,y) = \underline{\hspace{5cm}}_{(6)}.$$

すると Kantorovich の提案に準ずる問題は, 下限

$$\inf_{\pi \in \Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x - y|^2 d\pi(x,y)$$

の有限性および下限を達成する $T \in \Pi(f,g)$ の存在を示すことである.

各 $T \in \mathcal{T}(f,g)$ に対し, $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π^T を

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(x,y)\pi^T(x,y) \coloneqq \int_{\mathbb{R}^n} \underline{\hspace{9cm}}_{(7)} \qquad (H \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n))$$

と定めれば, $\pi^T \in \Pi(f,g)$ である.

1. 最適輸送問題の定式化

BGM：時代〜トキ〜

問題 1. (輸送写像の性質) $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と輸送写像 $T \in \mathcal{T}(f, g)$ に対し，ある開集合 $D \subset \mathbb{R}^n$ が存在して T は D 上で単射かつ局所リプシッツであり，さらに

$$\int_D f(x)dx = 1$$

が成り立つとする．

(1) ほとんどすべての $x \in D$ において，T は微分可能である，すなわち線形写像 $dT_x \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ が存在して

$$\lim_{v \to 0} \frac{|T(x+v) - T(x) - dT_x(v)|}{|v|} = 0$$

が成り立つを示せ．

(2) ほとんどすべての $x \in D$ に対して

$$f(x) = g(T(x))|\det(dT_x)|$$

が成り立つことを示せ．

(3) 写像 $T \colon D \to T(D)$ の逆写像の零拡張を $S \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$，すなわち

$$S(y) = \begin{cases} T^{-1}(y) & (y \in T(D)), \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$$

とする．このとき $S \in \mathcal{T}(g, f)$ を示せ．

問題 (**??**) より，もし T がポテンシャル φ を持つならば，輸送写像に関する問題は Monge–Ampère 方程式に関する問題帰着される．

2. 最適輸送問題の解に対する考察

問題 (再掲)

本節では $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を固定し, Kantorovich の提案に準ずる問題, すなわち変分問題

$$\inf_{\pi \in \Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) \tag{2.1}$$

に関する考察を進める.

最小化因子の存在

まずは下限 (2.1) が有限値になることを示す.

補題 2.1. $\Pi(f,g) \neq \emptyset$ かつ

$$\inf_{\pi \in \Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) < \infty$$

である.

証明. $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 $\pi^{f,g}$ を

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(x,y) d\pi^{f,g}(x,y) := \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(x,y) f(x) g(y) dx dy \quad (H \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n))$$

と定めれば, $\pi^{f,g} \in \Pi(f,g)$ である. そして

$$\begin{aligned}
\inf_{\pi \in \Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) &\leq \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi^{f,g}(x,y) \\
&\leq 2 \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} (|x|^2 + |y|^2) d\pi^{f,g}(x,y) \\
&= 2 \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} (|x|^2 + |y|^2) f(x) g(y) dx dy \\
&= 2 \left(\int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 f(x) dx + \int_{\mathbb{R}^n} |y|^2 g(y) dy \right) < \infty
\end{aligned}$$

が成り立つ. 以上より補題が示された. □

つぎにコンパクト集合上の下半連続な関数は最小化因子をもつことを利用するために, 確率測度の弱収束を考える.

定義 2.2. $\mathbb{R}^m$ 上のボレル確率測度の列 $(\mu_k)_{k \in \mathbb{N}}$ が $\mathbb{R}^m$ 上のボレル確率測度 μ に弱収束するとは, 任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^d)$ に対して

$$\lim_{k \to \infty} \int_{\mathbb{R}^d} h(x) d\mu_k(x) = \int_{\mathbb{R}^d} h(x) d\mu(x)$$

をみたすことである.

同様に, 列 $(f_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ が $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に弱収束するとは, 任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^d)$ に対して

$$\lim_{k \to \infty} \int_{\mathbb{R}^d} h(x) f_k(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} h(x) f(x) dx$$

をみたすことである.

定理 2.3. ある $\pi \in \Pi(f,g)$ が存在し,

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) = \inf_{\tilde{\pi}\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\tilde{\pi}(x,y)$$

が成り立つ.

証明. 弱収束列 $(\pi_k)_{k\in\mathbb{N}} \in \Pi(f,g)$ を考え, その弱極限である $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度を π とする. このとき任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(x)d\pi(x,y) = \lim_{k\to\infty}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(x)d\pi_k(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(x)f(x)dx,$$
$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(y)d\pi(x,y) = \lim_{k\to\infty}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(y)d\pi_k(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} h(y)g(y)dy$$

が成り立つ. よって $\pi \in \Pi(f,g)$ である. また, Prokhorov の定理により $\Pi(f,g)$ は弱収束に関してコンパクトであり, さらに

$$\pi \mapsto \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)$$

は弱収束の位相に関して $\Pi(f,g)$ 上で下半連続である. 以上より定理が示された. □

定義 2.4. 下限 (2.1) を達成する $\pi \in \Pi(f,g)$ を最適輸送計画とよぶ.

最適輸送計画の特徴付け

定義 2.5. 集合 $A \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ が巡回単調であるとは, 任意の $L \in \mathbb{N}$ と $\{(x_\ell, y_\ell)\}_{\ell=1}^L \subset A$ に対して

$$\sum_{\ell=1}^L |x_\ell - y_\ell|^2 \le \sum_{\ell=1}^L |x_{\ell+1} - y_\ell|^2 \quad \left(\text{あるいは同値な条件として } \sum_{\ell=1}^L \langle x_{\ell+1} - x_\ell, y_\ell\rangle \le 0\right)$$

をみたすことである. ただし, $x_{L+1} \coloneqq x_1$ である.

定理 2.6. 最適輸送計画 $\pi \in \Pi(f,g)$ の台 $\mathrm{supp}(\pi)$ は巡回単調である.

証明. 任意の $L \in \mathbb{N}$ と $\{(x_\ell, y_\ell)\}_{\ell=1}^L \subset \mathrm{supp}(\pi)$ および $r > 0$ を固定する. すると台の定義より,

$$\varepsilon \coloneqq \frac{1}{L}\min_{\ell=1,\dots,L} \pi(B_r(x_\ell, y_\ell)) > 0$$

を得る. そして $\ell = 1, \dots, L$ に対し, $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π_ℓ と $\tilde{\pi}_\ell$ を

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} H(x,y)d\pi_\ell(x,y) \coloneqq \frac{1}{\pi(B_r(x_\ell,y_\ell))}\int_{B_r(x_\ell,y_\ell)} H(x,y)d\pi(x,y),$$
$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} H(x,y)d\tilde{\pi}_\ell(x,y) \coloneqq \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\left(\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} H(x,y)d\pi_\ell(x',y)\right)d\pi_{\ell+1}(x,y') \quad (H \in C_b(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n))$$

と定める. ただし, $\pi_{L+1} \coloneqq \pi_1$ である. すると

$$\tilde{\pi} \coloneqq \pi - \varepsilon\sum_{\ell=1}^L (\pi_\ell - \tilde{\pi}_\ell) \in \Pi(f,g)$$

であり, π が下限を達成することから

$$0 \le \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\tilde{\pi}(x,y) - \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) \xrightarrow{r\downarrow 0} -\varepsilon\left(\sum_{\ell=1}^L |x_\ell - y_\ell|^2 - \sum_{\ell=1}^L |x_{\ell+1} - y_\ell|^2\right)$$

が従う. よって π は巡回単調である. □

定理 2.6 の逆の主張も正しい. すなわち, 台が巡回単調である輸送計画 $\pi \in \Pi(f,g)$ は最適輸送計画である.

2. 最適輸送問題の解に対する考察

BGM：ビューティフル

$f,g\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し, $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 $\pi^{f,g}$ を

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} H(x,y)d\pi^{f,g}(x,y) \coloneqq \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} H(x,y)f(x)g(y)dxdy \quad (H\in C_b(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n))$$

と定めれば, $\pi^{f,g}\in\Pi(f,g)$ である．そして

$$|x-y|^2\le 2\left(\underline{\hspace{4cm}}_{(1)}\right)$$

なので

$$\begin{aligned}\inf_{\pi\in\Pi(f,g)}\int_{\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\pi(x,y) &\le \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\pi^{f,g}(x,y)\\ &\le \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}2\left(\underline{\hspace{4cm}}_{(1)}\right)d\pi^{f,g}(x,y)\\ &= 2\left(\int_{\mathbb{R}^n}\underline{\hspace{4cm}}_{(2)}dx+\int_{\mathbb{R}^n}\underline{\hspace{4cm}}_{(3)}dy\right)<\infty\end{aligned}$$

が成り立つ.

$\mathbb{R}^m$ 上のボレル確率測度の列 $(\mu_k)_{k\in\mathbb{N}}$ が $\mathbb{R}^m$ 上のボレル確率測度 μ に弱収束するとは, 任意の $h\in C_b(\mathbb{R}^d)$ に対して

$$\underline{\hspace{20cm}}_{(4)}$$

をみたすことである.

すると任意の $f,g\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し, $\Pi(f,g)$ は弱収束に関してコンパクトである．また,

$$\pi\mapsto\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\pi(x,y)$$

は弱収束の位相に関して $\Pi(f,g)$ 上で 選択: 下半連続 / 上半連続$_{(5)}$ である．よってある $\pi\in\Pi(f,g)$ が存在し,

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\pi(x,y)=\inf_{\tilde\pi\in\Pi(f,g)}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\tilde\pi(x,y)$$

が成り立つ．上記の最小化因子 $\pi\in\Pi(f,g)$ を $\underline{\hspace{5cm}}_{(6)}$ とよぶ.

すると最適輸送計画の台は巡回単調である．ここで集合 $A\subset\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ が巡回単調であるとは, 任意の自然数 L と $\{(x_\ell,y_\ell)\}_{\ell=1}^L\subset A$ に対して

$$\underline{\hspace{20cm}}_{(7)}$$

をみたすことである．ただし, $x_{L+1}\coloneqq x_1$ である.

2. 最適輸送問題の解に対する考察

問題 1. (輸送写像の存在)

(1) $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^2)$ に対し，関数 $p_f\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を

$$p_f(x) := \int_{\mathbb{R}} f(x, x')dx'$$

と定める．このとき $p_f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R})$ を示せ．また，$p_f(x) > 0$ をみたす $x \in \mathbb{R}$ に対し，

$$p_f^x(y) := \frac{f(x,y)}{p_f(x)} \quad (y \in \mathbb{R})$$

と定義する．このとき $p_f^x \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R})$ を示せ．

(2) $p \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R})$ に対し，

$$F_p(x) := \int_{-\infty}^{x} p(x')dx' \quad (x \in \mathbb{R}), \qquad F_p^{\dagger}(s) := \inf\{x \in \mathbb{R} \mid F(x) \geq s\} \quad (s \in [0,1])$$

と定める．このとき $p, q \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R})$ に対し，$F_q^{\dagger} \circ F_p \in \mathcal{T}(p,q)$ を示せ．

(3) $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^2)$ に対し，$T_1\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ と $T\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ をそれぞれ

$$T_1 := F_{p_g}^{\dagger} \circ F_{p_f}, \qquad T(x,y) = \begin{cases} \left(T_1(x), F_{p_g^{T_1(x)}}^{\dagger}\left(F_{p_f^x}(y)\right)\right) & (p_f(x) > 0), \\ (0,0) & (\text{その他}) \end{cases}$$

と定める．このとき $T \in \mathcal{T}(f,g)$ を示せ．

一般の $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ も同様にして輸送写像 $T \in \Pi(f,g)$ が構成できる． この輸送写像は Knothe–Rosenblatt 写像とよばれる．

3. 最適輸送計画と凸関数

凸共役

定義 3.1. 関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ の凸共役 $\varphi^*\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ を

$$\varphi^*(v) := \sup_{x\in\mathbb{R}^n} (\langle x, v\rangle - \varphi(x))$$

と定める．

恒等的に ∞ でない関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ に対し，φ^* は値域が $(-\infty, \infty]$ に含まれる下半連続な凸関数である．すなわち，

$$\liminf_{v'\to v} \varphi^*(v') \geq \varphi^*(v) \quad (v \in \mathbb{R}^n)$$

および

$$\varphi^*((1-\tau)v + \tau w) \leq (1-\tau)\varphi^*(v) + \tau\varphi^*(w) \quad (v, w \in \mathbb{R}^n, \tau \in (0,1))$$

が成り立つ．また，

$$\begin{aligned}(\varphi^*)^*(y) = \sup_{v\in\mathbb{R}^n} (\langle v, y\rangle - \varphi^*(v)) &= \sup_{v\in\mathbb{R}^n} \left\{\langle v, y\rangle - \sup_{x\in\mathbb{R}^n} (\langle x, v\rangle - \varphi(x))\right\} \\ &\leq \sup_{v\in\mathbb{R}^n} \{\langle v, y\rangle - (\langle y, v\rangle - \varphi(y))\} = \varphi(y) \quad (y \in \mathbb{R}^n)\end{aligned}$$

となる．そして Frenchel–Moreau の定理より，$(\varphi^*)^* = \varphi$ が成り立つための必要十分条件は，φ が下半連続な凸関数であることである．

劣微分

定義 3.2. 関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ が $x \in \mathbb{R}^n$ において劣微分可能であるとは，$\varphi(x) \in \mathbb{R}$ であり，さらに $v \in \mathbb{R}^n$ が存在して

$$\varphi(y) \geq \varphi(x) + \langle y - x, v\rangle \quad (y \in \mathbb{R}^n)$$

が成り立つことである．そして v を φ の x における劣勾配とよぶ．また，

$$\underline{\partial}\varphi(x) := \{v \in \mathbb{R}^n \mid v \text{ は } \varphi \text{ の } x \text{ における劣勾配}\}, \qquad \underline{\partial}\varphi := \bigcup_{x\in\varphi^{-1}(\mathbb{R})} \underline{\partial}\varphi(x)$$

とおく．

凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ に対し，x が $\varphi^{-1}(\mathbb{R})$ の内点ならば $\underline{\partial}\varphi(x) \neq \emptyset$ である．さらに Aleksandrov の定理より，$\varphi^{-1}(\mathbb{R})$ のほとんどすべての x に対して $\underline{\partial}\varphi(x) = \{\nabla\varphi(x)\}$ が成り立ちさらに φ は x で 2 階微分可能である．

命題 3.3. 恒等的に ∞ でない下半連続な関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ に対し，$\underline{\partial}\varphi$ は巡回単調である．

証明． 任意の自然数 L と $\{(x_\ell, v_\ell)\}_{\ell=1}^L \subset \underline{\partial}\varphi$ に対し，

$$\varphi(x_{\ell+1}) \geq \varphi(x_\ell) + \langle x_{\ell+1} - x_\ell, v_\ell\rangle$$

が成り立つ．ただし，$x_{L+1} := x_1$ である．ここで両辺 $\ell = 1 \ldots, L$ で和をとり整理すると，

$$\sum_{\ell=1}^L \langle x_{\ell+1} - x_\ell, v_\ell\rangle \leq 0$$

が成り立つので，$\underline{\partial}\varphi$ が巡回単調であることが示された． □

定理 3.4. 単調巡回である集合 $A \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ に対し，恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ が存在して $A \subset \underline{\partial}\varphi$ が成り立つ．

証明． $(x_0, v_0) \in A$ を選び固定する．そして $x \in \mathbb{R}^n$ と自然数 L に対し，

$$\varphi_L(x) := \sup\left\{ \sum_{\ell=0}^{L} \langle x_{\ell+1} - x_\ell, v_\ell \rangle \;\middle|\; \{(x_\ell, v_\ell)\}_{\ell=1}^{L} \subset A,\ x_{L+1} = x \right\}, \qquad \varphi(x) := \sup_{L \in \mathbb{N}} \varphi_L(x)$$

と定義する．すると任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対し，

$$\varphi(x) \geq \varphi_1(x) \geq \langle x_0 - x_0, v_0 \rangle + \langle x - x_0, v_0 \rangle = \langle x - x_0, v_0 \rangle > -\infty$$

が成り立つで，$\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ である．とくに $\varphi(x_0) \geq 0$ である．さらに A の単調巡回性から

$$\begin{aligned}\varphi_L(x) &= \sup\left\{ \sum_{\ell=0}^{L} \langle x_{\ell+1} - x_\ell, v_\ell \rangle + \langle x - x_0, v_L \rangle \;\middle|\; \{(x_\ell, v_\ell)\}_{\ell=1}^{L} \subset A,\ x_{L+1} = x_0 \right\} \\ &\leq \sup\{ \langle x - x_0, v_L \rangle \mid (x_L, v_L) \in A \}\end{aligned}$$

が従うので，$\varphi_L(x_0) \leq 0$ である．よって $\varphi(x_0) = 0$ であり，φ は恒等的に ∞ ではない．

また，任意の自然数 L と $\{(x_\ell, v_\ell)\}_{\ell=1}^{L} \subset A$ に対し，

$$x \mapsto \sum_{\ell=0}^{L} \langle x_{\ell+1} - x_\ell, v_\ell \rangle \quad (\text{ただし } x_{L+1} = x)$$

は $\mathbb{R}^n$ 上のアファイン関数であり，とくに連続関数である．連続関数の族の上限は下半連続でありアファイン関数の族の上限は凸関数なので，φ は下半連続な凸関数である．

そして任意の $(x, v) \in A$ と $y \in \mathbb{R}^n$ に対し，

$$\begin{aligned}\varphi_{L+1}(y) &\geq \sup\left\{ \sum_{\ell=0}^{L+1} \langle x_{\ell+1} - x_\ell, v_\ell \rangle \;\middle|\; \{(x_\ell, v_\ell)\}_{\ell=1}^{L} \subset A,\ (x_{L+1}, v_{L+1}) = (x, v),\ x_{L+2} = y \right\} \\ &= \varphi_L(x) + \langle y - x, v \rangle\end{aligned}$$

が成り立つので，$L \to \infty$ とすると

$$\varphi(y) \geq \varphi(x) + \langle y - x, v \rangle$$

を得る．ここで $\varphi(x) = \infty$ ならば $\varphi(y) = \infty$ となり，φ が恒等的に ∞ でないことに矛盾する．よって $\varphi(x) \in \mathbb{R}$ であり，さらに $v \in \underline{\partial}\varphi(x)$，すなわち $(x, v) \in \underline{\partial}\varphi$ である．

以上より定理が示された． □

最適輸送写像の構成では，定理 2.6 と定理 3.4 を用いると最適輸送計画から恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ が定まること，および $(x, v) \in \underline{\partial}\varphi$ に対し

$$\langle x, v \rangle - \varphi(x) \leq \varphi^*(v) = \sup_{x' \in \mathbb{R}^n} \big(\langle x', v \rangle - \varphi(x') \big) \leq \langle x, v \rangle - \varphi(x)$$

が成り立つので，

$$\varphi(x) + \varphi^*(v) = \langle x, v \rangle \tag{3.1}$$

となることを用いる．また，$(x, v) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ が上記の等式 (3.1) をみたすことは，$(x, v) \in \underline{\partial}\varphi$ であることの必要十分条件である．

3. 最適輸送計画と凸関数

BGM : your side

関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ の凸共役 $\varphi^*\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ を

$$\varphi^*(v) \coloneqq \sup_{x\in\mathbb{R}^n}\left(\underline{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(1)}\right)$$

と定める．すると恒等的に ∞ でない関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ に対し, $(\varphi^*)^* = \varphi$ が成り立つための必要十分条件は, φ が下半連続である, すなわち

$$\liminf_{x'\to x}\varphi(x')\underline{\qquad\quad}_{(2)}\varphi(x) \quad (x\in\mathbb{R}^n)$$

をみたしさらに凸であり, すなわち

$$\varphi((1-\tau)x+\tau y)\underline{\qquad\quad}_{(3)}(1-\tau)\varphi(x)+\tau\varphi(y) \quad (x, y\in\mathbb{R}^n, \tau\in(0,1))$$

をみたすことである．

関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ が $x\in\mathbb{R}^n$ において劣微分可能であるとは, $\varphi(x)\in\mathbb{R}$ であり, さらに $v\in\mathbb{R}^n$ が存在して

$$\varphi(y) \geq \underline{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(4)} \quad (y\in\mathbb{R}^n)$$

が成り立つことである．そして v を φ の x における $\underline{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(5)}$ とよび,

$$\underline{\partial}\varphi \coloneqq \bigcup_{x\in\varphi^{-1}(\mathbb{R})}\{v\in\mathbb{R}^n \mid v \text{ は } \varphi \text{ の } x \text{ における } \underline{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(5)}\}$$

とおく．

集合 $A\subset\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ に対し, 恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ が存在して $A\subset\underline{\partial}\varphi$ が成り立つ．実際, $(x_0, v_0)\in A$ を選び固定し, $x\in\mathbb{R}^n$ と自然数 L に対し,

$$\begin{aligned}\varphi_L(x) &\coloneqq \sup\left\{\sum_{\ell=0}^{L}\langle x_{\ell+1}-x_\ell, v_\ell\rangle \;\middle|\; \{(x_\ell, v_\ell)\}_{\ell=1}^{L}\subset A,\ x_{L+1}=x\right\},\\ \varphi(x) &\coloneqq \sup_{L\in\mathbb{N}}\varphi_L(x)\end{aligned}$$

と定義すれば, φ が所望する関数になる．とくに $\varphi(x_0) = \underline{\qquad\qquad}_{(6)}$ である．このとき, 任意の $(x, v)\in\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ に対し,

$$(x, v)\in\underline{\partial}\varphi \Leftrightarrow \varphi(x)+\varphi^*(v) = \underline{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(7)}$$

が成り立つ．

3. 最適輸送計画と凸関数

BGM : your side

問題 1. 単調巡回である集合 $A \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ と $(x_0, v_0) \in A$ に対し,

$$\varphi_L(x) \coloneqq \sup\left\{ \sum_{\ell=0}^{L} \langle x_{\ell+1} - x_\ell, v_\ell \rangle \;\middle|\; \{(x_\ell, v_\ell)\}_{\ell=1}^{L} \subset A,\ x_{L+1} = x \right\} \quad (x \in \mathbb{R}^n, L \in \mathbb{N})$$

と定義する. このとき任意の $x \in \mathbb{R}^n$ に対し, $\{\varphi_L(x)\}_{L \in \mathbb{N}}$ が単調増加列であることを示せ.

4. 最適輸送問題の双対問題

BGM : 進化論 ~GOOD MORNING! HELLO! 21st-century~

問題とその双対問題

本節でも引き続き $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を固定し, 最小化問題

$$\inf_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) \tag{4.1}$$

の双対問題, すなわち最大化問題を考える.

まず, 任意の $x, y \in \mathbb{R}^n$ に対して $|x-y|^2 = |x|^2 + |y|^2 - 2\langle x, y\rangle$ が成り立つので,

$$\inf_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 f(x)dx + \int_{\mathbb{R}^n} |y|^2 g(y)dy - 2\sup_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} \langle x, y\rangle d\pi(x,y)$$

を得る. よって最小化問題 (4.1) は最大化問題

$$\sup_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} \langle x, y\rangle d\pi(x,y)$$

と等価であるが, ここで考える最大化問題はこの問題ではない.

双対問題の定式化

定義 4.1. $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し

$$L^1(f) := \left\{ \phi\colon \mathbb{R}^n \to [-\infty, \infty)\colon \text{ボレル} \;\middle|\; \int_{\mathbb{R}^n} |\phi(x)| f(x)dx < \infty \right\}$$

と定義する. さらに,

$$\mathcal{A}(f,g) := \{(\phi,\psi) \in L^1(f)\times L^1(g) \mid \phi(x)+\psi(y) \le |x-y|^2 \ (x,y\in\mathbb{R}^n)\}$$

とおく.

例えば, ϕ, ψ を恒等的に 0 である関数として選べば, $(\phi,\psi) \in \mathcal{A}(f,g)$ である. また, 輸送計画 $\pi \in \Pi(f,g)$ に対する試験関数は $C_b(\mathbb{R}^n)$ から $L^1(f)$ や $L^1(g)$ に置き換えられる.

定理 4.2 (Kantorovich 双対)**.** 双対表現

$$\sup_{(\phi,\psi)\in\mathcal{A}(f,g)} \left(\int_{\mathbb{R}^n} \phi(x)f(x)dx + \int_{\mathbb{R}^n} \psi(y)g(y)dy \right) = \inf_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)$$

が成り立つ. さらに左辺の上限を達成する $(\phi,\psi) \in \mathcal{A}(f,g)$ が存在する.

証明. 任意の $(\phi,\psi) \in \mathcal{A}(f,g)$ と任意の $\pi \in \Pi(f,g)$ に対し,

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^n} \phi(x)f(x)dx + \int_{\mathbb{R}^n} \psi(y)g(y)dy &= \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} (\phi(x)+\psi(y))d\pi(x,y) \\ &\le \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)\end{aligned}$$

が成り立つ. よって $(\phi,\psi) \in \mathcal{A}(f,g)$ に関して上限, $\pi \in \Pi(f,g)$ に関して下限をとると,

$$\sup_{(\phi,\psi)\in\mathcal{A}(f,g)} \left(\int_{\mathbb{R}^n} \phi(x)f(x)dx + \int_{\mathbb{R}^n} \psi(y)g(y)dy \right) \le \inf_{\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)$$

を得る.

また, 定理 2.3 より最適輸送計画 $\pi \in \Pi(f,g)$ が存在する．そして定理 2.6 より $\mathrm{supp}(\pi)$ は巡回単調である．よって定理 3.4 より恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ が存在し, $\mathrm{supp}(\pi) \subset \underline{\partial}\varphi$ が成り立つ．ここで

$$\begin{aligned}\phi(x) &:= |x|^2 - 2\varphi(x) \quad (x \in \mathbb{R}^n),\\ \psi(y) &:= |y|^2 - 2\varphi^*(y) \quad (y \in \mathbb{R}^n)\end{aligned}$$

と定めれば, $\phi,\psi\colon \mathbb{R}^n \to [-\infty,\infty)$ はともに恒等的に $-\infty$ ではなく, そして

$$\phi(x)+\psi(y) = |x|^2+|y|^2-2(\varphi(x)+\varphi^*(y)) \leq |x|^2+|y|^2-2\langle x,y\rangle = |x-y|^2 \quad (x,y \in \mathbb{R}^n)$$

をみたす．とくに $(x,y) \in \mathrm{supp}(\pi) \subset \underline{\partial}\varphi$ ならば

$$\phi(x)+\psi(y) = |x-y|^2$$

が成り立つ．この等式を $\mathrm{supp}(\pi)$ 上で π に関して積分すると

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} (\phi(x)+\psi(y))d\pi(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)$$

である．また, $(x',y') \in \mathrm{supp}(\pi) \subset \underline{\partial}\varphi$ ならば $\varphi(x'),\varphi^*(y') \in \mathbb{R}$ であることから $\phi(x'),\psi(y') \in \mathbb{R}$ が従い,

$$\begin{aligned}\phi(x) &\leq |x-y'|^2 - \psi(y') \leq 2|x|^2 + \bigl(2|y'|^2 - \psi(y')\bigr) \quad (x \in \mathbb{R}^n),\\ \psi(y) &\leq |x'-y|^2 - \phi(x') \leq 2|y|^2 + \bigl(2|x'|^2 - \phi(x')\bigr) \quad (y \in \mathbb{R}^n)\end{aligned}$$

が成り立つので, $\phi \in L^1(f)$ および $\psi \in L^1(g)$ を得る．よって $(\phi,\psi) \in \mathcal{A}(f,g)$ が成り立つので,

$$\begin{aligned}\sup_{(\tilde\phi,\tilde\psi)\in\mathcal{A}(f,g)} \left(\int_{\mathbb{R}^n} \tilde\phi(x)f(x)dx \int_{\mathbb{R}^n} \tilde\psi(y)g(y)dy\right) &\geq \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} (\phi(x)+\psi(y))d\pi(x,y)\\ &= \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)\\ &= \inf_{\tilde\pi\in\Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\tilde\pi(x,y)\end{aligned}$$

となる．

以上より定理が示された． □

定理 4.2 の証明から次を得る．

系 4.3. 次の 2 条件をみたす恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ が存在する．:

- $(\phi,\psi) := \bigl(|\cdot|^2 - 2\varphi, |\cdot|^2 - 2\varphi^*\bigr)$ は $\mathcal{A}(f,g)$ に属する．
- (ϕ,ψ) は $\displaystyle\sup_{(\tilde\phi,\tilde\psi)\in\mathcal{A}(f,g)} \left(\int_{\mathbb{R}^n} \tilde\phi(x)f(x)dx + \int_{\mathbb{R}^n} \tilde\psi(y)g(y)dy\right)$ の上限を達成する

系 4.3 の 2 条件をみたす恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ を f から g への Kantorovich ポテンシャルとよぶ．(通常は双対問題の上限を達成する $(\phi,\psi) \in \mathcal{A}(f,g)$ を Kantorovich ポテンシャルとよぶことに注意.) Kantorovich ポテンシャル φ と実数 λ に対し, $\varphi+\lambda$ もまた Kantorovich ポテンシャルになる．

また, 最適輸送写像 $T \in \mathcal{T}(f,g)$ に対し, 恒等的に ∞ でない下半連続な関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ がほとんどすべての $x \in \mathrm{supp}(f)$ に対して $T(x) = \nabla\varphi(x)$ をみたすならば, φ は f から g への Kantorovich ポテンシャルである．

4. 最適輸送問題の双対問題

BGM：進化論 ~GOOD MORNING! HELLO! 21st-century~

$f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し

$$L^1(f) \coloneqq \left\{ \phi\colon \mathbb{R}^n \to [-\infty, \infty)\colon \text{ボレル} \;\middle|\; \int_{\mathbb{R}^n} |\phi(x)| f(x) dx < \infty \right\}$$

と定義する．さらに，

$$\mathcal{A}(f,g) \coloneqq \{(\phi,\psi) \in L^1(f) \times L^1(g) \mid \phi(x)+\psi(y) \le \underline{\hspace{4cm}}_{(1)} \ (x,y \in \mathbb{R}^n)\}$$

とおく．すると双対表現

$$\sup_{(\tilde{\phi},\tilde{\psi}) \in \mathcal{A}(f,g)} \left(\underline{\hspace{10cm}}_{(2)} \right) = \inf_{\pi \in \Pi(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y)$$

が成り立つ．さらに左辺の上限を達成する $(\phi,\varphi) \in \mathcal{A}(f,g)$ が存在する．

実際，最適輸送計画 $\pi \in \Pi(f,g)$ の台の単調巡回性から導かれる恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ に対し，

$$\begin{aligned} \phi(x) &\coloneqq \underline{\hspace{4cm}}_{(3)} \quad (x \in \mathbb{R}^n), \\ \psi(y) &\coloneqq \underline{\hspace{4cm}}_{(4)} \quad (y \in \mathbb{R}^n) \end{aligned}$$

と定めれば,$(\phi,\varphi) \in \mathcal{A}(f,g)$ である．そして

$$\phi(x)+\psi(y) \le \underline{\hspace{3cm}}_{(1)} \ (x,y \in \mathbb{R}^n)$$

であり，さらに $(x,y) \in \mathrm{supp}(\pi) \subset \underline{\hspace{3cm}}_{(5)}$ ならば等号が成り立つ．よって上式を π で積分すると (ϕ,ψ) は上記の上限を達成することがわかり，そして双対表現を得る．

以上より，次の 2 条件をみたす恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ が存在する．:

- $(\phi,\psi) \coloneqq \left(\underline{\hspace{10cm}}_{(6)} \right)$ は $\mathcal{A}(f,g)$ に属する．
- (ϕ,ψ) は $\displaystyle\sup_{(\tilde{\phi},\tilde{\psi}) \in \mathcal{A}(f,g)} \left(\underline{\hspace{10cm}}_{(2)} \right)$ の上限を達成する

この 2 条件をみたす恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ を f から g への $\underline{\hspace{5cm}}_{(7)}$ とよぶ．

4. 最適輸送問題の双対問題

BGM：進化論 ~GOOD MORNING! HELLO! 21st-century~

問題 1. $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を固定する.

(1) 輸送計画 $\pi \in \Pi(f, g)$ に対し,

$$\mathrm{supp}(\pi) \subset \mathrm{supp}(f) \times \mathrm{supp}(g)$$

が成り立つことを示せ.

(2) 最適輸送写像 $T \in \mathcal{T}(f, g)$ に対し, 恒等的に ∞ でない下半連続な関数 $\varphi \colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ がほとんどすべての $x \in \mathrm{supp}(f)$ に対して $T(x) = \nabla\varphi(x)$ をみたすならば, φ は f から g への Kantorovich ポテンシャルであることを示せ.

5. 最適輸送写像の一意存在

BGM：綺麗なメロディー

主張と証明

本節では最適輸送計画と最適輸送計画写像の一意存在を示す．これは定理 1.5 と同値な主張である．

そのために再び $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を固定する．また, $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ は恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数とする．そして $\varphi^{-1}(\mathbb{R})$ の内部のほとんど至るところ微分可能であることを鑑みて, 次のボレル写像を定義する．

定義 5.1. 恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ に対して

$$\Omega_\varphi := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \underline{\partial}\varphi(x) = \{\nabla\varphi(x)\}\}$$

と定め, さらに写像 $T_\varphi\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ を

$$T_\varphi(x) := \begin{cases} \nabla\varphi(x) & (x \in \Omega_\varphi), \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$$

と定める．

すると $\varphi^{-1}(\mathbb{R}) \setminus \Omega_\varphi$ のルベーグ測度に関する測度は 0 かつ T_φ はボレル写像である．

定理 5.2. f から g への *Kantorovich* ポテンシャル φ が定数の差を除いて一意的に存在し, $T_\varphi \in \mathcal{T}(f, g)$ が成り立つ．さらに T_φ は唯一の最適輸送写像, π^{T_φ} は唯一の最適輸送計画になる．ただし *Kantorovich* ポテンシャルと輸送写像の一意性は f に関するものである．

証明. 定理 2.3 から最適輸送計画 $\pi \in \Pi(f, g)$ が存在する． また, 系 4.3 より f から g への Kantorovich ポテンシャル φ が存在する．ここで φ は π から定まるものとは限らないとする．

凸共役の定義より, 任意の $(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ に対して $\varphi(x) + \varphi^*(y) \geq \langle x, y\rangle$ が成り立つ．一方, Kantorovich ポテンシャルの定義から

$$\int_{\mathbb{R}^n} (\varphi(x) + \varphi^*(y) - \langle x, y\rangle)\, d\pi = 0$$

が従うので, ほとんどすべての $(x, y) \in \mathrm{supp}(\pi)$ に対して $\varphi(x) + \varphi^*(y) = \langle x, y\rangle$ が成り立ち, $(x, y) \in \underline{\partial}\varphi \subset \varphi^{-1}(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^n$ を得る．よって

$$\int_{\varphi^{-1}(\mathbb{R})} f(x)dx = \int_{\varphi^{-1}(\mathbb{R}) \times \mathbb{R}^n} d\pi(x, y) = 1$$

が成り立つ． さらに $\varphi^{-1}(\mathbb{R}) \setminus \Omega_\varphi$ のルベーグ測度に関する測度は 0 なので, ほとんどすべての $(x, y) \in \mathrm{supp}(\pi)$ に対し, $y = \nabla\varphi(x)$ となる．

以上より, $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対して $h \circ T_\varphi \in L^1(f)$ かつ

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^n} h(y)g(y)dy = \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} h(y)d\pi(x, y) &= \int_{\mathrm{supp}(\pi) \cap (\Omega_\varphi \times \mathbb{R}^n)} h(y)d\pi(x, y) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} h(T_\varphi(x))d\pi(x, y) = \int_{\mathbb{R}^n} h(T_\varphi(x))f(x)dx\end{aligned}$$

が成り立つので, $T_\varphi \in \mathcal{T}(f, g)$ である．そして同様の議論で, $H \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)$ に対して

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(x, y)d\pi(x, y) = \int_{\mathbb{R}^n} H(x, T_\varphi(x))f(x)dx$$

が成り立つので, $\pi = \pi^{T_\varphi}$ である．よって最適輸送計画は π^{T_φ} に一意に定まり, そして T_φ は最適輸送写像であることがわかる．

すると最適輸送写像 $T \in \mathcal{T}(f,g)$ に対し, π^T もまた最適輸送計画になるので, $\pi^T = \pi^{T_\varphi}$ が成り立つ. よって $\mathrm{supp}(\pi^T) = \mathrm{supp}(\pi^{T_\varphi})$ であり, ほとんどすべての $(x,y) \in \mathrm{supp}(\pi^T) \cap (\Omega_\varphi \times \mathbb{R}^n)$ に対して $y = T(x) = T_\varphi(x)$ が成り立つ. すなわち, 最適輸送写像は f に関して T_φ に一意に定まる.

また, 上記の議論から任意の Kantorovich ポテンシャルの勾配は φ の勾配と $\mathrm{supp}(f)$ 上のほとんど至るところで一致する. よって Kantorovich ポテンシャルも f に関して一意に定まる.

以上より定理が示された. □

f から g への Kantorovich ポテンシャル φ に対し, $(\varphi^*)^* = \varphi$ が成り立つので, φ^* は g から f への Kantorovich ポテンシャルになる. そして最適輸送計画の一意性から

$$T_{\varphi^*}(T_\varphi(x)) = x \quad (x \in \Omega_\varphi)$$

従い, T_φ が Ω_φ 上で単射であるとわかる. さらに φ は Ω_φ 上のほとんど至るところ 2 階微分可能なので, 変数変換を経て次の Monge–Ampère 方程式を得る.

系 5.3. *f から g への Kantorovich ポテンシャル φ に対し,*

$$f(x) = g(\nabla\varphi(x)) \det(H_\varphi(x))$$

が Ω_φ のほとんどすべての点 x に対し成り立つ. ただし, H_φ は φ のヘッセ行列を表す.

よって f から g への Kantorovich ポテンシャル φ に対し, H_φ は $\mathrm{supp}(f)$ のほとんど至るところで正定値になる.

関連事項

系 5.4. *恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ に対し, $T_\varphi \in \mathcal{T}(f,g)$ ならば, φ は f から g への Kantorovich ポテンシャルである.*

証明. 恒等的に $-\infty$ でない 2 つの関数 $\phi, \phi^{\mathsf{c}}\colon \mathbb{R}^n \to [-\infty,\infty)$ を

$$\phi(x) := |x|^2 - 2\varphi(x) \quad (x \in \mathbb{R}^n), \qquad \phi^{\mathsf{c}}(y) := |y|^2 - 2\varphi^*(y) \quad (y \in \mathbb{R}^n)$$

と定め, $x' \in \Omega_\varphi$ を固定して $y' := \nabla\varphi(x')$ とおくと,

$$\phi(x) \le 2|x|^2 + \bigl(2|y'|^2 - \phi^{\mathsf{c}}(y')\bigr) \quad (x \in \mathbb{R}^n), \qquad \phi^{\mathsf{c}}(y) \le 2|y|^2 + \bigl(2|x'|^2 - \phi(x')\bigr) \quad (y \in \mathbb{R}^n)$$

が成り立つ. さらに $(x,y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ に対して $\phi(x) + \phi^{\mathsf{c}}(y) \le |x-y|^2$ であり, とくに $(x,y) \in \underline{\partial}\varphi$ ならば $\phi(x) + \phi^{\mathsf{c}}(y) = |x-y|^2$ である. よって $(\phi,\phi^{\mathsf{c}}) \in \mathcal{A}(f,g)$ であり, $\pi^{T_\varphi}(\Omega_\varphi \times \mathbb{R}^n) = 1$ および

$$\phi(x) + \phi^{\mathsf{c}}(y) = |x-y|^2 \quad ((x,y) \in \mathrm{supp}(\pi^{T_\varphi}) \cap (\Omega_\varphi \times \mathbb{R}^n))$$

が成り立つので, φ は f から g への Kantorovich ポテンシャルである. □

任意の $\tau \in (0,1)$ に対し,

$$\varphi_\tau(z) := (1-\tau)\frac{|z|^2}{2} + \tau\varphi(z) \quad (z \in \mathbb{R}^n)$$

と定めれば, $\varphi_\tau\colon \mathbb{R}^n \to (-\infty,\infty]$ は恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数である. さらに Ω_φ 上で T_{φ_τ} は単射であり, H_{φ_τ} は正定値になる. そして変数変換から次が直ちに従う.

定理 5.5. *任意の $\tau \in (0,1)$ に対し, $f_\tau\colon \mathbb{R}^n \to [-\infty,\infty]$ を*

$$f_\tau(z) := \begin{cases} \dfrac{f(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z))}{\det(H_{\varphi_\tau}(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z)))} & (z \in T_{\varphi_\tau}(\Omega_\varphi) \text{ かつ } \det(H_{\varphi_\tau}(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z))) > 0) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$$

と定めれば, $f_\tau \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ であり, φ_τ は f から f_τ への Kantorovich ポテンシャルである.

5. 最適輸送写像の一意存在

BGM：綺麗なメロディー

任意の $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し, f から g への Kantorovich ポテンシャル φ が定数の差を除いて一意的に存在する. さらに

$$\Omega_\varphi \coloneqq \{x \in \mathbb{R}^n \mid \underline{\partial}\varphi(x) = \{\underline{\hspace{4cm}}_{(1)}\}\}$$

と定め, さらに写像 $T_\varphi \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ を

$$T_\varphi(x) \coloneqq \begin{cases} \underline{\hspace{4cm}}_{(1)} & (x \in \Omega_\varphi), \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$$

と定めれば, $T_\varphi \in \mathcal{T}(f, g)$ が成り立ちそして唯一の最適輸送写像となる. さらに π_{T_φ} もまた唯一の最適輸送計画になる.

この主張の証明の概略を述べる. φ を Kantorovich ポテンシャル, π を最適輸送計画とする. まず, 凸共役の定義より, 任意の $(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ に対して

$$\varphi(x) + \varphi^*(y) \geq \underline{\hspace{4cm}}_{(2)}$$

が成り立つ. 一方, Kantorovich ポテンシャルの定義から

$$\int_{\mathbb{R}^n} (\varphi(x) + \varphi^*(y) - \langle x, y \rangle)\, d\pi = \underline{\hspace{4cm}}_{(3)}$$

が従うので, ほとんどすべての $(x, y) \in \mathrm{supp}(\pi)$ に対して

$$\varphi(x) + \varphi^*(y) = \underline{\hspace{4cm}}_{(2)}$$

が成り立ち, $(x, y) \in \underline{\partial}\varphi$ を得る. よってほとんすべての $(x, y) \in \mathrm{supp}(\pi)$ に対し, $y = \underline{\hspace{4cm}}_{(1)}$ が成り立つ. 以上の考察より, 主張が示される.

また, f から g への Kantorovich ポテンシャル φ に対し, $(\underline{\hspace{3cm}}_{(4)})^* = \varphi$ が成り立つので, $\underline{\hspace{3cm}}_{(4)}$ は g から f への Kantorovich ポテンシャルになる. そして最適輸送計画の一意性から

$$T_{\varphi^*}(T_\varphi(x)) = \underline{\hspace{3cm}}_{(5)} \quad (x \in \Omega_\varphi)$$

従うので,T_φ は Ω_φ 上で単射である. さらに φ は Ω_φ 上でほとんど至るところ 2 階微分可能なので, $\underline{\hspace{4cm}}_{(6)}$ 方程式

$$f(x) = g(\underline{\hspace{4cm}}_{(1)}) \det(H_\varphi(x))$$

が Ω_φ のほとんどすべての点 x に対し成り立つ. ただし, H_φ は φ のヘッセ行列を表す.

さらに任意の $\tau \in (0, 1)$ に対し,

$$\varphi_\tau(z) \coloneqq (1 - \tau)\frac{|z|^2}{2} + \tau\varphi(z) \quad (z \in \mathbb{R}^n)$$

と定めれば, $\varphi_\tau \colon \mathbb{R}^n \to (-\infty, \infty]$ は恒等的に ∞ でない下半連続な凸関数である. そして関数 $f_\tau \colon \mathbb{R}^n \to [-\infty, \infty]$ を

$$f_\tau(z) \coloneqq \begin{cases} \underline{\hspace{7cm}}_{(7)} & (z \in T_{\varphi_\tau}(\Omega_\varphi) \text{ かつ } \det(H_{\varphi_\tau}(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z))) > 0) \\ 0 & (\text{ その他 }) \end{cases}$$

と定めれば, $f_\tau \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ であり, φ_τ は f から f_τ への Kantorovich ポテンシャルである.

5. 最適輸送写像の一意存在

BGM：綺麗なメロディー

問題 1. $u, v \in \mathbb{R}^n$ および n 次正定値対称行列 U, V を固定する．また，ボレル関数 $\rho\colon \mathbb{R} \to [0, \infty)$ は

$$\int_0^\infty \rho(r) r^{n-1} dr = \frac{\Gamma(\frac{n}{2})}{2\pi^{\frac{n}{2}}}, \qquad m_2 := \int_0^\infty \rho(r) r^{n+1} dr < \infty$$

をみたすとし，

$$f_U(x) := \frac{1}{\sqrt{\det U}} \rho(\langle x-u, U^{-1}(x-u)\rangle^{\frac{1}{2}}) \quad (x \in \mathbb{R}^n)$$

と定める．

(1) $f_{u,U} \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を示せ．

(2) $X^2 = U$ をみたす n 次正定値対称行列 X が一意的に存在することを示せ．この X を $U^{1/2}$ または $\sqrt{U}$ と書き，その逆行列を $U^{-1/2}$ と書く．

(3)

$$\varphi(x) := \frac{1}{2} \left\langle x-u, V^{\frac{1}{2}} \left(V^{\frac{1}{2}} U V^{\frac{1}{2}} \right)^{-\frac{1}{2}} V^{\frac{1}{2}} (x-u) \right\rangle + \langle x, v \rangle$$

により定まる関数 $\varphi\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ が $f_{u,V}$ から $f_{v,V}$ への Kantorovich ポテンシャルになることを示せ．

(4) 関係式

$$\inf_{\pi \in \Pi(f_{u,U}, f_{v,V})} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) = |u-v|^2 + m_2 \cdot \left(\operatorname{tr} U + \operatorname{tr} V - 2 \operatorname{tr} \sqrt{V^{\frac{1}{2}} U V^{\frac{1}{2}}} \right)$$

を示せ．

6. 最適輸送理論が導く距離構造

定義と確認

定義 6.1. 任意の $f,g\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$d(f,g):=\left(\inf_{\pi\in\Pi(f,g)}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\pi(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\inf_{T\in\mathcal{T}(f,g)}\int_{\mathbb{R}^n}|x-T(x)|^2f(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}$$

とおく.

定理 6.2. $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n),d)$ は距離空間である.

証明. 任意の $f,g\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を固定する. このとき, $d(f,g)\in[0,\infty)$ になることは既にみた.

もし $f=g$ ならば, $\mathbb{R}^n$ 上の恒等写像 $\mathrm{id}_{\mathbb{R}^n}$ は f から g への輸送写像となる. よって

$$0\le d(f,g)^2\le\int_{\mathbb{R}^n}|x-x|^2f(x)dx=0$$

より $d(f,g)=0$ である. 逆に $d(f,g)=0$ ならば, 最適輸送写像 $T\in\mathcal{T}(f,g)$ に対し, $\mathrm{supp}(f)$ のほとんど至るところで $T=\mathrm{id}_{\mathbb{R}^n}$ が成り立つので, $f=g$ となる.

また, 写像 $\overset{\leftrightarrow}{}:\Pi(f,g)\to\Pi(g,f)$ を

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}H(x,y)d\overset{\leftrightarrow}{\pi}(x,y):=\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}H(y,x)d\pi(x,y)\quad(H\in C_b(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n))$$

と定めれば, これは全単射写像である. よって

$$\begin{aligned}d(g,f)^2=\inf_{\pi'\in\Pi(g,f)}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\pi'(x,y)&=\inf_{\pi\in\Pi(f,g)}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\overset{\leftrightarrow}{\pi}(x,y)\\&=\inf_{\pi\in\Pi(f,g)}\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|y-x|^2d\pi(x,y)=d(f,g)^2\end{aligned}$$

が成り立つので, d は対称である.

そして $\rho\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ および最適輸送写像 $T\in\mathcal{T}(\rho,f)$ と最適輸送写像 $S\in\mathcal{T}(\rho,g)$ に対し, $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 $\widetilde{\pi}$ と $\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π をそれぞれ

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}\widetilde{H}(x,y,z)d\widetilde{\pi}(x,y,z):=\int_{\mathbb{R}^n}\widetilde{H}(T(z),S(z),z)\rho(z)dz\quad(\widetilde{H}\in C_b(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n)),$$

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}H(x,y)d\pi(x,y):=\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}H(x,y)d\widetilde{\pi}(x,y,z)\quad(H\in C_b(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n))$$

と定める. すると $\pi\in\Pi(f,g)$ であり, L^2-ノルムに対する三角不等式から

$$\begin{aligned}d(f,g)&\le\left(\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-y|^2d\pi(x,y)\right)^{\frac{1}{2}}=\left(\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-z+z-y|^2d\widetilde{\pi}(x,y,z)\right)^{\frac{1}{2}}\\&\le\left(\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|x-z|^2d\widetilde{\pi}(x,y,z)\right)^{\frac{1}{2}}+\left(\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n}|z-y|^2d\widetilde{\pi}(x,y,z)\right)^{\frac{1}{2}}\\&=\left(\int_{\mathbb{R}^n}|T(z)-z|^2\rho(z)dz\right)^{\frac{1}{2}}+\left(\int_{\mathbb{R}^n}|S(z)-z|^2\rho(z)dz\right)^{\frac{1}{2}}=d(f,\rho)+d(\rho,g)\end{aligned}$$

が従うので, d は三角不等式をみたす.

以上より, d が $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ 上の距離関数であることが示された. □

余談

距離関数 d は L^2-Wasserstein 距離関数 (あるいは 2-Wasserstein 距離関数もしくは単に Wasserstein 距離関数) とよばれ, W_2 と書かれることが多い. しかし最近の個人的嗜好としては, 2-Monge–Kantorovich 距離関数とよび, MK_2 という記号を用いたい. 上記はミシガン州立大学の北川潤氏との共著で使用し, 北川氏の発案により

```
\DeclareMathOperator{\mk}{M\MRkern K}
\newcommand{\MRkern}
{
  \mkern-5.8mu
  \mathchoice{}{}{\mkern0.2mu}{\mkern0.5mu}
}
```

というコマンドを用いている.

この距離関数はもともと, 2 次モーメントが有限な $\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度がなす集合 $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ 上の距離関数として定義されていること言い添えておきたい. また, $\mathbb{R}^n$ の代わりに完備かつ可分な距離空間を考えることもできる

性質

距離関数 d に関する収束は弱収束よりも強い. より正確には, 点列 $(f_k)_{k\in\mathbb{N}} \subset \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n$ に対し, $(f_k)_{k\in\mathbb{N}}$ が d に関して f に収束することは, $(f_k)_{k\in\mathbb{N}}$ が f に弱収束してさらに

$$\limsup_{k\to\infty} \int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 f_k(x)dx \le \int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 f(x)dx$$

が成り立つことに同値である. また, $(1+|\cdot|^2)^{-1}h$ が $\mathbb{R}^n$ 上で有界である任意の $h \in C_b(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$\lim_{k\to\infty} \int_{\mathbb{R}^n} h(x) f_k(x)dx = \int_{\mathbb{R}^n} h(x) f(x)dx$$

をみたすこととも同値である.

そして距離空間 $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ は完備ではない. 実際, 自然数 k に対し, 関数 $f_k \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を

$$f_k(x) := \begin{cases} k^{-n} & (x \in [0,k]^n) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$$

と定めれば, $(f_k)_{k\in\mathbb{N}}$ は $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ のコーシー列であるが, 収束しない. 一方, d を $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ 上の距離関数とみなせば, これは完備であり, さらに可分でもある. 例えば,

$$\bigcup_{L\in\mathbb{N}} \left\{ \sum_{\ell=1}^{L} a_\ell \delta_{x_\ell} \;\middle|\; \text{任意の } \ell = 1, \dots, L \text{ に対して } a_\ell \in [0,1] \cap \mathbb{Q}, x_\ell \in \mathbb{Q}^n \text{ かつ } \sum_{\ell=1}^{L} a_\ell = 1 \right\}$$

は $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d)$ の稠密な集合である. ただし, $x \in \mathbb{R}^n$ に対して δ_x は x におかれた Dirac 測度, すなわち

$$\int_{\mathbb{R}^n} h(x')d\delta_x(x') = h(x) \quad (h \in C_b(\mathbb{R}^n))$$

により定まる $\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度である. そして, $(f_k)_{k\in\mathbb{N}}$ は $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ において Dirac 測度 δ_0 に収束する.

6. 最適輸送理論が導く距離構造

BGM : Place〜

定義と確認

任意の $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$d(f,g) \coloneqq \left(\inf_{T \in \mathcal{T}(f,g)} \int_{\mathbb{R}^n} \underline{\hspace{15em}}_{(1)} \right)^{\frac{1}{2}}$$

と定めれば, $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ は距離空間である. 距離関数 d は L^2-Wasserstein 距離関数 (あるいは 2-Wasserstein 距離関数もしくは単に Wasserstein 距離関数) とよばれ, W_2 と書かれることが多い.

実際, $d(f,g) \in [0, \infty)$ であり, もし $f = g$ ならば, $\underline{\hspace{4em}}_{(2)}$ は f から g への輸送写像となるので

$$0 \le d(f,g)^2 \le \int_{\mathbb{R}^n} \underline{\hspace{10em}}_{(3)} = 0$$

から $d(f,g) = 0$ が従う. 逆に $d(f,g) = 0$ ならば, 最適輸送写像 $T \in \mathcal{T}(f,g)$ に対し, $\mathrm{supp}(f)$ のほとんど至るところで $T = \underline{\hspace{4em}}_{(2)}$ が成り立つので, $f = g$ となる.

また, 写像 $\overset{\leftrightarrow}{}: \Pi(f,g) \to \Pi(g,f)$ を

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(x,y) d\overset{\leftrightarrow}{\pi}(x,y) \coloneqq \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \underline{\hspace{15em}}_{(4)} \qquad (H \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n))$$

と定めれば, これは全単射写像である, よって

$$d(g,f) = d(f,g)$$

が従う.

そして $\rho \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ および最適輸送写像 $T \in \mathcal{T}(\rho, f)$ と最適輸送写像 $S \in \mathcal{T}(\rho, g)$ に対し, $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 $\widetilde{\pi}$ と $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π をそれぞれ

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} \widetilde{H}(x,y,z) d\widetilde{\pi}(x,y,z) \coloneqq \int_{\mathbb{R}^n} \widetilde{H}(T(z), S(z), z) \rho(z) dz \quad (\widetilde{H} \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)),$$

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(x,y) d\pi(x,y) \coloneqq \underline{\hspace{15em}}_{(5)} \qquad (H \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n))$$

と定める. すると $\pi \in \Pi(f,g)$ であり, L^2-ノルムに対する三角不等式から

$$d(f,g) \le d(f,\rho) + d(\rho,g)$$

が従うので, d は三角不等式をみたす.

そして点列 $(f_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n$ に対し, $(f_k)_{k \in \mathbb{N}}$ が d に関して f に収束することは, $(f_k)_{k \in \mathbb{N}}$ が f に弱収束してさらに

$$\underline{\hspace{15em}}_{(6)} \le \int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 f(x) dx$$

が成り立つことに同値である. そして距離空間 $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ は完備で $\underline{\text{選択: ある / はない}}_{(7)}$.

6. 最適輸送理論が導く距離構造

BGM：Place～

問題 1. 2 次モーメントが有限な $\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度がなす集合を $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ と書く．すなわち，

$$\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n) = \left\{ \mu\colon\ \mathbb{R}^n \text{ 上のボレル確率測度} \,\middle|\, \int_{\mathbb{R}^n} |x|^2 d\mu(x) < \infty \right\}$$

である．そして $\mu, \nu \in \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ に対し，($f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の場合と同じ記号を用いて)

$$\Pi(\mu,\nu) := \left\{ \pi\colon \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \text{上のボレル確率測度} \,\middle|\, \begin{array}{l} \pi(B \times \mathbb{R}^n) = \mu(B) \text{ かつ} \\ \pi(\mathbb{R}^n \times B) = \nu(B) \quad (B \subset \mathbb{R}^n\text{:ボレル}) \end{array} \right\}$$

と定める．

(1) $\Pi(\mu,\nu) \neq \emptyset$ かつ

$$d(\mu,\nu) := \left(\inf_{\pi \in \Pi(\mu,\nu)} \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |x-y|^2 d\pi(x,y) \right)^{\frac{1}{2}} < \infty$$

を示せ．

(2) 上記の上限を達成する $\pi \in \Pi(\mu,\nu)$ が存在することを示せ．

(3) 上記の上限をを達成する $\pi \in \Pi(\mu,\nu)$ が 2 つ以上存在する μ, ν の例を与えよ．

(4) $(\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n), d)$ が距離空間であることを示せ．

7. 最適輸送問題の動的解釈

BGM : Yes, attention

本節では $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ の測地性を確認したのちに, Benamou–Brenier 公式とよばれる最適輸送問題の解釈を説明する.

測地性

定義 7.1. (X, d_X) を距離空間とする．写像 $\gamma\colon [0,1] \to X$ が最短測地線であるとは

$$d_X(\gamma, \gamma) = |\tau - \tau'| d_X(\gamma(0), \gamma(1)) \quad (\tau, \tau' \in [0,1])$$

をみたすことである．また，(X, d_X) が測地的であるとは，X の任意の 2 点を結ぶ最短測地線が存在することである.

定理 7.2. 距離空間 $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ は測地的である.

証明. 任意の $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と f から g の Kantorovich ポテンシャル φ および $\tau \in [0,1]$ に対し,

$$f_\tau(z) := \begin{cases} \dfrac{f(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z))}{\det(H_{\varphi_\tau}(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z)))} & (z \in T_{\varphi_\tau}(\Omega_\varphi) \text{ かつ } \det(H_{\varphi_\tau}(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z)) > 0) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \tag{7.1}$$

と定める．すると $f_0 = f$ および $f_1 = g$ が成り立つ．また, 任意の $\tau, \tau' \in [0,1]$ に対し, $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 $\pi_{\tau,\tau'}$ を

$$\int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(z, z') d\pi_{\tau,\tau'}(z, z') := \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} H(T_{\varphi_\tau}(x), T_{\varphi'_\tau}(x)) f(x) dx \quad (H \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n))$$

と定めれば, $\pi_{\tau,\tau'} \in \Pi(f_\tau, f_{\tau'})$ である．よって,

$$\begin{aligned} d(f_\tau, f_{\tau'})^2 &\le \int_{\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n} |z - z'|^2 d\pi_{\tau,\tau'}(z, z') \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} |T_{\varphi_\tau}(x) - T_{\varphi'_\tau}(x)|^2 f(x) dx = \int_{\mathbb{R}^n} (\tau - \tau')^2 \cdot |x - T_\varphi(x)|^2 f(x) dx = |\tau - \tau'|^2 d(f, g)^2 \end{aligned}$$

が成り立つ．ここで $\tau < \tau'$ とすると, 三角不等式とあわせて

$$d(f, g) \le d(f, f_\tau) + d(f_\tau, f_{\tau'}) + d(f_{\tau'}, g) = \{\tau + (\tau' - \tau) + (1 - \tau')\} d(f, g) = d(f, g)$$

が成り立つので, $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ は f と g を結ぶ最短測地線である. □

また, $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の任意の 2 点を結ぶ最短測地線は (7.1) の形に限ることが知られている.

オイラー的描写とラグランジュ的描写

以下, 写像 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を考える．写像が適切な正則性をみたすならば, あるボレル写像族 $(\xi_\tau\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{\tau \in [0,1]}$ が存在して連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial \tau} f_\tau(x) + \operatorname{div}(f_\tau(x) \xi_\tau(x)) = 0 \quad ((\tau, x) \in (0,1) \times \mathbb{R}^n)$$

が超関数の意味で, すなわち $(0,1) \times \mathbb{R}^n$ 上の台がコンパクトな C^∞ 級関数 $h_\tau(x) = h(\tau, x)$ に対して

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{\partial h}{\partial \tau}(\tau, x) + \langle \xi_\tau(x), \nabla h_\tau(x) \rangle \right) f_\tau(x) dx d\tau = 0 \quad ((\tau, x) \in (0,1) \times \mathbb{R}^n)$$

が成り立つことや, あるボレル写像族 $(T_\tau\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{\tau \in [0,1]}$ が存在して

$$T_0 = \mathrm{id}_{\mathbb{R}^n}, \quad f_\tau = T_{\tau\sharp} f_0 \quad (\tau \in [0,1])$$

が成り立つことが知られている.

ここで連続の方程式は質量保存則, すなわち

$$\int_{\mathbb{R}^n} f_\tau(x)dx = 1 \quad (\tau \in [0,1])$$

に由来するオイラー的な描写であり, $f_\tau(x)$ と $\xi_\tau(x)$ は時刻 τ おける位置 x における流体のの密度と速度をそれぞれ表す. 一方, 後者は粒子の動きを表すラグランジュアン的な描写であり, 曲線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ は時刻 $\tau = 0$ で位置 $x \in \mathbb{R}^n$ ある粒子が $\tau \mapsto \gamma_x(\tau) \coloneqq T_\tau(x)$ という軌道で運ばれるときの分布状態の遷移を表す. そして軌道, すなわち曲線 $\gamma_x\colon [0,1] \to \mathbb{R}^n$ と速度 $\xi_\tau(x)$ を

$$\xi_\tau(\gamma_x) = \dot{\gamma}_x(\tau) \quad \left(\text{ただし, } \dot{\gamma}_x(\tau) \coloneqq \frac{\partial \gamma_x}{\partial \tau}(\tau)\right) \tag{7.2}$$

という自然な関係により, 2 つのボレル写像族 $(\xi_\tau\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{\tau\in[0,1]}$ と $(T_\tau\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{\tau\in[0,1]}$ をで結びつけることができる. 例えば, $f_\tau = T_{\tau\sharp} f_0$ を仮定して関係式 (7.2) により流速 ξ_τ を定める. そして $(0,1)\times\mathbb{R}^n$ 上の台がコンパクトな C^∞ 級関数 $h_\tau(x) = h(\tau,x)$ に対して $H(\tau,x) \coloneqq h(\tau,\gamma_x(\tau))$ とおくと, 形式的には

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial h}{\partial \tau}(\tau,z)\cdot f_\tau(z)dz &= \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{\partial H}{\partial \tau}(\tau,x) - \langle \nabla h_\tau(\gamma_x(\tau)), \dot{\gamma}_x(x)\rangle\right) f_0(x)dx \\
&= \frac{d}{d\tau}\int_{\mathbb{R}^n} H(\tau,x)f_0(x)dx - \int_{\mathbb{R}^n} \langle \nabla h_\tau(\gamma_x(\tau)), v(\gamma_x(\tau))\rangle f_0(x)dx \\
&= \frac{d}{d\tau}\int_{\mathbb{R}^n} H(\tau,x)f_0(x)dx - \int_{\mathbb{R}^n} \langle \nabla h_\tau(z), v(z)\rangle f_\tau(z)dx
\end{aligned}$$

が成り立つので, $(f_\tau,\xi_\tau)_{\tau\in[0,1]}$ は連続の方程式をみたす. また逆に, $(f_\tau,\xi_\tau)_{\tau\in[0,1]}$ が連続の方程式をみたすとき, 関係式 (7.2) によりボレル写像族 T_τ を定めると, $f_\tau = T_{\tau\sharp} f_0$ が成り立つ.

動的エネルギー

連続の方程式をみたす組 $(f_\tau,\xi_\tau)_{\tau\in[0,1]}$ が各 $\tau \in [0,1]$ に対し $|\xi_\tau|^2 \in L^1(f_\tau)$ をみたすとする. 関係式 (7.2) によりボレル写像族 T_τ を定めると, 時刻 τ における運動エネルギーは

$$\frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^n} |\xi_\tau(z)|^2 f_\tau(z)dz = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^n} |\xi_\tau(T_\tau(x))|^2 f_0(x)dx = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^n} |\dot{\gamma}_x(\tau)|^2 f_0(x)dx$$

であり, 総運動エネルギーは

$$\int_0^1 \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^n} |\xi_\tau(z)|^2 f_\tau(z)dzd\tau = \frac{1}{2}\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n} |\dot{\gamma}_x(\tau)|^2 f_0(x)dxd\tau$$

である. ここで滑らかな曲線 $\gamma\colon [0,1] \to \mathbb{R}^n$ に対し,

$$|\dot{\gamma}(0) - \dot{\gamma}(1)|^2 \le \int_0^1 |\dot{\gamma}(\tau)|^2 d\tau$$

が成り立ち, 等号は γ が線分, すなわち最短測地線がときのみに達成されることより, 形式的には

$$\int_0^1\int_{\mathbb{R}^n} |\xi_\tau(z)|^2 f_\tau(z)dzd\tau \ge \int_0^1\int_{\mathbb{R}^n} |\gamma_x(0)-\gamma_x(1)|^2 f_0(x)dx = \int_0^1\int_{\mathbb{R}^n} |x-T_1(x)|^2 f_0(x)dx \ge d(f_0,f_1)^2$$

が成り立ち, 等号は $T_\tau = (1-t)\mathrm{id}_{\mathbb{R}^n} + tT_\varphi$ の場合のみに達成される. ただし, φ は f_0 から f_1 への Kantorovich ポテンシャルであり, $T_\tau = T_{\varphi_\tau}$ が成り立つ,

そして以上をまとめると,

$$d(f,g)^2 = \inf\left\{ \int_0^1\int_{\mathbb{R}^n} |\xi_\tau(z)|^2 f_\tau(z)dzd\tau \;\middle|\; \begin{array}{l} (f_\tau,\xi_\tau)_{\tau\in[0,1]} \text{ は連続の方程式および} \\ \text{初期条件 } (f_0,f_1) = (f,g) \text{ をみたす} \end{array} \right\} \quad (f,g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))$$

を得る. この関係式は Benamou–Brenier 公式とよばれる.

7. 最適輸送問題の動的解釈

BGM : Yes, attention

(X, d_X) を距離空間とする．写像 $\gamma\colon [0,1] \to X$ が最短測地線であるとは

$$d_X(\gamma, \gamma) = \underline{\hspace{8em}}_{(1)} = \quad (\tau, \tau' \in [0,1])$$

をみたすことである．また，(X, d_X) が測地的であるとは，X の任意の 2 点を結ぶ最短測地線が存在することである．

すると距離空間 $(\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n), d)$ は測地的である．実際，任意の $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と f から g の Kantorovich ポテンシャル φ および $\tau \in [0,1]$ に対し，

$$f_\tau(z) \coloneqq \begin{cases} \underline{\hspace{8em}}_{(2)} & (z \in T_{\varphi_\tau}(\Omega_\varphi) \text{ かつ } \det(H_{\varphi_\tau}(T_{\varphi_\tau}^{-1}(z)) > 0) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \tag{7.1}$$

と定めれば，$f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ は f と g を結ぶ最短測地線である．ここで

$$\varphi_\tau(x) = (1-\tau)\frac{|x|^2}{2} + \underline{\hspace{4em}}_{(3)} \quad (x \in \mathbb{R}^n), \qquad T_{\varphi_\tau}(z) = \underline{\hspace{6em}}_{(4)} \quad (z \in \Omega_\varphi)$$

である．そして $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の任意の 2 点を結ぶ最短測地線は (7.1) の形に限ることが知られている．

適切な正則性をみたす写像 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し，ボレル写像族 $(\xi_\tau\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{\tau\in[0,1]}$ が存在して $\underline{\hspace{5em}}_{(4)}$ の方程式

$$\frac{\partial}{\partial\tau} f_\tau(x) + \mathrm{div}(f_\tau(x)\xi_\tau(x)) = 0 \quad ((\tau, x) \in (0,1) \times \mathbb{R}^n)$$

が成り立つことや，ボレル写像族 $(T_\tau\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{\tau\in[0,1]}$ が存在して

$$T_0 = \mathrm{id}_{\mathbb{R}^n}, \quad f_\tau = \underline{\hspace{8em}}_{(5)} \quad (\tau \in [0,1])$$

が成り立つことが知られている．両者は

$$\xi_\tau(\gamma_x) = \underline{\hspace{5em}}_{(6)} \quad (\text{ただし，} \gamma_x(\tau) \coloneqq T_\tau(x))$$

という関係で結びつけらる．さらに $|\xi_\tau|^2 \in L^1(f_\tau)$ が成り立つとき，曲線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に沿った総運動エネルギーは

$$\int_0^1 \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^n} |\xi_\tau(z)|^2 f_\tau(z)\,dz\,d\tau = \frac{1}{2}\int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} \left| \underline{\hspace{6em}}_{(6)} \right|^2 f_0(x)\,dx\,d\tau$$

である．そして総エネルギーの最小値は始点と終点の距離の 2 乗に一致する，すなわち

$$d(f,g)^2 = \inf\left\{ \int_0^1 \int_{\mathbb{R}^n} |\xi_\tau(z)|^2 f_\tau(z)\,dz\,d\tau \;\middle|\; \begin{array}{l} (f_\tau, \xi_\tau)_{\tau\in[0,1]} \text{ は連続の方程式および} \\ \text{初期条件 } (f_0, f_1) = (f, g) \text{ をみたす} \end{array} \right\}$$

が成り立つ．この関係式は $\underline{\hspace{8em}}_{(7)}$ 公式とよばれる．

7. 最適輸送問題の動的解釈

BGM : Yes, attention

問題 1. 最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を考える．そして $i = 0, 1$ および $\tau \in (0,1)$ に対し，$T_i \in \mathcal{T}(f_\tau, f_i)$ を最適輸送写像を用いて $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 $\widetilde{\pi}$ と $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度 π をそれぞれ

$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} \widetilde{H} d\widetilde{\pi}^\tau := \int_{\mathbb{R}^n} \widetilde{H}(T_0(z), z, T_1(z)) f_\tau(z) dz \quad (\widetilde{H} \in C_b((\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)),$$
$$\int_{\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n} H d\pi := \int_{\mathbb{R}^n} H(T_0(z), T_1(z)) f_\tau(z) \quad (H \in C_b(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n))$$

と定める．

(1) π が f_0 から f_1 への最適輸送計画になることを示せ．

(2) ほとんどすべての $z \in \mathrm{supp}(f_\tau)$ に対し，ある $(x, y) \in \mathrm{supp}(\pi)$ が一意的に存在して

$$z = (1-\tau)x + \tau y$$

が成り立つことを示せ．

(3) f_0 から f_1 への Kantorovich ポテンシャル φ に対し，$f_\tau = T_{\varphi_\tau\sharp} f_0$ が成り立つことを示せ．

8. 関数の凸性

BGM：生涯労働行進曲

凸性

関数 $F \in C^2(\mathbb{R}^m)$ に対し, F が凸関数であることと, F のヘッセ行列がの最小固有値が常に 0 以上であることは同値である. より一般に, 実数 K に対し, $F - K|\cdot|^2/2$ が凸関数である, すなわち

$$F((1-\tau)x+\tau y) - \frac{K}{2}|(1-\tau)x+\tau y|^2 \leq (1-\tau)\left(F(x) - \frac{K}{2}|x|^2\right) + \tau\left(F(y) - \frac{K}{2}|y|^2\right)$$
$$\Leftrightarrow h((1-\tau)x+\tau y) \leq (1-\tau)h(x) + \tau h(y) - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)|x-y|^2 \qquad (x, y \in \mathbb{R}^m, \tau \in (0,1))$$

が成り立つことと, F のヘッセ行列がの最小固有値が常に K 以上であることは同値である.

定義 8.1. (X, d_X) を測地的な距離空間, K を実数とする. 関数 $F\colon X \to (-\infty, \infty]$ が 弱 K-凸であるとは，$F^{-1}(\mathbb{R}) \neq \emptyset$ が成り立ち，さらに任意の $x, y \in h^{-1}(\mathbb{R})$ に対してそれらを結ぶある最短測地線 $\gamma\colon [0,1] \to X$ が存在し,

$$F(\gamma(\tau)) \leq (1-\tau)F(x) + \tau F(y) - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)d_X(x,y)^2 \quad (\tau \in (0,1))$$

が成り立つことである.

ここで不等式がある測地線ではなくすべての測地線に対して成り立つときは, 弱 K-凸という言葉の代わりに K-凸という言葉を用いる.

エントロピー

以下, $0 \log 0 := 0$ とおき,

$$r \mapsto r \log r$$

により定まる $[0, \infty)$ 上の凸関数を考える. この関数のテイラー展開より, $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ とほとんどすべての $x \in \mathrm{supp}(g)$ に対し,

$$f(x)\log\frac{f(x)}{g(x)} - (f(x) - g(x)) = f(x)\log f(x) - g(x)\log g(x) - (f(x) - g(x))(\log g(x) + 1) \geq 0$$

が成り立つ. とくに g として n 次元標準正規分布の密度関数を選ぶ, すなわち

$$g(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}}\exp\left(-\frac{|x|^2}{2}\right)$$

とし, 上の不等式を $\mathbb{R}^n$ 上で積分すると,

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x)\log f(x)dx + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^n}|x|^2 f(x)dx + \frac{n}{2}\log(2\pi) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)\log\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)dx \in [0, \infty]$$

を得るので,

$$\mathrm{Ent}(f) := -\int_{\mathbb{R}^n} f(x)\log f(x)dx$$

は well-defined であり，$[-\infty, \infty)$ に値をとる．関数 Ent は Boltzmann–Gibbs–Shannon エントロピー, あるいは単にエントロピーとよばれる.

定理 8.2. $-\mathrm{Ent}\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ は 0-凸である.

証明. $-\mathrm{Ent}(f_0), -\mathrm{Ent}(f_1) < \infty$ である最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し, φ を f_0 から f_1 への Kantorovich ポテンシャルとする. このときほとんどすべての $x \in \Omega_\varphi$ に対し

$$f_\tau = T_{\varphi_\tau\sharp} f_0, \quad T_{\varphi_\tau}(x) = (1-\tau)x + \tau\nabla\varphi(x) = (1-\tau)x + \tau T_\varphi(x), \quad f_\tau(T_{\varphi_\tau}(x)) = \frac{f_0(x)}{\det(H_{\varphi_\tau}(x))}$$

が成り立ち, そして

$$D_x(\tau) := \det(H_{\varphi_\tau}(x)) = \det((1-\tau)E_n + \tau H_\varphi(x))$$

である. ただし, E_n は n 次単位行列を表す. よって,

$$\begin{aligned}
-\mathrm{Ent}(f_\tau) &= \int_{\mathbb{R}^n} f_\tau(z)\log f_\tau(z)dz = \int_{\Omega_\varphi} \log\left(f_\tau(T_{\varphi_\tau}(x))\right) f_0(x)dx \\
&= \int_{\Omega_\varphi} \log\left(\frac{f_0(x)}{D_x(\tau)}\right) f_0(x)dx = -\mathrm{Ent}(f_0) - \int_{\Omega_\varphi} \log D_x(\tau) f_0(x)dx
\end{aligned}$$

を得る. そして正則行列に値をとる滑らかな曲線 $X(\tau)$ に対し,

$$\frac{d}{d\tau}\det X(\tau) = \det X(\tau)\,\mathrm{tr}(X(\tau)^{-1}X'(\tau))$$

が成り立ち, $D_x''(\tau) = 0$ なので, Cauchy–Schwarz の不等式と合わせて

$$\begin{aligned}
(\log\det D_x)'' = \left\{\mathrm{tr}(D_x^{-1}D_x')\right\}' = -\mathrm{tr}(D_x^{-1}D_x'D_x^{-1}D_x') &= -\mathrm{tr}\left((D_x^{-\frac{1}{2}}D_x'D_x^{-\frac{1}{2}})^2\right) \\
&\le -\frac{1}{n}\left(\mathrm{tr}(D_x^{-\frac{1}{2}}D_x'D_x^{-\frac{1}{2}})\right)^2 \le 0
\end{aligned}$$

を得る. よって $-\log\det D_x\colon [0,1] \to \mathbb{R}$ は凸関数なので,

$$\begin{aligned}
-\mathrm{Ent}(f_\tau) &= -\mathrm{Ent}(f_0) - \int_{\Omega_\varphi} \log D_x(\tau) f_0(x)dx \\
&\le (1-\tau)\left\{-\mathrm{Ent}(f_0) - \int_{\Omega_\varphi} \log D_x(0) f_0(x)dx\right\} + \tau\left\{-\mathrm{Ent}(f_0) - \int_{\Omega_\varphi} \log D_x(1) f_0(x)dx\right\} \\
&= -(1-\tau)\,\mathrm{Ent}(f_0) - \tau\,\mathrm{Ent}(f_1)
\end{aligned}$$

成り立つ. 以上より, $\mathcal{F}\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ が 0-凸であることが示された. □

ポテンシャルエネルギー

定理 8.3. K を実数とする. 関数 $V \in C^2(\mathbb{R}^n)$ が K-凸であるとき,

$$\mathcal{F}^V(f) := \int_{\mathbb{R}^n} V(x)f(x)dx$$

により定まる関数 $\mathcal{F}^V\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ は K-凸である.

証明. $\mathcal{F}^V(f_0), \mathcal{F}^V(f_1) < \infty$ である最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を選び, 定理 8.2 の証明と同じ記号を用いると,

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}^V(f_\tau) &= \int_{\mathbb{R}^n} V(z)f_\tau(z)dz = \int_{\Omega_\varphi} V(T_{\varphi_\tau}(x))f_0(x)dx = \int_{\Omega_\varphi} V\left((1-\tau)x + \tau T_\varphi(x)\right) f_0(x)dx \\
&\le \int_{\Omega_\varphi} \left\{(1-\tau)V(x) + \tau V(T_\varphi(x)) - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)|x - T_\varphi(x)|^2\right\} f_0(x)dx \\
&= (1-\tau)\mathcal{F}^V(f_0) + \tau\mathcal{F}^V(f_1) - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)d(f_0, f_1)^2
\end{aligned}$$

成り立つ. 以上より, $\mathcal{F}^V\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ が K-凸であることが示された. □

8. 関数の凸性

BGM：生涯労働行進曲

実数 K と $F \in C^2(\mathbb{R}^m)$ に対し, $F - K|\cdot|^2/2$ が凸関数である, すなわち

$$F((1-\tau)x+\tau y) - \frac{K}{2}|(1-\tau)x+\tau y|^2 \leq (1-\tau)\left(F(x) - \frac{K}{2}|x|^2\right) + \tau\left(F(y) - \frac{K}{2}|y|^2\right)$$

$$\Leftrightarrow h((1-\tau)x+\tau y) \leq (1-\tau)h(x)+\tau h(y) \underline{\hspace{10em}}_{(1)} \qquad (x, y \in \mathbb{R}^m, \tau \in (0,1))$$

が成り立つことと, F のヘッセ行列がの最小固有値が常に K 以上であることは同値である.

そこで測地的な距離空間 (X, d_X) において, 関数 $F\colon X \to (-\infty, \infty]$ が 弱 K-凸であることを $F^{-1}(\mathbb{R}) \neq \emptyset$ が成り立ち，さらに任意の $x, y \in h^{-1}(\mathbb{R})$ に対してそれらを結ぶある最短測地線 $\gamma\colon [0,1] \to X$ が存在し,

$$F(\gamma(\tau)) \leq (1-\tau)F(x) + \tau F(y) - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)d_X(x,y)^2 \quad (\tau \in (0,1))$$

が成り立つこととして定義する．ここで不等式がある測地線ではなくすべての測地線に対して成り立つときは, 弱 K-凸という言葉の代わりに K-凸という言葉を用いる.

$f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ のエントロピーを

$$\mathrm{Ent}(f) \coloneqq - \underline{\hspace{10em}}_{(2)}$$

と定める．ただし, $0 \log 0 \coloneqq \underline{\hspace{8em}}_{(3)}$ である．($r \mapsto r \log r$ の $(0, \infty)$ における連続性を考えれば, 自然な定義である.) すると $-\mathrm{Ent}\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ は $\underline{\hspace{4em}}_{(4)}$-凸である.

証明の鍵は, そして正定値対称行列に値をとる滑かららな曲線 $X(\tau)$ に対し,

$$\frac{d}{\tau}\det X(\tau) = \det X(\tau) \underline{\hspace{8em}}_{(5)}$$

が成り立ち, さらに $X'' \equiv 0$ ならば

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\det X(\tau) \leq -\frac{1}{n}\left(\underline{\hspace{12em}}_{(6)}\right)^2 \leq 0$$

が成り立つことである.

そして K-凸関数 $V \in C^2(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\mathcal{F}^V(f) \coloneqq \int_{\mathbb{R}^n} V(x)f(x)dx$$

により定まる関数 $\mathcal{F}^V\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ は $\underline{\hspace{4em}}_{(7)}$-凸である.

8. 関数の凸性

BGM：生涯労働行進曲

問題 1. n 次正定値対称行列に値をとる滑らかな曲線 $X\colon [0,1] \to \mathbb{R}$ を考え, $D(\tau) := \det X(\tau)$ $(\tau \in [0,1])$ とおく.

(1) $\tau \in [0,1]$ に対し,$D'(\tau) = D(\tau)\operatorname{tr}(X(\tau)^{-1}X'(\tau))$ が成り立つことを示せ.

(2) $\tau \in [0,1]$ に対し,

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}(X(\tau)^{-1}X'(\tau)X(\tau)^{-1}X'(\tau)) &= \operatorname{tr}((X(\tau)^{-\frac{1}{2}}X'(\tau)X(\tau)^{-\frac{1}{2}})^2) \\ &\geq n^{-1}\{\operatorname{tr}(X(\tau)^{-\frac{1}{2}}X'(\tau)X(\tau)^{-\frac{1}{2}})\}^2 = n^{-1}\{\operatorname{tr}(X^{-1}X')\}^2 \\ &\geq 0\end{aligned}$$

が成り立つことを示せ.

(3) $N \in (-\infty,0) \cup [n,\infty)$ に対し,

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\left(ND(\tau)^{\frac{1}{N}}\right) \leq D(\tau)^{\frac{1}{N}}\operatorname{tr}\left(X(\tau)^{-1}X''(\tau)\right) \quad (\tau \in [0,1])$$

が成り立つことを示せ.

9. 関数不等式

本節では Talagrand 不等式と対数 Sobolev 不等式を導く.

相対エントロピーとフィッシャー情報量

以下, K を実数とし, 関数 $V \in C^2(\mathbb{R}^n)$ は K-凸であるとする. そして ν をルベーグ測度に関する密度関数が e^{-V} である $\mathbb{R}^n$ 上のボレル測度, すなわち

$$\int_{\mathbb{R}^n} h(x)d\nu(x) := \int_{\mathbb{R}^n} h(x)e^{-V(x)}dx \quad (h \in C(\mathbb{R}^n) \text{ かつ台がコンパクト})$$

により定まる $\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度とする.

定義 9.1. $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の ν に関する相対エントロピーを

$$\begin{aligned} H_\nu(f) &:= \int_{\mathbb{R}^n} f(x)e^{V(x)} \log\left(f(x)e^{V(x)}\right) d\nu(x) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} f(x)\log f(x)dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x)f(x)dx = -\operatorname{Ent}(f) + \mathcal{F}^V(f) \in (-\infty, \infty] \end{aligned}$$

と定める. さらに f が $\mathbb{R}^n$ 上の局所リプシッツ関数であるとき, f の ν に関する Fisher 情報量を

$$I_\nu(f) := \int_{\mathbb{R}^n} \left|\nabla \log\left(f(x)e^{V(x)}\right)\right|^2 f(x)dx = \int_{\{x\in\mathbb{R}^n | f(x)>0\}} \frac{\left|\nabla\left(f(x)e^{V(x)}\right)\right|^2}{f(x)e^{V(x)}} d\nu(x) \in [0,\infty]$$

と定める.

定理 8.1 と定理 8.2 から次が直ちに従う.

系 9.2. 相対エントロピー H_ν は K-凸である. すなわち, $H_\nu(f_0), H_\nu(f_1) < \infty$ である最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$H_\nu(f_\tau) \le (1-\tau)H_\nu(f_0) + \tau H_\nu(f_1) - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)d(f_0,f_1)^2 \quad (\tau \in [0,1])$$

が成り立つ.

また逆に, H_ν の K-凸性から V の K-凸性が導かれることも知られている.

関数不等式

以下, $e^{-V} \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を仮定する. (もし $K > 0$ ならば, V の K-凸性から e^{-V} が $\mathbb{R}^n$ 上で可積分であり,

$$\left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{-V(x)}dx\right)^{-1} e^{-V} = \exp\left(-V - \log\left(\int_{\mathbb{R}^n} e^{-V(x)}dx\right)\right) \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$$

が成り立つので, V の代わりに適切な定数を足したものを考えれば, $e^{-V} \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ が成り立つ.) すると $H_\nu(e^{-V}) = 0$ および $I_\nu(e^{-V}) = 0$ である. また, ν は $\mathbb{R}^n$ 上の確率測度になるので, Jensen の不等式から $H_\nu(f) \ge 0$ が成り立つ.

すると $H_\nu(f) < \infty$ をみたす $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ から e^{-V} への最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し, 系 9.2 から

$$0 \le H_\nu(f_\tau) \le (1-\tau)H_\nu(f) - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)d(f,e^{-V})^2 \quad (\tau \in [0,1]) \tag{9.1}$$

が従う.

定理 9.3 (Talagrand 不等式)**.** $K>0$ とする．$f\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{Lip}}(\mathbb{R}^n,\nu)$ に対し，

$$d(f,e^{-V})\leq\sqrt{\frac{2}{K}H_\nu(f)}$$

が成り立つ．

証明．$H_\nu(f)=\infty$ の場合は自明なので，$H_\nu(f)<\infty$ を仮定する．すると (9.1) より，$1-\tau$ で割ったのちに $\tau\uparrow 1$ とすると結論を得る． $\square$

定理 9.4 (HWI 不等式，対数ソボレフ不等式)**.** $f\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し，$H_\nu(f)<\infty$ かつ fe^V が $\mathrm{supp}(f)$ の内部でリプシッツ連続ならば，

$$H_\nu(f)\leq d(f,e^{-V})\sqrt{I_\nu(f)}-\frac{K}{2}d(f,e^{-V})^2 \tag{9.2}$$

が成り立つ．さらに $K>0$ ならば，

$$H_\nu(f)\leq\frac{1}{2K}I_\nu(f)$$

が成り立つ．

証明．2 番目の不等式は 最初の不等式 (9.2) を平方完成すると得られる．そこで不等式 (9.2) を示す．ここで，$I_\nu(f)=\infty$ の場合は自明なので，$I_\nu(f)<\infty$ を仮定する．また，ある $a>0$ が存在し，$\rho:=fe^{-V}>a$ が $\mathrm{supp}(f)$ の内部で成り立つと仮定する．すると $\log\rho$ も $\mathrm{supp}(f)$ の内部でリプシッツ連続である．そして (9.1) より，

$$H_\nu(f)\leq\limsup_{\tau\downarrow 0}\left(-\frac{H_\nu(f_\tau)-H_\nu(f)}{\tau}\right)-\frac{K}{2}d(f,e^{-V})^2$$

が成り立つ．ここで φ を f から e^{-V} への Kantorovich ポテンシャルとし，

$$\Omega:=\{x\in\mathrm{supp}(f)\mid T_\varphi(x)\neq x\}=\{x\in\mathrm{supp}(f)\mid T_{\varphi_\tau}(x)\neq x\}\quad(\tau\in(0,1))$$

とすれば，Cauchy–Schwarz 不等式より

$$\begin{aligned}
\frac{H_\nu(f_\tau)-H_\nu(f)}{\tau}&=\frac{1}{\tau}\int_{\mathrm{supp}(f)}\left(\log\rho(T_{\varphi_\tau}(x))-\log\rho(x)\right)f(x)dx\\
&=\int_\Omega\frac{\log\rho(T_{\varphi_\tau}(x))-\log\rho(x)}{|T_{\varphi_\tau}(x)-x|}\cdot\frac{|T_{\varphi_\tau}(x)-x|}{\tau}f(x)dx\\
&\geq-\left(\int_\Omega\left(\frac{\log\rho(T_{\varphi_\tau}(x))-\log\rho(x)}{|T_{\varphi_\tau}(x)-x|}\right)^2f(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}\cdot\left(\int_\Omega|T_\varphi(x)-x|^2f(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}\\
&=-\left(\int_\Omega\left(\frac{\log\rho(T_{\varphi_\tau}(x))-\log\rho(x)}{|T_{\varphi_\tau}(x)-x|}\right)^2f(x)dx\right)^{\frac{1}{2}}\cdot d(f,e^{-V})
\end{aligned}$$

を得る．ここで不等式では，ほとんどすべての $x\in\Omega$ に対し，$T_{\varphi_\tau}(x)-x=t(T_\varphi(x)-x)$ が成り立つことを用いた．また，ほとんどすべての $x\in\Omega_\varphi$ に対し，

$$\lim_{\tau\downarrow 0}\frac{\log\rho(T_{\varphi_\tau}(x))-\log\rho(x)}{|T_{\varphi_\tau}(x)-x|}=\frac{1}{T_\varphi(x)-x}\cdot\frac{\langle\nabla\rho(x),T_\varphi(x)-x\rangle}{\rho(x)}\leq\frac{|\nabla\rho(x)|}{\rho(x)}=|\nabla\log\rho(x)|$$

が成り立ち，そして $\log\rho$ は $\mathrm{supp}(f)$ の内部でリプシッツ連続なので，Fatou の補題から

$$\limsup_{\tau\downarrow 0}\int_{\Omega_\varphi}\left(\frac{\log\rho(T_{\varphi_\tau}(x))-\log\rho(x)}{|T_{\varphi_\tau}(x)-x|}\right)^2f(x)dx\leq\int_{\mathbb{R}^n}|\nabla\log\rho(x)|^2f(x)dx=I_\nu(f)$$

が従うので，不等式 (9.2) が成り立つ．そして適切な近似を行うと，一般の場合も示される． $\square$

9. 関数不等式

BGM：誓いの種

K を実数とし, 関数 $V \in C^2(\mathbb{R}^n)$ は K-凸であるとする. そして ν をルベーグ測度に関する密度関数が e^{-V} である $\mathbb{R}^n$ 上のボレル測度とする. このとき $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の ν に関する相対エントロピーは

$$H_\nu(f) := \int_{\mathbb{R}^n} \underline{\hspace{3cm}}_{(1)} \log\left(\underline{\hspace{3cm}}_{(1)}\right) d\nu(x) = -\operatorname{Ent}(f) + \mathcal{F}^V(f) \in (-\infty, \infty]$$

である. さらに f が $\mathbb{R}^n$ 上の局所リプシッツ関数であるとき, f の ν に関する Fisher 情報量を

$$I_\nu(f) := \int_{\mathbb{R}^n} \left|\nabla \log\left(\underline{\hspace{3cm}}_{(1)}\right)\right|^2 f(x)dx = \int_{\{x\in\mathbb{R}^n \mid f(x)>0\}} \underline{\hspace{5cm}}_{(2)} d\nu(x)$$

と定める. すると相対エントロピー H_ν は K-凸である. すなわち, $H_\nu(f_0), H_\nu(f_1) < \infty$ である最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$H_\nu(f_\tau) \le (1-\tau)H_\nu(f_0) + \tau H_\nu(f_1) \underline{\hspace{6cm}}_{(3)} \qquad (\tau \in [0,1])$$

が成り立つ.

さらに $e^{-V} \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を仮定する. すると

$$H_\nu(e^{-V}) = \underline{\hspace{1.5cm}}_{(4)}$$

である. また, Jensen の不等式から $H_\nu(f) \ge \underline{\hspace{1.5cm}}_{(5)}$ が成り立つ.

ここで $H_\nu(f) < \infty$ をみたす $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ から e^{-V} への最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\underline{\hspace{1.5cm}}_{(5)} \le H_\nu(f_\tau) \le (1-\tau)H_\nu(f) + \tau \underline{\hspace{1.5cm}}_{(4)} - \frac{K}{2}\tau(1-\tau)d(f, e^{-V})^2 \quad (\tau \in [0,1]) \tag{9.1}$$

が成り立つ.

$K > 0$ のとき, (9.1) において $\tau \uparrow 1$ とすれば,

$$d(f, e^{-V}) \le \sqrt{\underline{\hspace{2.5cm}}_{(6)} H_\nu(f)} \quad (\text{Talagrand 不等式})$$

を得る.

また,

$$H_\nu(f) \le \limsup_{\tau\downarrow 0}\left(-\frac{H_\nu(f_\tau) - H_\nu(f)}{\tau}\right) - \frac{K}{2}d(f, e^{-V})^2$$

が成り立つので, もし H_ν の勾配の大きさが $\sqrt{I_\nu}$ 以下ならば,

$$\limsup_{\tau\downarrow 0}\left(-\frac{H_\nu(f_\tau) - H_\nu(f)}{\tau}\right) \le \sqrt{I_\nu(f)}\, d(f, e^{-V})$$

となる. よって (9.1) に代入すると

$$H_\nu(f) \le d(f, e^{-V})\sqrt{I_\nu(f)} - \frac{K}{2}d(f, e^{-V})^2 \quad (\text{HWI 不等式})$$

を得る. さらに $K > 0$ ならば, 上の不等式を平方完成すると

$$H_\nu(f) \le \underline{\hspace{2cm}}_{(7)} I_\nu(f) \quad (\text{対数 Sobolev 不等式})$$

が成り立つ.

9. 関数不等式

問題 1. $K>0$ とし, 関数 $V\in C^2(\mathbb{R}^n)$ は K-凸であるとする．さらに $e^{-V}\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を仮定し, ν をルベーグ測度に関する密度関数が e^{-V} である $\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度とする．そして $\rho\colon\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ はリプシッツ連続であり, さらに

$$\int_{\mathbb{R}^n}\rho(x)d\nu(x)=0,\qquad \int_{\mathbb{R}^n}\rho(x)^2d\nu(x)<\infty$$

をみたすとする．

(1) ある $\delta>0$ が存在し,

$$f_\varepsilon\coloneqq(1+\varepsilon\rho)e^{-V}\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)\quad(\varepsilon\in(-\delta,\delta))$$

が成り立つことをを示せ.

(2) 関係式

$$H_\nu(f_\varepsilon)=\frac{\varepsilon^2}{2}\int_{\mathbb{R}^n}\rho(x)^2d\nu(x),\qquad I_\nu(f_\varepsilon)=\varepsilon^2\int_{\mathbb{R}^n}|\nabla\rho(x)|^2d\nu(x)+o(\varepsilon^2)\quad(\varepsilon\to0)$$

が成り立つことを示せ.

(3) Poincaré 不等式

$$\int_{\mathbb{R}^n}\rho(x)^2d\nu(x)\le\frac{1}{K}\int_{\mathbb{R}^n}|\nabla\rho(x)|^2d\nu(x)$$

が成り立つことを示せ.

10. 接空間と計量構造

BGM：センチメンタリアン・ラプソディ

接空間

滑らかな多様体に対し, その接空間は滑らかな曲線の速度ベクトルのなす空間とみなせる. そこで $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を固定し, 十分小さい $\varepsilon > 0$ に対し, $f_0 = f$ をみたす曲線 $f_\bullet\colon (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を考える. 6 節で述べたように, 曲線が適切な条件をみたすと, あるボレル写像族 $(\xi_t\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{t\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ が存在し, 連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(x) + \operatorname{div}(f_t(x)\xi_t(x)) = 0 \quad ((t,x) \in (-\varepsilon,\varepsilon)\times\mathbb{R}^n) \tag{10.1}$$

が超関数の意味で成り立つ. ここでボレル写像族 $(\xi_t\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{t\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ が流速を表すことを鑑みて, これを曲線 $f_\bullet\colon (-\varepsilon,\varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の速度ベクトル場といいたいところだが, 相異なるボレル写像族が連続の方程式の解になることがある. 例えば, $t > -1$ に対し, 組

$$f_t(x) := (4\pi(1+t))^{-\frac{n}{2}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4(1+t)}\right) \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \quad (t > -1),$$

$$\xi_t(x) := \frac{x}{2(1+t)} + \left(\lambda \exp\left(\frac{x_1^2}{4(1+t)}\right), 0, \ldots, 0\right) \quad (\lambda \in \mathbb{R})$$

は $\lambda \in \mathbb{R}$ の選び方によらず連続の方程式をみたす. そして実際, 連続の方程式を考える場合はベクトル場ではなく関数の勾配ベクトル場を考えればよいことがわかる. また, f_t の 2 次モーメントが有限になることから, 適切な可積分条件を課す必要がある.

以上を鑑みて, $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し

$$L^2(f) := \left\{ \xi\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \colon \text{ボレル} \;\middle|\; \int_{\mathbb{R}^n} |\xi(x)|^2 f(x)dx < \infty \right\},$$

$$T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) := \overline{\{\nabla\phi \mid \phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)\}} \subset L^2(f)$$

と定義する. ここで $C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ は $\mathbb{R}^n$ 上の台がコンパクトな C^∞ 級関数のなす集合である.

補題 10.1. $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と $\phi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n)$ に対し, ある $\varepsilon > 0$ と曲線 $f_\bullet\colon (-\varepsilon,\varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ および $\nabla\phi_t \in L^2(f_t)$ をみたす $\mathbb{R}^n$ 上の関数族 $(\phi_t)_{t\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ が存在し,

$$\frac{\partial}{\partial t} f_t(x) + \operatorname{div}(f_t(x)\nabla\phi_t(x)) = 0 \quad ((t,x) \in (-\varepsilon,\varepsilon)\times\mathbb{R}^n), \qquad (f_0, \phi_0) = (f, \phi) \tag{10.2}$$

が成り立つ.

証明. ある $K, \varepsilon > 0$ が存在し,

$$\varphi^t(x) := \frac{1}{2}|x|^2 + t\phi(x)\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \qquad (t \in (-\varepsilon,\varepsilon))$$

は下半連続な K-凸関数になる. さらに $f_t := \nabla\varphi^t_\sharp f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ かつ $f_0 = f$ である. そして $t \neq 0$ に対し,

$$\phi_t(z) := \inf_{x\in\mathbb{R}^n} \left(-\frac{|x-z|^2}{t} + \phi(x)\right) \quad (z \in \mathbb{R}^n)$$

とすれば, 組 $(f_t, \phi_t)_{t\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ は (10.2) の解となる. □

定義 10.2. 曲線 $f_\bullet\colon (-\varepsilon,\varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ とボレル写像族 $(\xi_t \in T_{f_t}\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))_{t\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ が連続の方程式 (10.1) をみたすとき,

$$\dot{f}_t = \xi_t$$

と書き, ξ_t を曲線 $(f_t)_{\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ の時刻 t における速度ベクトルとよぶ.

計量構造

多様体 M のリーマン計量 $\langle\cdot,\cdot\rangle_M$ とは, 大雑把には接空間上の内積である. そしてリーマン多様体 $(M,\langle\cdot,\cdot\rangle_M)$ において, そのリーマン距離 d_M は任意の $x,y\in M$ に対し,

$$d_M(x,y)^2=\inf\left\{\int_0^1\langle\dot\gamma(t),\dot\gamma(t)\rangle_M dt\;\middle|\;\gamma\colon[0,1]\to M \text{ は } C^1 \text{ 級かつ } \gamma(0)=x,\gamma(1)=y\right\}$$

という性質をみたし, さらに下限は最短測地線によって達成される.

そこで今, $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を "多様体" とみなし, その "リーマン計量" $\langle\!\langle\cdot,\cdot\rangle\!\rangle$ を

$$\langle\!\langle\xi,\eta\rangle\!\rangle:=\int_{\mathbb{R}^n}\langle\xi(x),\eta(x)\rangle f(x)dx\quad(f\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \text{ および } \xi,\eta\in T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))$$

と定めると, Benamou–Brenier 公式から次が従う.

定理 10.3. 任意の $f,g\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$d(f,g)^2=\inf\left\{\int_0^1\langle\!\langle\xi_t,\xi_t\rangle\!\rangle dt\;\middle|\;\begin{array}{l}(f_\tau,\xi_\tau)_{\tau\in[0,1]} \text{ は連続の方程式および}\\ \text{初期条件 } (f_0,f_1)=(f,g) \text{ をみたす}\end{array}\right\}$$

が成り立ち, さらに下限は最短測地線によって達成される.

そして最短測地線 $f_\bullet\colon[0,1]\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と各 $\tau\in[0,1]$ に対し, $\langle\!\langle\dot f_\tau,\dot f_\tau\rangle\!\rangle=d(f_0,f_1)^2$ が成り立つ.

関数の勾配とヘッシアン

D を $\mathbb{R}^n$ の領域とする. 滑らかな関数 $F\colon D\to\mathbb{R}^n$ と $x\in D$ に対し, その勾配 $\nabla F(x)$ は $\mathbb{R}^n$ の元であり, 滑らかな曲線 $\gamma\colon(-\varepsilon,\varepsilon)\to D$ に対し

$$\frac{d}{dt}F(\gamma(t))=\langle\nabla F(\gamma(t)),\dot\gamma(t)\rangle,\qquad\frac{d}{dt}\langle\nabla F(\gamma(t)),v\rangle=H_F(\gamma(t))(\dot\gamma(t),v)\quad(v\in\mathbb{R}^n)$$

が成り立つ. そして

$$\dot\gamma(t)=-\nabla F(\gamma(t))\quad(t>0)$$

をみたす曲線 $\gamma\colon[0,\infty)\to D$ を F の勾配流とよぶ.

そこで関数 $\mathcal{F}\colon\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)\to(-\infty,\infty]$ の $\mathcal{F}^{-1}(\mathbb{R})$ の内点 f に対し, 形式的には勾配 $\operatorname{grad}\mathcal{F}(f)$ を $T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の元であり, $f_0=f$ である任意の曲線 $f_\bullet\colon(-\varepsilon,\varepsilon)\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$\left.\frac{d}{dt}\mathcal{F}(f_t)\right|_{t=0}=\langle\!\langle\operatorname{grad}\mathcal{F}(f),\dot f_0\rangle\!\rangle$$

をみたすものと定め, 同様に, ヘッシアン $\operatorname{Hess}\mathcal{F}_f$ を $T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)\times T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ 上の "双線形形式" であり, $f_0=f$ である任意の曲線 $f_\bullet\colon(-\varepsilon,\varepsilon)\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対して

$$\left.\frac{d}{dt}\langle\!\langle\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t),\xi\rangle\!\rangle\right|_{t=0}=\operatorname{Hess}\mathcal{F}_f(\dot f_0,\xi)\quad(\xi\in T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))$$

をみたすものと定める. すると定速最短線 $f_\bullet\colon[0,1]\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\frac{d^2}{d\tau^2}\mathcal{F}(f_\tau)=\operatorname{Hess}\mathcal{F}_f(\dot f_\tau,\dot f_\tau)$$

が成り立つ. そして

$$\dot f(t)=-\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)\quad(t>0)$$

をみたす曲線 $f_\bullet\colon[0,\infty)\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を $\mathcal{F}$ の勾配流とよぶ.

10. 接空間と計量構造

BGM：センチメンタリアン・ラプソディ

滑らかな多様体 M に対し, その接空間は滑らかな曲線の速度ベクトルのなす空間とみなせる.

そこで曲線 $f_\bullet\colon(-\varepsilon,\varepsilon)\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ とボレル写像族 $(\xi_t\in T_{f_t}\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))_{t\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ が連続の方程式をみたすとき,

$$\dot{f}_t=\xi_t$$

と書き, ξ_t を曲線 $(f_t)_{\in(-\varepsilon,\varepsilon)}$ の時刻 t における速度ベクトルとよぶ. さらに $f\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$L^2(f):=\left\{\xi\colon\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n\colon\text{ボレル}\ \middle|\ \underline{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(1)}<\infty\right\},$$

$$T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n):=\overline{\{\nabla\phi\mid\phi\in\underline{\qquad\qquad}_{(2)}\}}\subset L^2(f)$$

と定める. ここで $\underline{\qquad\qquad}_{(2)}$ は $\mathbb{R}^n$ 上の台がコンパクトな C^∞ 級関数のなす集合である.

また, 多様体 M のリーマン計量 $\langle\cdot,\cdot\rangle_M$ とは, 大雑把には接空間上の内積である. そしてリーマン多様体 $(M,\langle\cdot,\cdot\rangle_M)$ において, そのリーマン距離 d_M は任意の $x,y\in M$ に対し,

$$d_M(x,y)^2=\inf\left\{\int_0^1\langle\dot\gamma(t),\dot\gamma(t)\rangle_M dt\ \middle|\ \gamma\colon[0,1]\to M\text{ は }C^1\text{ 級かつ }\gamma(0)=x,\gamma(1)=y\right\}$$

という性質をみたし, さらにこの下限は $\underline{\qquad\qquad}_{(3)}$ によって達成される.

そこで $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を多様体とみなし, そのリーマン計量 $\langle\!\langle\cdot,\cdot\rangle\!\rangle$ を

$$\langle\!\langle\xi,\eta\rangle\!\rangle:=\underline{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(4)}\qquad(f\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)\text{ および }\xi,\eta\in T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))$$

と定める. すると Benamou–Brenier 公式から

$$d(f,g)^2=\inf\left\{\int_0^1\langle\!\langle\xi_t,\xi_t\rangle\!\rangle dt\ \middle|\ \begin{array}{l}(f_\tau,\xi_\tau)_{\tau\in[0,1]}\text{ は連続の方程式および}\\ \text{初期条件 }(f_0,f_1)=(f,g)\text{ をみたす}\end{array}\right\}\qquad(f,g\in\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))$$

が従う. さらに下限は $\underline{\qquad\qquad}_{(3)}$ によって達成される.

そして関数 $\mathcal{F}\colon\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)\to(-\infty,\infty]$ の $\mathcal{F}^{-1}(\mathbb{R})$ の内点 f に対し, 勾配 $\mathrm{grad}\,\mathcal{F}(f)\in T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を $f_0=f$ である任意の曲線 $f_\bullet\colon(-\varepsilon,\varepsilon)\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し

$$\left.\frac{d}{dt}\mathcal{F}(f_t)\right|_{t=0}=\underline{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(5)}$$

をみたすものと定め, さらにヘッシアン $\mathrm{Hess}\,\mathcal{F}_f$ を $f_0=f$ である任意の曲線 $f_\bullet\colon(-\varepsilon,\varepsilon)\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し

$$\left.\frac{d}{dt}\langle\!\langle\mathrm{grad}\,\mathcal{F}(f_t),\xi\rangle\!\rangle\right|_{t=0}=\underline{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(6)}\qquad(\xi\in T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n))$$

をみたす $T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)\times T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ 上の “双線形形式” と定める. また,

$$\dot{f}(t)=\underline{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{(7)}$$

をみたす曲線 $f_\bullet\colon[0,\infty)\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を $\mathcal{F}$ の勾配流とよぶ.

10. 接空間と計量構造

BGM：センチメンタリアン・ラプソディ

問題 1. $f, g \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し，f から g への Kantorovich ポテンシャル φ および最短測地線 $f_\bullet \colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を考える．そして $\tau \in (0,1)$ とし，

$$\phi(x) := |x|^2 - 2\varphi(x), \qquad \psi(y) := |y|^2 - 2\varphi^*(y), \qquad \phi_\tau(z) := \sup_{x \in \mathbb{R}^n} \left(-\frac{1}{\tau}|x-z|^2 + \phi(x) \right) \quad (x, y, z \in \mathbb{R}^n)$$

と定める．

(1) 等式 $d(f,g)^2 = \frac{1}{\tau} d(f, f_\tau)^2 + \frac{1}{1-\tau} d(f_\tau, g)^2$ が成り立つことを示せ．

(2) 任意の $y, z \in \mathbb{R}^n$) および $\varepsilon > 0$ に対し，

$$\phi_\tau(z) + \psi(y) \leq \frac{|y-z|^2}{1-\tau}$$

が成り立つことを示せ．

(3) $x \in \Omega_\varphi$ に対し，

$$\begin{aligned} \psi(\nabla\varphi(x)) &= -\phi(x) + \frac{1}{\tau}|x - \{(1-\tau)x + \tau\nabla\varphi(x)\}|^2 + \frac{1}{1-\tau}|\{(1-\tau)x + \tau\nabla\varphi(x)\} - \nabla\varphi(x)|^2 \\ &\geq -\phi_\tau((1-\tau)x + \tau\nabla\varphi(x)) + \frac{1}{1-\tau}|\{(1-\tau)x + \tau\nabla\varphi(x)\} - \nabla\varphi(x)|^2 \end{aligned}$$

が成り立つことを示せ．

(4) 等式 $\frac{1}{1-\tau} d(f_\tau, g)^2 = \int_{\mathbb{R}^n} \phi_\tau(z) f_\tau(z) dz + \int_{\mathbb{R}^n} \psi(y) g(y) dy$ が成り立つことを示せ．

11. 相対エントロピーの勾配

BGM：坂道

本節では K を実数とし，関数 $V \in C^2(\mathbb{R}^n)$ は K-凸であるとする．そして ν をルベーグ測度に関する密度関数が e^{-V} である $\mathbb{R}^n$ 上のボレル測度とする．すると $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の ν に関する相対エントロピーは

$$\begin{aligned} H_\nu(f) &:= \int_{\mathbb{R}^n} f(x)e^{V(x)} \log\left(f(x)e^{V(x)}\right) d\nu(x) \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} f(x)\log f(x)dx + \int_{\mathbb{R}^n} V(x)f(x)dx = -\operatorname{Ent}(f) + \mathcal{F}^V(f) \in (-\infty, \infty] \end{aligned}$$

で与えられていた．本節では f は $H_\nu^{-1}(\mathbb{R})$ の内点かつ $\mathbb{R}^n$ 上の局所リプシッツ関数であると仮定し，形式的に勾配 $H_\nu(f)$ を計算する．そのために，$f_\bullet\colon (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を $f_0 = f$ および $\dot{f}_0 = \xi \in T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ である適切な正則性をもつ曲線とする．

すると

$$\begin{aligned} \langle\!\langle \operatorname{grad} H_\nu(f), \dot{f}_0 \rangle\!\rangle &= \frac{d}{dt} H_v(f_t)\bigg|_{t=0} \\ &= \frac{d}{dt}\left(-\operatorname{Ent}(f_t) + \mathcal{F}^V(f_t)\right)\bigg|_{t=0} = -\langle\!\langle \operatorname{grad} \operatorname{Ent}(f), \dot{f}_0 \rangle\!\rangle + \langle\!\langle \operatorname{grad} \mathcal{F}^V(f), \dot{f}_0 \rangle\!\rangle \end{aligned}$$

が成り立つので，エントロピーとポテンシャルエネルギーの勾配をそれぞれ計算すればよい．以下，

$$\xi := \dot{f}_0, \quad \eta_{\mathrm{Ent}} := \operatorname{grad} \operatorname{Ent}(f), \quad \eta_V := \operatorname{grad} \mathcal{F}_V(f), \quad \eta_{H_\nu} := \operatorname{grad} H_\nu(f) = -\eta_{\mathrm{Ent}} + \eta_V$$

とおく．するとこれらはすべて $T_f\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の元である．

エントロピーの勾配

まず，“リーマン計量” $\langle\!\langle \cdot, \cdot \rangle\!\rangle$ の定義より

$$-\langle\!\langle \operatorname{grad} \operatorname{Ent}(f), \dot{f}_0 \rangle\!\rangle = -\int_{\mathbb{R}^n} \langle \eta_{\mathrm{Ent}}(x), \xi(x) \rangle f(x)dx$$

である．そして形式的には連続の方程式から

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt}\operatorname{Ent}(f_t)\bigg|_{t=0} &= \frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}} f_t(x)\log f_t(x)dx\bigg|_{t=0} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial}{\partial t} f_t(x)\bigg|_{t=0} (\log f(x) + 1)\, dx \\ &= -\int_{\mathbb{R}} \operatorname{div}(f(x)\xi(x))\, (\log f(x) + 1)\, dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \langle \xi(x), \nabla \log f(x) \rangle f(x) dx \end{aligned}$$

が従うので，

$$\int_{\mathbb{R}^n} \langle (-\eta_{\mathrm{Ent}}(x) - \nabla \log f(x)), \xi(x) \rangle f(x)dx = 0$$

が成り立つ．そして曲線 $f_\bullet\colon (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ は任意に選ぶことができるので，ξ も任意に選ぶことができる．以上より

$$-\operatorname{grad} \operatorname{Ent}(f) = -\eta_{\mathrm{Ent}} = \nabla \log f$$

を得る．

ポテンシャルエネルギーの勾配

エントロピーの場合と同様に示せるが, 連続の方程式, すなわちオイラー的描写ではなくラグランジュ的描写を用いて示す. そのために, あるボレル写像族 $(T_t\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n)_{t\in[0,1]}$ が存在して

$$f_t = T_{t\sharp}f_0, \quad T_0(x) = x, \quad \xi(x) = \frac{\partial\gamma_x}{\partial t}(0) \quad (\text{ただし}, \gamma_x(t) := T_t(x))$$

が成り立っているとする. このとき, 形式的には

$$\begin{aligned}
\langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}_V(f), \dot{f}_0\rangle\!\rangle &= \int_{\mathbb{R}^n} \langle \eta_V(x), \xi(x)\rangle f(x)dx,\\
\frac{d}{dt}\mathcal{F}_V(f_t)\Big|_{t=0} &= \frac{d}{dt}\int_{\mathbb{R}} V(x)f_t(x)dx\Big|_{t=0} = \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial}{\partial t}V(\gamma_x(t))\Big|_{t=0} f(x)dx\\
&= \int_{\mathbb{R}} \left\langle \nabla V(x), \frac{\partial \gamma_x}{\partial t}(0)\right\rangle f(x)dx = \int_{\mathbb{R}} \langle \nabla V(x), \xi(x)\rangle f(x)dx
\end{aligned}$$

が成り立つので,

$$\operatorname{grad}\mathcal{F}_V(f) = \nabla V$$

である.

相対エントロピーの勾配流

前述の議論から

$$\operatorname{div}(f \operatorname{grad}\eta_{H_\nu}) = \operatorname{div}\left(f\left(\nabla \log f + \nabla V\right)\right) = \Delta f + \operatorname{div}(f\nabla V)$$

が従う. よって相対エントロピー H_ν の勾配流 $f_\bullet\colon [0,\infty) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ は

$$\frac{\partial}{\partial t} f_\bullet(x) = \Delta f_\bullet + \operatorname{div}(f_\bullet \nabla V)$$

をみたし, Fokker–Planck 方程式の解となる.

ここで滑らかなベクトル場 $\xi\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ に対し, ν による重みつき発散を

$$\operatorname{div}_\nu \xi := \operatorname{div}\xi - \langle \xi, \nabla V\rangle$$

と定義すると, 台がコンパクトな滑らかな関数 $h\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して部分積分

$$\int_{\mathbb{R}^n} \langle \nabla h(x), \xi(x)\rangle d\nu(x) = -\int_{\mathbb{R}^n} \left(h(x)\operatorname{div}_\nu \xi(x)\right) d\nu(x)$$

が成り立つ. さらに滑らかな関数 $h\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して ν による重みつきラプラシアンを

$$\Delta_\nu h := \operatorname{div}_\nu \nabla h = \Delta h - \langle \nabla h, \nabla V\rangle$$

と定める. このとき H_ν の勾配流 $f_\bullet\colon [0,\infty) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\rho(t,x) := f_t(x)e^V \quad ((t,x) \in (0,\infty)\times\mathbb{R}^n)$$

と定めると, $\rho(t,\cdot)$ は ν に関する確率密度関数であり, そして

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \Delta_\nu \rho \tag{11.1}$$

が $(0,\infty)\times\mathbb{R}^n$ 上で成り立つ. このことは, $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の代わりに

$$\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\nu) := \left\{ \rho \in L^1(\nu) \;\middle|\; \begin{array}{l} \rho \text{ は } \nu \text{ に関してほとんど至るところ非負かつ}\\ \displaystyle\int_{\mathbb{R}^n} \rho(x)d\nu(x) = 1 \text{ および} \int_{\mathbb{R}^n} \rho(x)d\nu(x) < \infty \end{array} \right\}$$

という空間を考えると, この空間における相対エントロピー H_ν の d による勾配流が重みつき熱方程式 (11.1) の解になることを意味する.

11. 相対エントロピーの勾配

BGM：坂道

K を実数とし, 関数 $V \in C^2(\mathbb{R}^n)$ は K-凸であるとする. そして ν をルベーグ測度に関する密度関数が e^{-V} である $\mathbb{R}^n$ 上のボレル測度とする. このとき $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ の ν に関する相対エントロピーは

$$H_\nu(f) := \int_{\mathbb{R}^n} \underline{\hspace{6em}}_{(1)} \log \left(\underline{\hspace{6em}}_{(1)} \right) d\nu(x) = -\operatorname{Ent}(f) + \mathcal{F}^V(f) \in (-\infty, \infty]$$

である.

ここで $f_0 = f$ かつ $\dot{f}_0 = \xi \in T_f \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ である適切な正則性をもつ曲線 $f_\bullet \colon (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\begin{aligned} -\langle\!\langle \operatorname{grad} \operatorname{Ent}(f), \dot{f}_0 \rangle\!\rangle_{f_t} = -\frac{d}{dt} \operatorname{Ent}(f_t)\Big|_{t=0} &= \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}} f_t(x) \log f_t(x) dx \Big|_{t=0} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial}{\partial t} f_t(x) \Big|_{t=0} \left(\underline{\hspace{8em}}_{(2)} \right) dx \\ &= -\int_{\mathbb{R}} \operatorname{div}(f(x)\xi(x)) \left(\underline{\hspace{8em}}_{(2)} \right) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \langle \xi(x), \nabla \underline{\hspace{6em}}_{(3)}(x) \rangle f(x) dx \end{aligned}$$

が成り立つので,

$$-\operatorname{grad} \operatorname{Ent}(f) = \underline{\hspace{6em}}_{(3)}$$

である. 同様に, $\operatorname{grad} \mathcal{F}_V(f) = \nabla V$ が成り立つので,

$$\operatorname{grad} H_\nu(f) = \underline{\hspace{8em}}_{(4)}$$

であり, 相対エントロピー H_ν の勾配流 $f_\bullet \colon [0, \infty) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ は

$$\frac{\partial}{\partial t} f_\bullet(x) = \underline{\hspace{12em}}_{(5)}$$

をみたし, Fokker–Planck 方程式の解となる.

ここで滑らかなベクトル場 $\xi \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ に対し, ν による重みつき発散を

$$\operatorname{div}_\nu \xi := \underline{\hspace{12em}}_{(6)}$$

と定義すると, 台がコンパクトな滑らかな関数 $h \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して部分積分

$$\int_{\mathbb{R}^n} \langle \nabla h(x), \xi(x) \rangle d\nu(x) = -\int_{\mathbb{R}^n} (h(x) \operatorname{div}_\nu \xi(x)) \, d\nu(x)$$

が成り立つ. さらに滑らかな関数 $h \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ に対して ν による重みつきラプラシアンを

$$\Delta_\nu h := \operatorname{div}_\nu \nabla h$$

と定める. このとき H_ν の勾配流 $f_\bullet \colon [0, \infty) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\rho(t, x) := f_t(x) e^V \quad ((t, x) \in (0, \infty) \times \mathbb{R}^n)$$

と定めると, $\rho(t, \cdot)$ は重みつき熱方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \underline{\hspace{12em}}_{(7)}$$

の解となる.

11. 相対エントロピーの勾配

BGM：坂道

問題 1. 実数 K に対し, 関数 $F \in C^2(\mathbb{R}^n)$ は K-凸であるとする. そして C^1 級曲線 $x\colon (0,\infty) \to \mathbb{R}^n$ は

$$\frac{d}{dt}x(t) = -\nabla F(x(t)) \quad (t \in (0,\infty))$$

をみたすとする.

(1) 任意の $y \in \mathbb{R}^n$ と $t \in (0,\infty)$ に対し,

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}|x(t)-y|^2 + \frac{K}{2}|x(t)-y|^2 \leq F(y) - F(x(t)) \quad \text{(Evolution Variational Inequality)}$$

をみたすことを示せ.

(2) 任意の $t \in (0,\infty)$ に対し,

$$\frac{d}{dt}F(x(t)) = -\frac{1}{2}|x'(t)|^2 - \frac{1}{2}|\nabla F(x(t))|^2 \quad \text{(Energy Dissipation Equality)}$$

が成り立つことを示せ.

(3) C^1 級曲線 $z\colon (0,\infty) \to \mathbb{R}^n$ が Evolution Variational Inequality または Energy Dissipation Equality をみたすならば,

$$\frac{d}{dt}z(t) = -\nabla F(z(t)) \quad (t \in (0,\infty))$$

が成り立つことを示せ.

文責：高津　飛鳥

12. K-凸関数の勾配流

以下, K を実数とし, K-凸関数 $\mathcal{F}\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ の勾配流 $f_\bullet, g_\bullet\colon [0,\infty) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を考える. すなわち

$$\dot{f}_\bullet = -\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_\bullet) \quad \left(\text{あるいは} \frac{\partial}{\partial t} f_\bullet = -\operatorname{div}(f_\bullet \nabla \operatorname{grad}\mathcal{F}(f_\bullet))\right)$$

が $(0,\infty)\times\mathbb{R}^n$ で成り立つ. また, “リーマン計量” $\langle\!\langle \cdot,\cdot \rangle\!\rangle$ から定まる “ノルム”を $\|\cdot\|$ と書く.

勾配流における単調性と収縮性

形式的な直接計算から

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}(f_t) = \langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t), \dot{f}_t \rangle\!\rangle = \langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t), -\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t) \rangle\!\rangle = -\|\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)\| \le 0$$

が従うので, $\mathcal{F}(f_t)$ は $t\in(0,\infty)$ に関して単調減少である. さらに

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dt^2}\mathcal{F}(f_t) = -\frac{d}{dt}\|\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)\|^2 &= 2\operatorname{Hess}\mathcal{F}(\dot{f}_t, -\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)) \\ &= 2\operatorname{Hess}\mathcal{F}(\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t), \operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)) \ge 2K\|\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)\|^2\end{aligned}$$

が成り立つので

$$\|\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)\| \le e^{-Kt}\|\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_0)\|$$

を得る. よって $K>0$ ならば $\|\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)\| \to 0$ $(t\to\infty)$ となる.

また, 最短測地線 $\gamma\colon [0,1]\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し, “テイラー展開”から

$$\mathcal{F}(\gamma(1)) \ge \mathcal{F}(\gamma(0)) + \langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}(\gamma(0)), \dot{\gamma}(0) \rangle\!\rangle + \frac{K}{2} d(\gamma(0),\gamma(1))^2$$

が従う. そして $\gamma(0)$ と $\gamma(1)$ の役割を入れ替え 2 つの不等式を足しあげると

$$K d(\gamma(0),\gamma(1))^2 \le \langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}(\gamma(1)), \dot{\gamma}(1) \rangle\!\rangle - \langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}(\gamma(0)), \dot{\gamma}(0) \rangle\!\rangle = \langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}(\gamma(\tau)), \dot{\gamma}(\tau) \rangle\!\rangle \Big|_{\tau=0}^{\tau=1}$$

を得る. また, $t_0>0$ に対し滑らかな写像 $\Gamma(t,\tau)\colon [0,\infty)\times[0,1]\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を

$$\Gamma(t,0)=f_t, \quad \Gamma(t,1)=g_t, \quad \gamma := \Gamma(t_0,\cdot)\times[0,1]\to\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \text{ は最短測地線}$$

をみたすように選び, そして Γ をパラメータ t または τ による曲線とみたときの曲線に沿った微分をそれぞれ ∇_t または ∇ と書く. すると γ は測地線なので $\nabla_\tau\dot{\gamma}=0$ が成り立ち, さらに

$$\nabla_t\nabla_\tau\Gamma(t,\tau) = \nabla_\tau\nabla_t\Gamma(t,\tau), \quad \nabla_t\Gamma(t,0) = \dot{f}_t = -\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t), \quad \nabla_t\Gamma(t,1) = \dot{g}_t = -\operatorname{grad}\mathcal{F}(g_t)$$

となる. よって

$$\begin{aligned}\lim_{t\to t_0+}\frac{1}{t-t_0}\left(d(f_t,g_t)^2 - d(f_{t_0},g_{t_0})^2\right) &\le \limsup_{t\to t_0+}\frac{1}{t-t_0}\left\{\int_0^1 \left(\|\nabla_\tau\Gamma(t,\tau)\|^2 - \|\nabla_\tau\Gamma(t_0,\tau)\|^2\right) d\tau\right\} \\ &= 2\int_0^1 \langle\!\langle \nabla_t\nabla_\tau\Gamma(t_0,\tau), \dot{\gamma}(\tau) \rangle\!\rangle d\tau = 2\int_0^1 \frac{\partial}{\partial\tau}\langle\!\langle \nabla_t\Gamma(t_0,\tau), \dot{\gamma}(\tau) \rangle\!\rangle d\tau \\ &= 2\langle\!\langle \nabla_t\Gamma(t_0,\tau), \dot{\gamma}(\tau) \rangle\!\rangle \Big|_{\tau=0}^{\tau=1} = -2\langle\!\langle \operatorname{grad}\mathcal{F}(\gamma(\tau)), \dot{\gamma}(\tau) \rangle\!\rangle \Big|_{\tau=0}^{\tau=1} \\ &\le -2K d(f_{t_0},g_{t_0})^2\end{aligned}$$

を得るので

$$d(f_t,g_t) \le e^{-Kt} d(f_t,g_t)$$

が成り立つ. よって $K>0$ ならば $d(f_t,g_t)\to 0$ $(t\to\infty)$ となる.

Displacement convexity class

ポテンシャルが K-凸ならば相対エントロピーも K-凸になることを 9 節でみた．他の K-凸関数を考えるために、McCann が導入した Displacement convexity class を扱う．

定義 12.1. $N \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ に対し, $\mathcal{DC}_N$ を

$$\Psi_{N,U}(\lambda) := \lambda^N U(\lambda^{-N})$$

が $(0,\infty)$ 上の凸関数になり, さらに $U(0) = 0$ をみたす連続な凸関数 $U\colon [0,\infty) \to \mathbb{R}$ の集合とする．同様に, $\mathcal{DC}_\infty$ を

$$\Psi_{\infty,U}(\lambda) := e^{\lambda} U(e^{-\lambda})$$

が $\mathbb{R}$ 上の凸関数になり, さらに $U(0) = 0$ をみたす連続な凸関数 $U\colon [0,\infty) \to \mathbb{R}$ の集合とする．

例 12.2. $N \in \mathbb{R} \setminus [0,1]$ に対し,

$$U_N(r) := -N\left(r^{1-\frac{1}{N}} - r\right) \quad (r \in [0,\infty))$$

と定めれば,

$$\Psi_{N,U_N}(\lambda) = -N(\lambda - 1) \quad (\lambda \in (0,\infty))$$

なので, $U_N \in \mathcal{DC}_N$ である．そして

$$U_\infty(r) := \lim_{N\to\infty} U_N(r) = r\log r \in \mathcal{DC}_\infty$$

である．

以下, $N \in (-\infty,0) \cup [n,\infty]$ とし, $U \in \mathcal{DC}_\infty$ を固定する．また, 簡単のために $U \in C^2((0,\infty))$ を仮定する．すると $f \in \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R})$ に対し,

$$\mathcal{F}_U(f) := \int_{\mathbb{R}^n} U(f(x))dx$$

は well-defined であり, $(-\infty,\infty]$ に値をとる．

定理 12.3. $\mathcal{F}_U\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}) \to (-\infty,\infty]$ は, 0-凸関数である．

概証. $N = \infty$ の場合のみを示す．$\mathcal{F}_U(f_0), \mathcal{F}(f_1) < \infty$ である最短測地線 $f_\bullet\colon [0,1] \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ と $\tau \in (0,1)$ に対し, 定理 8.2 の証明と同じ記号を用いると

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_U(f_\tau) = \int_{\mathbb{R}^n} U(f_\tau(z))dz &= \int_{T_{\varphi_\tau}(\Omega_\varphi)} \frac{1}{f_\tau(z)} U(f_\tau(z)) f_\tau(z) dz \\
&= \int_{\Omega_\varphi} \left(\frac{f_0(x)}{\det D_x(\tau)}\right)^{-1} U\left(\frac{f_0(x)}{\det D_x(\tau)}\right) f_0(x)dx \\
&= \int_{\Omega_\varphi} \Psi_x(\tau) f_0(x)dx \quad \left(\text{ただし } \Psi_x(\tau) := \Psi_{\infty,U}\left(-\log\left(\frac{f_0(x)}{\det D_x(\tau)}\right)\right)\right)
\end{aligned}$$

を得る．ここで $\Psi'_{\infty,U}$ は $(0,\infty)$ 上で非正, $\log\det D_x(\tau)$ は $[0,1]$ 上で凹なので, Ψ_x は $[0,1]$ 上で凸である．よって

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_U(f_\tau) &= \int_{\Omega_\varphi} \Psi_x(\tau) f_0(x)dx \\
&\le \int_{\Omega_\varphi} ((1-\tau)\Psi_x(0) + \tau\Psi_x(1))\, f_0(x)dx = (1-\tau)\mathcal{F}_U(f_0) + \tau\mathcal{F}_U(f_1)
\end{aligned}$$

が成り立つので, $\mathcal{F}$ は 0-凸関数である． □

以上より, $U \in \mathcal{DC}_N$ と K-凸関数 $V \in C(\mathbb{R}^n)$ に対し, $\mathcal{F}_U^V := \mathcal{F}_U + \mathcal{F}^V\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty,\infty]$ は K-凸である．

12. K-凸関数の勾配流

BGM : float

以下, K を実数とし, K-凸関数 $\mathcal{F}\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n) \to (-\infty, \infty]$ の勾配流 $f_\bullet, g_\bullet\colon [0,\infty) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ を考える. すなわち

$$\dot{f}_\bullet = -\underline{\qquad\qquad}_{(1)} \quad \left(あるいは \frac{\partial}{\partial t} f_\bullet = - \underline{\qquad\qquad\qquad}_{(2)}\right)$$

が $(0,\infty) \times \mathbb{R}^n$ で成り立つ.

このとき,

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}(f_t) \leq \underline{\qquad\qquad\qquad}_{(3)},$$
$$\|\operatorname{grad}\mathcal{F}(f_t)\| \leq \underline{\qquad\qquad\qquad}_{(4)},$$
$$d(f_t, g_t) \leq \underline{\qquad\qquad\qquad}_{(5)}$$

が成り立つ.

また, $N \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ に対し, $\mathcal{DC}_N$ を

$$\Psi_{N,U}(\lambda) \coloneqq \lambda^N U(\lambda^{-N})$$

が $(0,\infty)$ 上の凸関数になり, さらに $U(0) = 0$ をみたす連続な凸関数 $U\colon [0,\infty) \to \mathbb{R}$ の集合とする. 同様に, $\mathcal{DC}_\infty$ を

$$\Psi_{\infty,U}(\lambda) \coloneqq \underline{\qquad\qquad\qquad}_{(6)}$$

が $\mathbb{R}$ 上の凸関数になり, さらに $U(0) = 0$ をみたす連続な凸関数 $U\colon [0,\infty) \to \mathbb{R}$ の集合とする. すると $N \in (-\infty, 0) \cup [n, \infty]$ に対し, $\mathcal{F}_U\colon \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}) \to (-\infty, \infty]$ は well-defined であり, そして $\underline{\qquad\quad}_{(7)}$-凸関数になる.

12. K-凸関数の勾配流

BGM : float

問題 1. $N \in (-\infty, 0) \cup (0, \infty]$ とし, $U \in \mathcal{DC}_N \cap C^2((0,\infty))$ のその圧力

$$p_U(r) \coloneqq rU'(r) - U(r) \quad (r > 0)$$

を考える. また, $1/\infty \coloneqq 0$ とする.

(1) $r > 0$ に対し, $rp'_U(r) \geq \left(1 - \dfrac{1}{N}\right) p_U(r)$ が成り立つことを示せ.

(2) 適切な正則性をもつ曲線 $f_\bullet \colon (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ に対し,

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}(U(f_t)) = -\int_{\mathbb{R}^n} \langle \operatorname{div} U'(f_t(x)), \dot{f}_t(x) \rangle f_t(x) dx$$

が成り立つことを示せ.

(3) $\mathcal{F}_U$ の勾配流の $f_\bullet \colon [0, \infty) \to \mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ が

$$\frac{\partial}{\partial t} f_\bullet = \Delta p_U(f_\bullet)$$

の解であることを示せ.

例えば $N \in \mathbb{R} \setminus [0, 1]$ に対し,

$$U_N(r) \coloneqq -N\left(r^{1-\frac{1}{N}} - r\right) \quad (r \in [0, \infty))$$

と定めれば,

$$p_{U_N}(r) = r^{1-\frac{1}{N}}$$

であり, $\mathcal{F}_{U_N}$ の勾配流は

$$\frac{\partial}{\partial t} f_\bullet = \Delta\left(f_\bullet^{1-\frac{1}{N}}\right)$$

になる.

おわりに

BGM：エンドロール

このノートでは最適輸送理論の背景や一般論は述べずに, 特別な場合のみを考えました. 背景は参考文献中でみつけられるので割愛しますが, 一般論について少し述べると, 例えば, 6 節で述べたように $\mathcal{P}_2^{\mathrm{ac}}(\mathbb{R}^n)$ ではなく 2 次モーメントが有限な $\mathbb{R}^n$ 上のボレル確率測度がなす集合 $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^n)$ を考えたり, $\mathbb{R}^n$ の代わりに完備可分な距離空間を考えることができます. さらに 2 次ではなく p 次モーメント (ただし $p \in [1, \infty)$) が有限である場合を考え, そして費用関数 (最小化問題に現れる被積分関数) を距離関数の 2 乗から p 乗に変えて論じることができます. より一般に, 費用関数として距離関数のべき乗以外の関数 (例えば連続関数) を扱うこともできます.

このように選択がたくさんある中で, ノートにおいてなぜこの設定を選んだかというと, この設定が基本かつ基礎となっていると考えているからです.:

- 完備かつ可分 (でありさらに測地的) な距離空間の例として $\mathbb{R}^n$ を選ぶことに異論を唱える方は少ないと思います. また, (費用関数が距離関数の 2 乗である場合に) Kantorovich ポテンシャルの存在は $\mathbb{R}^n$ だけではなく完備かつ可分な距離空間に対しても保証されています. 証明の方針は $\mathbb{R}^n$ の場合でも一般の完備かつ可分な距離空間の場合でも同じなので, まずは理論が追いやすい $\mathbb{R}^n$ を記した方が良いと思い $\mathbb{R}^n$ を選びました.
- 個人的には最適輸送理論をリーマン多様体で考え, 曲率がどのように影響するかを解析することに興味があります. しかしリーマン多様体について考察を深める前に, まずはしっかりとユークリッド空間の理論を理解することはとても有益だと思います.
- 費用関数として距離関数の 2 乗を選んだ理由は, 2 つあります.
  - 1 つ目はこの場合の最適輸送理論から距離構造が導かれるからです. 一方, 費用関数として距離関数の p 乗を選んだとしても距離構造が導かれます.
  - べき乗の中で 2 乗を選んだ理由は, 距離構造が内積構造 (リーマン構造) のようなものと関連しており豊富な応用があるからです. また, 費用関数が距離関数の p 乗である場合も Kantorovich ポテンシャルが存在することが知られています. 証明の方針は 2 乗の場合でも一般のべき乗の場合でも同じなので, まずは凸共役と関係があり, そして理論が追いやすい 2 乗の場合を記した方が良いと思い 2 乗を選びました.

また記号について, 最適輸送理論における共通認識の記号と人によって異なる記号があります. 例えば, 双対問題を考える際に, この本の 4 節では条件

$$\phi(x) + \psi(y) \leq |x - y|^2 \quad (x, y \in \mathbb{R}^n)$$

を課しました. 文献 [1],[3] では ϕ の代わりに φ を用いますが条件は同じです. しかし文献 [2] では

$$\phi(y) - \psi(x) \leq |x - y|^2 \quad (x, y \in \mathbb{R}^n)$$

という条件を課し, そして文献 [4] では

$$-\varphi(x) + \psi(x) \leq |x - y|^2 \quad (x, y \in \mathbb{R}^n)$$

という条件を課します. すなわち記号だけでなく符号も変わります. そこでそれぞれの参考文献を読む際は, まずは記号の確認することをお勧めいたします. ちなみにこのノートの記号はなるべく今執筆中の本 [5] と揃えているので, その点は受け入れやすいのではないかと思います.

本当の最後に, このノートを手に取っていただき, 誠にありがとうございました. はじめ述べたことの繰り返しになりますが, また, 誤植や議論の誤りを見つけた場合や何かお気づきのことがありましたら, 私 (`asuka` あっとまーく `tmu.ac.jp`) 宛にご連絡いただければ幸いです.

文責：高津　飛鳥