私的最適輸送理論

-離散とユークリッドの場合-

高津飛鳥 (asuka@tmu.ac.jp)

1 離散の場合

最適輸送理論とは, 名前の通り輸送を最適に行うための理論です. 例えば以下の問題を考えます.

問 1.1 飲み薬をつくる工場が I 個あり, それを必要とする病院が J 個ある.

設定 1 i 番目の工場の薬の生産量を x_i とする.

設定 2 j 番目の病院で必要な薬の量を y_j とする.

設定 3 薬の総生産量と総必要量は一致する. すなわち, $\sum_{i=1}^{I} x_i = \sum_{j=1}^{J} y_j$ とする.

設定 4 i 番目の工場から j 番目の病院への薬の単位輸送費用を c_{ij} とする.

このとき, 総輸送費用が最安になる輸送法を求めよ.

問題を考えるにあたり, まずは**輸送法**とは何かということを考えます. ここでは i 番目の工場から j 番目の病院へ輸送する薬の量 π_{ij} を決めることを輸送法とします. すなわち, 輸送法とは $I \times J$ 行列 $\Pi = (\pi_{ij})_{1 \le i \le I, 1 \le i \le J}$ のことです. このとき, i 番目の工場からどこかしらの病院に運ばれる薬の量は x_i なので

$$\sum_{j=1}^{J} \pi_{ij} = x_i$$

を満たす必要があります. 同様にどこかしらの工場から j 番目の病院に運び込まれる薬の量は y_j なので

$$\sum_{i=1}^{I} \pi_{ij} = y_j$$

を満たす必要があります. 以下, 自然な仮定として, 薬の生産量 x_i や必要量 y_j, および輸送量 π_{ij} は全て非負であるとします. すると輸送法がなす集合は

$$\Pi(x, y) := \left\{ \Pi = (\pi_{ij})_{1 \le i \le I, 1 \le i \le J} \in M_{I \times J}(\mathbb{R}_{\ge 0}) \;\middle|\; \begin{array}{ll} \sum_{j=1}^{J} \pi_{ij} = x_i & (1 \le i \le I) \\ \sum_{i=1}^{I} \pi_{ij} = y_j & (1 \le j \le J) \end{array} \right\}$$

で与えられます. 例えば, $I \times J$ 行列 $x \otimes y$ を

$$(x \otimes y)_{ij} := x_i y_j$$

と定めれば, $x \otimes y$ は $\Pi(x, y)$ に属します. (この輸送法 $x \otimes y$ は, 生産量と必要量の割合のみに応じて薬の輸送量を決める輸送法です.) これより $\Pi(x, y)$ が空集合ではないことが分かります. また, $\Pi(x, y)$ は $M_{I\times J}(\mathbb{R}) = \mathbb{R}^{I\times J}$ のコンパクトな部分集合です. そして輸送法 $\Pi = (\pi_{ij})_{1\leq i\leq I, 1\leq i\leq J}$ に沿って薬を輸送するとき, i 番目の工場から j 番目の病院への薬の総輸送費用は

$$c_{ij}\pi_{ij} \quad (\text{単位輸送費用} \times \text{輸送量})$$

なので, 全体の総輸送費用は

$$\mathcal{C}(\Pi) := \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} c_{ij}\pi_{ij}$$

となります. 以上より, 集合 $\Pi(x, y)$ 上の関数 $\mathcal{C}(\Pi)$ を最小化する $\Pi \in \Pi(x, y)$ を求めれば, 問題が解けたことになります. ここで最小化因子の存在性は, 関数 $\mathcal{C}$ がコンパクト集合 $\Pi(x, y)$ 上で連続であることから従います. 以下, 最小化因子となる輸送法を**最適輸送法**と呼びます.

一般に, 最適輸送法は一意ではありません. 実際に c_{ij} が恒等的に定数 c になるならば, 任意の $\Pi \in \Pi(x, y)$ に対し

$$\mathcal{C}(\Pi) = \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} c_{ij}\pi_{ij} = c \cdot \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} \pi_{ij} = \sum_{i=1}^{I} x_i = \sum_{j=1}^{J} y_j$$

となるので, 全ての輸送法が最適輸送法になります. そして最適輸送法を探すにはそれなりの時間が掛かるそうで, 高速に計算できる正則化した最小化問題が提案されているようです. (例えば, [4] とその中の参考文献を参照にしてください.)

また, 最適輸送法の特徴付けとして次が知られています.

定理 1.2 ([7, Theorem 5.10]) *輸送法 $\Pi \in \Pi(x, y)$ に対し, その台を*

$$\mathrm{supp}(\Pi) := \{(i, j) \in \{1, \cdots, I\} \times \{1, \cdots, J\} \mid \pi_{ij} \neq 0\}$$

と定める. このとき Π が最適輸送法になることと, $\mathrm{supp}(\Pi)$ の任意の M 組の点 $\{(i_m, j_m)\}_{m=1}^{M}$ と M 次置換 σ に対し

$$\sum_{m=1}^{M} c_{i_m j_m} \leq \sum_{m=1}^{M} c_{i_{\sigma(m)} j_m} \tag{1}$$

が常に成り立つことは同値である.

関係式 (1) の性質は *c-cyclical monotonicity* と呼ばれます.

実際に, 最適輸送法 Π の台 $\mathrm{supp}(\Pi)$ に対し, 関係式 (1) が成り立たない, すなわち $\mathrm{supp}(\Pi)$ のある M 組の点 $\{(i_m, j_m)\}_{m=1}^M$ と M 次置換 σ が存在し,

$$\sum_{m=1}^{M} c_{i_m, j_m} > \sum_{m=1}^{M} c_{i_{\sigma(m)} j_m}$$

となるとします. そして $\varepsilon := \min\{\pi_{i_m j_m} |\ 1 \le m \le M\}$ とし, $I \times J$ 行列 Π^ε を

$$\pi_{ij}^\varepsilon := \begin{cases} \pi_{ij} - \varepsilon & \big((i,j) \in \{(i_m, j_m)\}_{m=1}^M\big) \\ \pi_{ij} + \varepsilon & \big((i,j) \in \{(i_{\sigma(m)}, j_m)\}_{m=1}^M\big) \\ \pi_{ij} & (\text{その他}) \end{cases}$$

と定めれば, $\Pi^\varepsilon \in \Pi(x, y)$ となります. このとき,

$$\begin{aligned} 0 \le \mathcal{C}(\Pi^\varepsilon) - \mathcal{C}(\Pi) &= \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} c_{ij} \pi_{ij}^\varepsilon - \sum_{i=1}^{I} \sum_{j=1}^{J} c_{ij} \pi_{ij} \\ &= -\varepsilon \sum_{m=1}^{M} c_{i_m j_m} + \varepsilon \sum_{m=1}^{M} c_{i_{\sigma(m)} j_m} \\ &= \varepsilon \sum_{m=1}^{M} \Big(c_{i_{\sigma(m)}, j_m} - c_{i_m j_m} \Big) < 0 \end{aligned}$$

となり矛盾が生じます. よって, 最適輸送法 Π の台 $\mathrm{supp}(\Pi)$ に対し, 関係式 (1) が常に成り立つことが分かりました.

逆の関係を示すには, 任意の $z \in \mathbb{R}^I$ に対し $z^c \in \mathbb{R}^J$ を

$$z_j^c := \min_{1 \le i \le I} \{z_i + c_{ij}\}$$

と定めると,

$$\min_{\Pi \in \Pi(x,y)} \mathcal{C}(\Pi) = \sup \left\{ -\sum_{i=1}^{I} z_i x_i + \sum_{j=1}^{J} z_j^c y_j \ \middle|\ z \in \mathbb{R}^I \right\}.$$

が成り立つことを用います. 証明の鍵は $\Pi \in \Pi(x, y)$ の台 $\mathrm{supp}(\Pi)$ に対し関係式 (1) が常に成り立つとき, $(i, j) \in \mathrm{supp}(\Pi)$ ならば, $-z_i + z_j^c = c_{ij}$ となる $z \in \mathbb{R}^I$ が存在し, この z が上式右辺の上限を達成することです. そしてこの関係より, *Kantorovich* の双対性と呼ばれる以下の関係

$$\min_{\Pi \in \Pi(x,y)} \mathcal{C}(\Pi) = \sup \left\{ -\sum_{i=1}^{I} \xi_i x_i + \sum_{j=1}^{J} \eta_j y_j \ \middle|\ -\xi_i + \eta_j \le c_{ij} \ \ (1 \le i \le I, 1 \le j \le J) \right\}$$

が成り立つことが分かります.

2　ユークリッドの場合

ユークリッド空間における最適輸送理論を考えるために, まずは物質の分布状態を何で表すかを考えます. ここではユークリッド空間の点 z における物質量をユークリッド空間上の関数 $h(z)$ を用いて表すことにします.

問 2.1 物質をとある場所から他の場所に運ぶ.

設定 1 輸送前の点 $x \in \mathbb{R}^I$ における物質量を $\mathbb{R}^I$ 上の非負値可積分関数 $f(x)$ で表す.

設定 2 輸送後の点 $y \in \mathbb{R}^J$ における物質量を $\mathbb{R}^J$ 上の非負値可積分関数 $g(y)$ で表す.

設定 3 輸送前後の総物質量は一致する. すなわち, $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^I} f(x)dx = \int_{\mathbb{R}^J} g(y)dy$ とする.

設定 4 点 x から点 y への物質薬の単位輸送費用 $c(x,y)$ を可測関数 $c : \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^J \to \mathbb{R}$ で表す.

このとき, 総輸送費用が最安になる輸送法を求めよ.

離散の場合と同様に (しかし点から点への対応ではなく, 集合から集合への対応を考え), 地域 $A \subset \mathbb{R}^I$ から地域 $B \subset \mathbb{R}^J$ に輸送する物質量 $\pi(A \times B)$ を決めることを輸送法とします. すると輸送法は $\mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^J$ 上の測度と見なせます. (輸送前後の物質の分布状態も関数ではなく測度を用いて表すことができます. この場合でも, 輸送法は測度で表せます.) そして離散の場合と同様の条件を満たす, すなわち地域 $A \subset \mathbb{R}^I$ からどこかしらに運ばれる物質量は $\displaystyle\int_A f(x)dx$, どこかしらから地域 $B \subset \mathbb{R}^J$ に運び込まれる物質量は $\displaystyle\int_B g(y)dy$ となる必要があるので, 輸送法がなす集合は

$$\Pi(f,g) := \left\{ \pi : \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^J \text{ 上の非負測度} \;\middle|\; \begin{array}{ll} \pi(A \times \mathbb{R}^J) = \displaystyle\int_A f(x)dx & (A \subset \mathbb{R}^I) \\ \pi(\mathbb{R}^I \times B) = \displaystyle\int_B g(y)dy & (B \subset \mathbb{R}^J) \end{array} \right\}$$

で与えられます. そして輸送法 π に沿って物質を輸送すると全体の総輸送費用は

$$\mathcal{C}(\pi) := \int_{\mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^J} c(x,y)d\pi(x,y)$$

となります. 例えば, $\mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^J$ 上の測度 $f \otimes g$ を

$$(f \otimes g)(Z) := \int_Z f(x)g(y)dxdy \qquad (Z \subset \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^J)$$

と定めると, $f \otimes g$ は $\Pi(f,g)$ に属します. (離散の場合の $x \otimes y$ に対応するものです.) よって $\Pi(f,g)$ は空集合ではないことが分かります. さらに $\Pi(f,g)$ は弱位相に関してコンパ

クトになります. また $c:\mathbb{R}^I\times\mathbb{R}^J\to\mathbb{R}$ が非負値かつ連続であれば, $\mathcal{C}$ は $\Pi(f,g)$ 上の下半連続関数となります. そこで

$$\inf_{\pi\in\Pi(f,g)}\mathcal{C}(\pi)<\infty$$

ならば最小化因子が存在し, 問題が解けたことになります. (詳しい証明は例えば, [7, Theorem 4.1] を参照にしてください.) 離散の場合と同様に, 最小化因子となる輸送法を**最適輸送法**と呼びます. ユークリッドの場合も最適輸送法は一意的に定まるとは限らず, そして最適輸送法の台は c-cyclically monotone になります. また, Kantorovich の双対性も成り立ちます.

特に $I=J=d$ とし, さらに $c:\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ を $c(x,y)=|x-y|^2$ で与え, そして

$$\int_{\mathbb{R}^d}|x|^2f(x)dx,\quad \int_{\mathbb{R}^d}|y|^2g(y)dy$$

がともに有限ならば, 最適輸送法は一意的に存在します. この場合は, 地域 A から地域 B への物質の輸送量を表す輸送法のみならず, 点 x にある物質をどの場所 $y=T(x)$ に運ぶかを表す**輸送計画写像** $T:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^d$ が決定します. ここで輸送計画写像に対し, 地域 $B\subset\mathbb{R}^d$ に運び込まれる物質量はもともとの地域 $T^{-1}(B)\subset\mathbb{R}^d$ にあった物質量と一致する必要があるため

$$\int_B g(y)dy=\int_{T^{-1}(B)}f(x)dx$$

が成り立つ必要があります. そして輸送計画写像 T に対し $\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d$ の測度 π_T を

$$\pi_T(Z):=\int_{\{x\in\mathbb{R}^d\ |(x,T(x))\in Z\}}f(x)dx\qquad(Z\subset\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d)$$

と定めれば, $\pi_T\in\Pi(f,g)$ となります. Brenier [1] はこの設定下で, 最適輸送法を特徴付ける輸送計画写像 $T:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^d$ が一意的に定まり, そして $\mathbb{R}^d$ 上の凸関数の勾配ベクトル場で与えられることを示しました.

より一般に, $c(x,y)=|x-y|^p$ (ただし $p\geq 1$) の場合でも最適輸送法の一意存在性, および最適輸送法を特徴付ける輸送計画写像の一意存在性が知られています. 例えば, Gangbo と McCann [6] は $c(x,y)=|x-y|^p$ (ただし $p>1$) を含む一般の場合に対する統一的な考察を与えました.

また, ユークリッドの場合にも正則化した最小化問題が提案されています. 例えば, Fathi, Gozlan, Prod'homme [5] は正則化した最小化問題を用いて, Caffarelli の縮小定理 [3] を示しました. Caffarelli の縮小定理は, $c(x,y)=|x-y|^2$ の場合の最適輸送法を特徴付ける輸送計画写像が, ある条件下では 1-リプシッツになることを保証します. 余談ですが Caffarelli [2] は, $c(x,y)=|x-y|^2$ の場合の最適輸送法を特徴付ける輸送計画写像が連続にすらならない例を構築しました.([7, Theorem 12.3] も参照にすると良いと思います.) Fathi, Gozlan, Prod'homme が用いている正則化は, 恐らくは最小化問題の高速計算を目指して導入されたわけではなく, [4] で提唱された正則化の仕方と大きく異なります.

参考文献

[1] Y. Brenier, *Polar factorization and monotone rearrangement of vector-valued functions*, Comm. Pure Appl. Math. **44** (1991), no. 4, 375–417.

[2] L. A. Caffarelli, *The regularity of mappings with a convex potential*, J. Amer. Math. Soc. **5** (1992), no. 1, 99–104.

[3] ———, *Monotonicity properties of optimal transportation and the FKG and related inequalities*, Comm. Math. Phys. **214** (2000), no. 3, 547–563.

[4] M. Cuturi, *Sinkhorn distances: Lightspeed computation of optimal transport*, Advances in Neural Information Processing Systems **26** (2013), 2292–2300.

[5] M. Fathi, N. Gozlan, and M. Prod'homme, *A proof of the Caffarelli contraction theorem via entropic regularization*, Calc. Var. Partial Differential Equations **59** (2020), no. 3, Paper No. 96, 18.

[6] W. Gangbo and R. J. McCann, *The geometry of optimal transportation*, Acta Math. **177** (1996), no. 2, 113–161.

[7] C. Villani, *Optimal transport*, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 338, Springer-Verlag, Berlin, 2009. Old and new.